

苏州大学 结构化学（一） 课程
期 末 试 卷 （A）卷 主观题 共 1 页

考试形式 闭卷 2022 年 6 月

学院（部） 材料与化学化工学部 年级 19 级 专业 化学、应化

计算题和简述题 (5 道题，共 49 分)

- 1、(1) 试画出 $[\text{CoF}_6]^{3-}$ 络合离子中 Co^{3+} 的 d 电子排布图；
(2) 试计算该配合物的晶体场稳定化能 (CFSE)；
(3) 计算 d 电子自旋角动量以及自旋磁矩的大小。 (本题 8 分)
- 2、闪锌矿 (ZnS 型结构) 属于立方晶系，锌原子在顶点与面心位置，硫原子位于晶胞内部相间隔的 4 个小立方体的中心。晶胞的边长为 540.9 pm 。试回答
(1) S 原子的配位数是多少？硫原子处于锌原子围成的什么形状的空隙中？
(2) 写出晶胞中硫原子的分数坐标；计算 Zn-S 键的键长。
(3) 已知 Zn 的原子量为 65.41，S 的原子量为 32.07。计算 ZnS 晶体的密度。 (本题 8 分)
- 3、(1) 写出原子单位制下，Be 原子中电子的 Schrödinger 方程；
(2) 写出 Be 原子激发态 $1s^2 2s^1 2p^1$ 可能的 Slater 行列式波函数 (写出任意一种可能即可) 和对应的所有的光谱项和光谱支项。 (本题 8 分)
- 4、试用分子轨道理论回答以下问题：
(1) 写出 CO 分子的电子组态，计算其键级，说明其中的化学键特征；
(2) 根据 CO 和金属间 π -配键的形成方式，绘图加文字阐明 CO 为什么为强配位体，并说明配位后 CO 的键长是如何变化的；
(3) 根据 18 电子规则，写出下列羰基配合物分子中 n 的数目，同时给出这些配合物的立体构型： $\text{Fe}(\text{CO})_n$ ， $\text{Ni}(\text{CO})_n$ 。 (本题 12 分)
- 5、(1) 写出烯丙基自由基 ($\text{H}_2\dot{\text{C}}-\text{CH}=\text{CH}_2$) 分子中 π 电子的 Hückel 行列式；
(2) 用 HMO 法求出该自由基基态的 π 电子总能量和离域能；
(3) 已知该“分子”的 3 个 π -MO 如下，试求该“分子”的分子图。

$$\psi_1 = \frac{1}{2}\phi_1 + \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3 \quad \psi_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_3 \quad \psi_3 = \frac{1}{2}\phi_1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3$$

(本题 13 分)