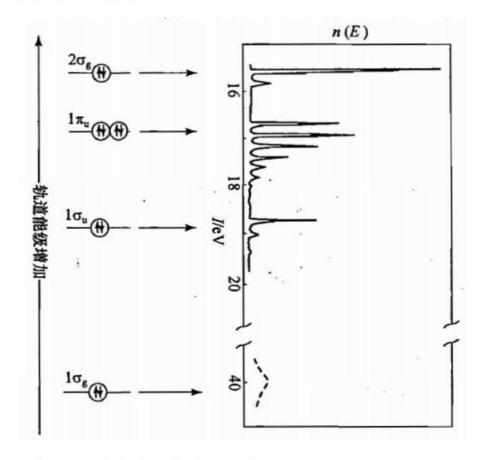
ZQKCHO 光电子能谱

- (11 分)光电子能谱是分子轨道理论的重要实验基础。根据光源不同,光电子能谱可分为紫外光电子谱(UPS)和X射线光电子能谱(XPS)
- 1. ①X 射线光电子能谱常用 Al Ka 辐射(hv=1486.6ev)作为光源,若将这样的射线照射在金属钠上,请求出光电子的速率 V 的最大值(2 分)(金属钠的逸出功 hv_0 =2.486ev, m_e =9.1094×10⁻³¹kg,光速 C=2.99792×10⁸m/s,结果保留 4 位有效数字)
- ②以上做法无实际意义,请简要指出原因(1分)
- 2. 紫外光电子能谱常用于价层电子,可利用其谱图判断所电离的电子为成键电子,非键电子,还是反键电子

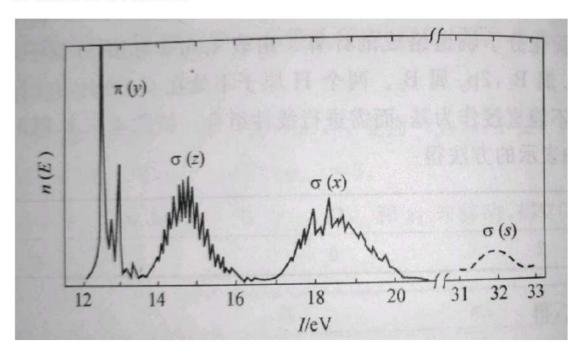
N₂的光电子能谱图:



①在图上标出各峰所对应的分子轨道(2分)

- ②在你标出的分子轨道中,有哪些具有较为明显的非键成份?为什么?(2分)
- ③由此归纳出光电子能谱中非键轨道与成键轨道表现的特征性差异,并尝试解释其原因(2分)

3. 水分子光电子能谱图:



请据图绘出 H_2O 分子的分子轨道能级图 (不要求用对称群作为分子轨道的表示符号) (2 分)