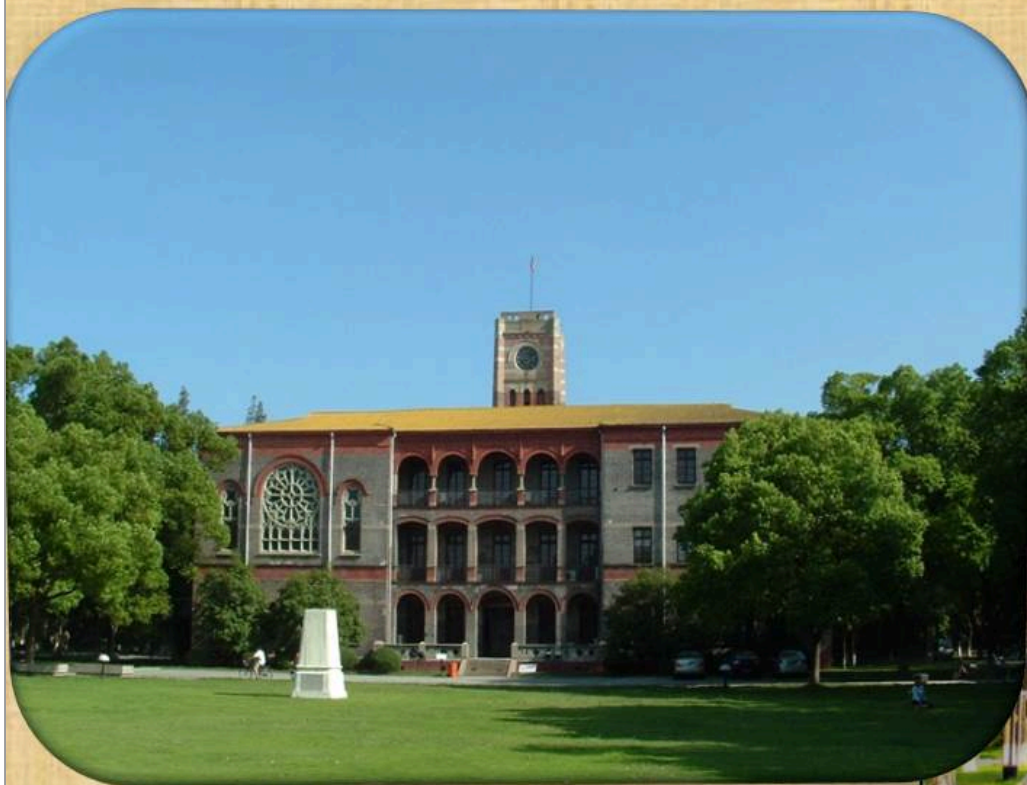




结构化学习题参考答案



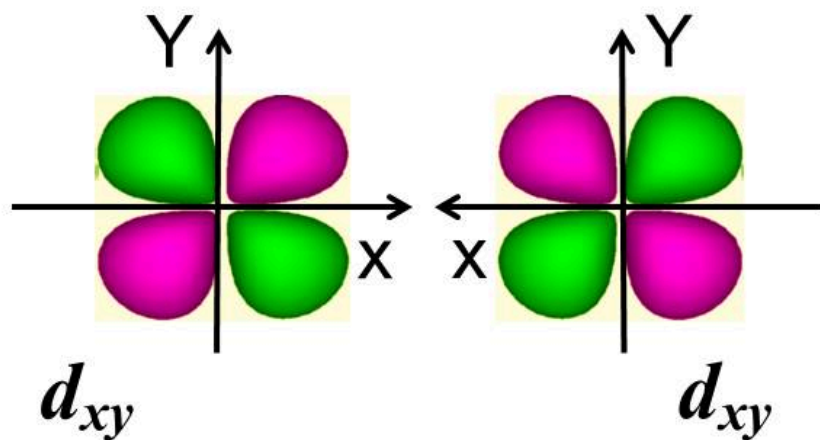
2025/5/14



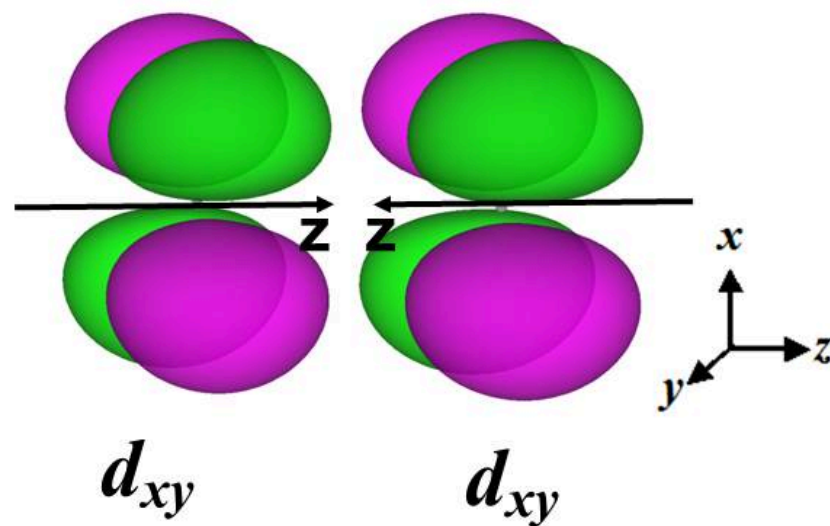


1. 画图示意 d_{xy} 和 d_{xy} 轨道沿 x 和 z 轴作用时, 分别能形成何
种类型的分子轨道。

解析:



“肩并肩”形成 π 型-MO



“面贴面”形成 δ 型-MO



2.应用分子轨道理论回答下列问题:

(1)分别给出 C_2 , NO, O_2^+ , BN, BO 的电子排布, 指出其键级、磁性和成键特点。

分析:

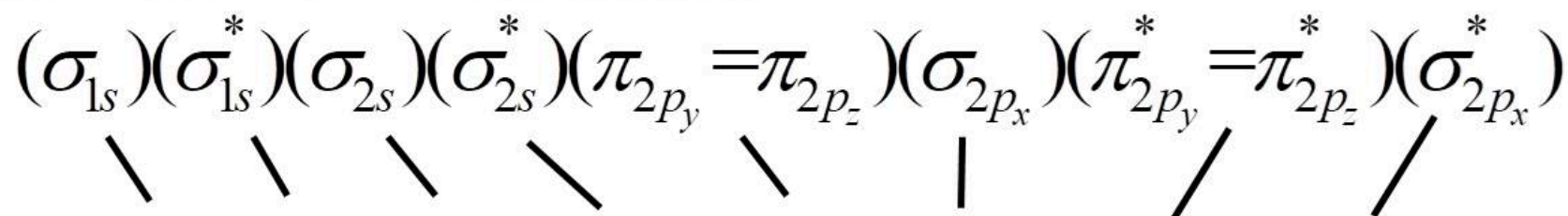
(1) C_2 , NO, BN, BO中含有B, C, N元素, 有“插氮现象”, 分子轨道能级序与 B_2 , C_2 , N_2 的能级序相同

(2) NO, O_2^+ 为等电子体 (均有15e), 但NO有“插氮现象”, 而 O_2^+ 没有。

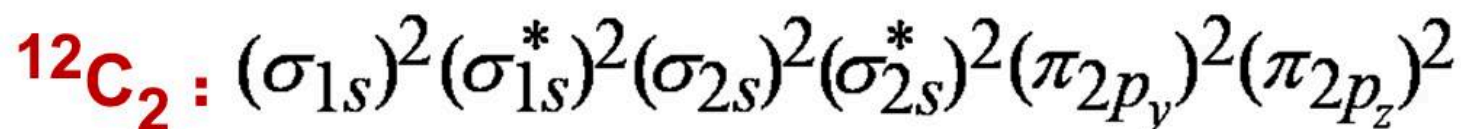
(3) NO, BN, BO等为异核双原子分子, 没有对称中心, 能级序要用 $1\sigma, 2\sigma, \dots, 1\pi, 2\pi, \dots$ 表示



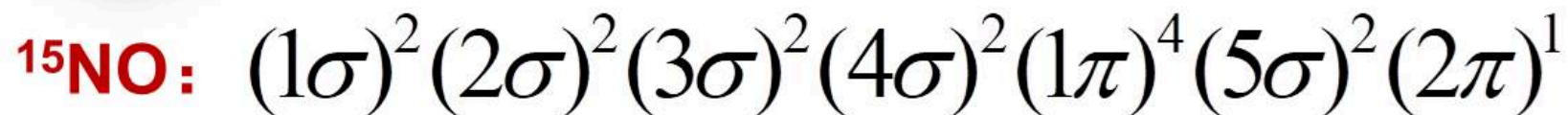
B₂, C₂, N₂ : 插氮现象



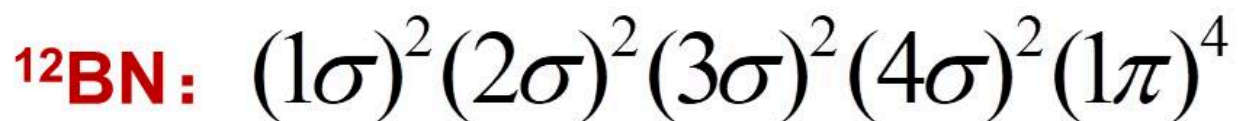
含B, C, N的异核双原子分子 : 插氮现象



2个双电子 π 键, 键级=2, 反磁性



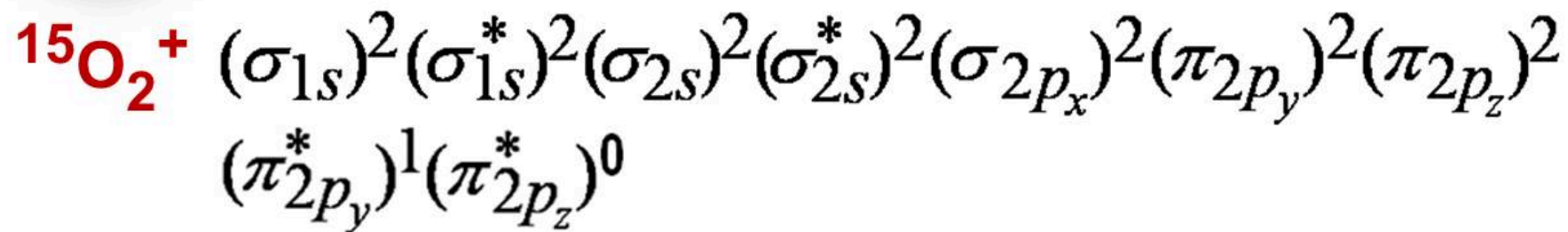
1个双电子 σ 键 (5σ) ; 1个三电子 π 键; 1个双电子 π 键, 键级=2.5



2个双电子 π 键 (1π) , 键级=2。



2个双电子 π 键 (1π) , 1个单电子 σ 键 (5σ) , 很容易被氧化。键级=2.5。

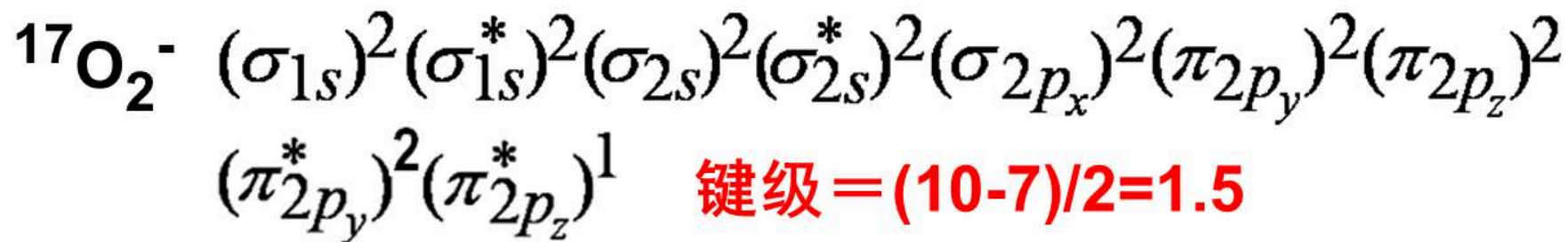
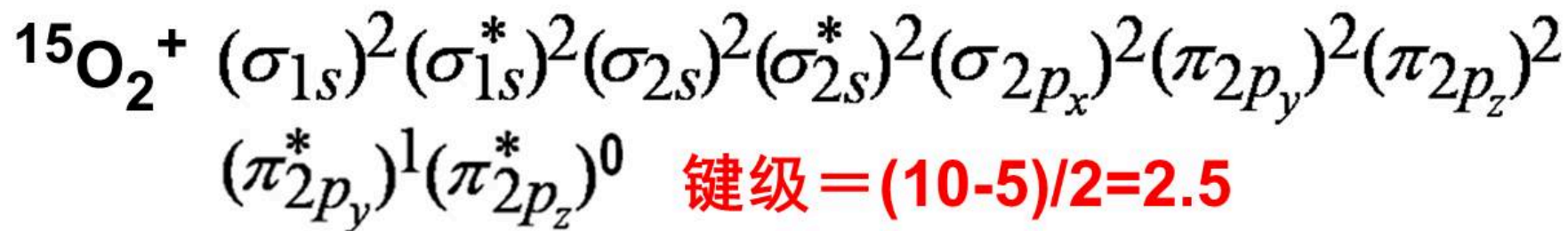
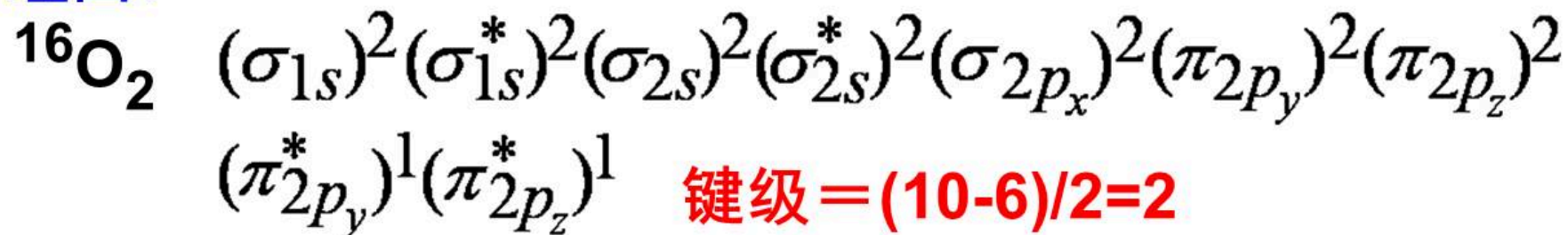


$$\text{键级} = (10-5)/2 = 2.5$$

化学键特征：1个双电子 σ 键（ σ_{2p_x} ）；1个三电子 π 键（ π_{2p_y} ）；1个双电子 π 键（ π_{2p_z} ）。



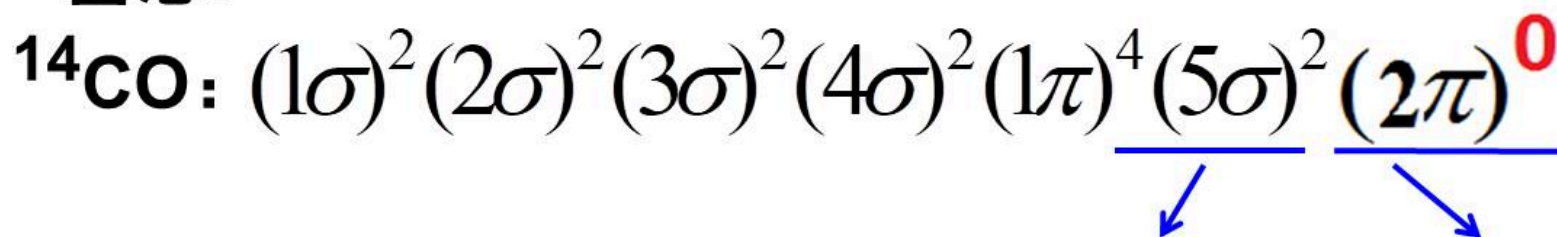
(2) 指出 O_2 , O_2^+ , O_2^- 的键长、键能的顺序, 并说明理由。



键级越大, 键能越大, 键长越短。



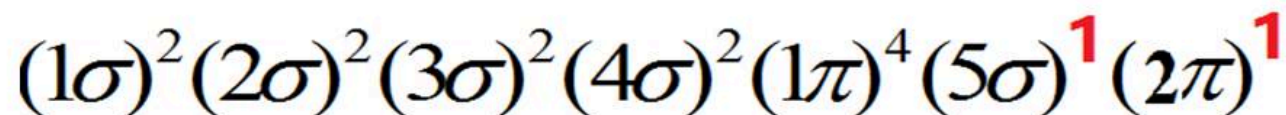
基态:



键级 = (10-4)/2=3

最高占有轨道 最低未占轨道
(HOMO) (LUMO)

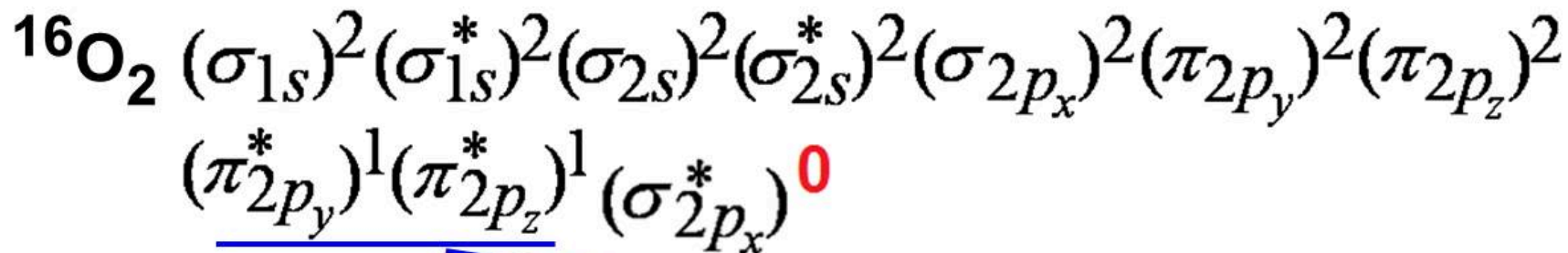
第一激发态:



键级 = (9-5)/2=2



基态:

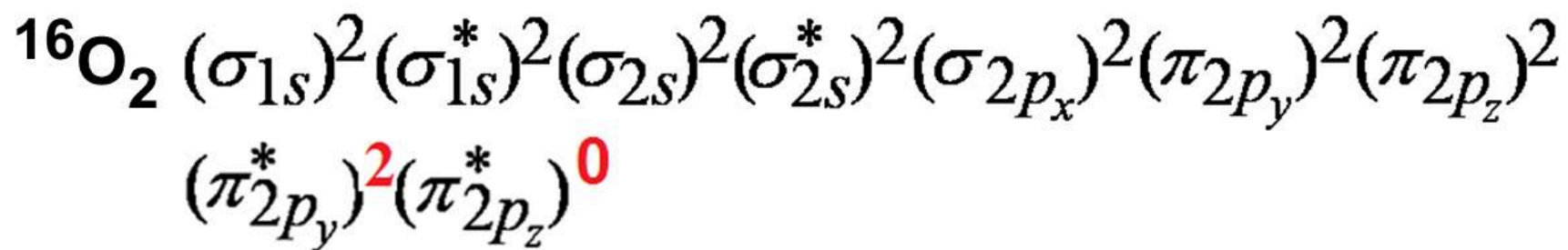


键级 = $(10-6)/2=2$ 单电子占据轨道 (SOMO)

电子占据			
电子谱项	$^3\Sigma_g^-$	$^1\Delta_g$	$^1\Sigma_g^+$
辐射寿命	基态	45min	8s



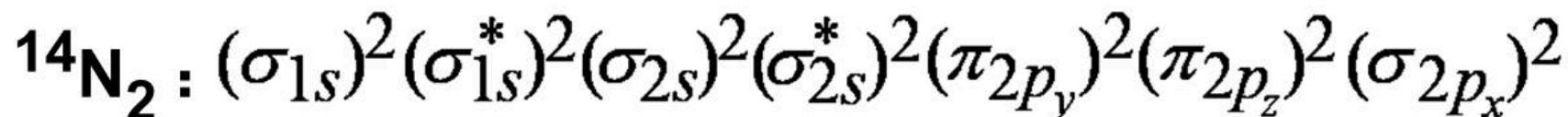
第一激发态:



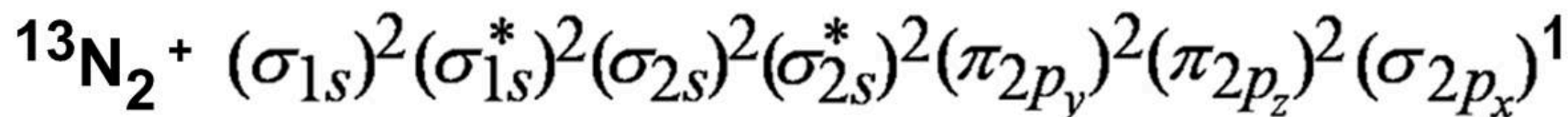
$$\text{键级} = (10-6)/2=2$$



补充题1： 已知 N_2 的键能为 7.37eV ，比 N_2^+ 的键能 6.34eV 大，但 O_2 的键能 5.08eV 却比 O_2^+ 的键能 6.48eV 小。这个事实应如何解释？

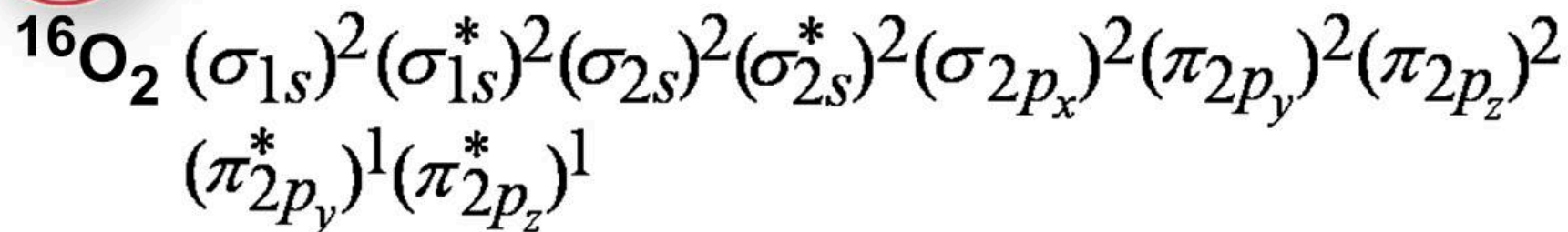


$$\text{键级} = (10-4)/2 = 3$$

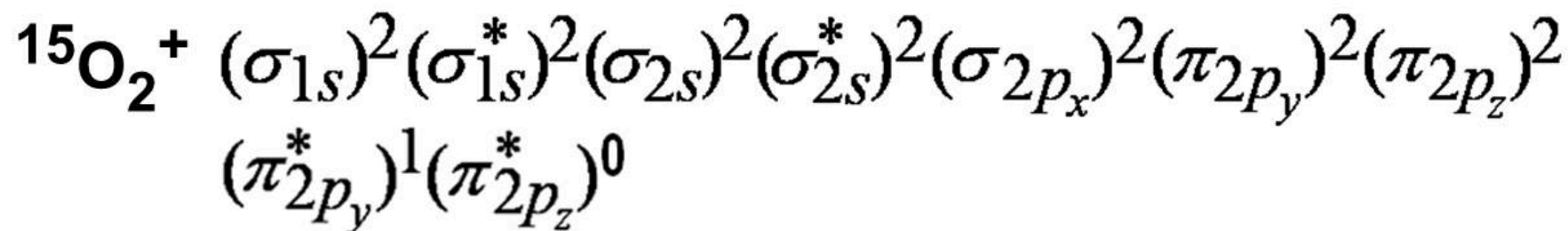


$$\text{键级} = (9-4)/2 = 2.5$$

N_2 的键级为3；相比 N_2 ， N_2^+ 的成键电子数少了一个，所以键级减小（ $\text{BO}=2.5$ ），键能也变小。



$$\text{键级} = (10-6)/2 = 2$$



$$\text{键级} = (10-5)/2 = 2.5$$

O_2 的键级为2；相比 O_2 ， O_2^+ 的反键电子数少了一个，所以键级增加（ $\text{BO}=2.5$ ），键能也变大。



补充题2:

用紫外光照射某双原子分子，使该分子电离出一个电子。如果电子电离后该分子的核间距变长了，则表明该电子()

- ☒ A 从成键MO上电离出去的。
- ☐ B 从非键MO上电离出去的。
- ☐ C 从反键MO上电离出去的。
- ☐ D 不能断定是从哪个轨道上电离出去的。