



# 结构化学习题参考答案



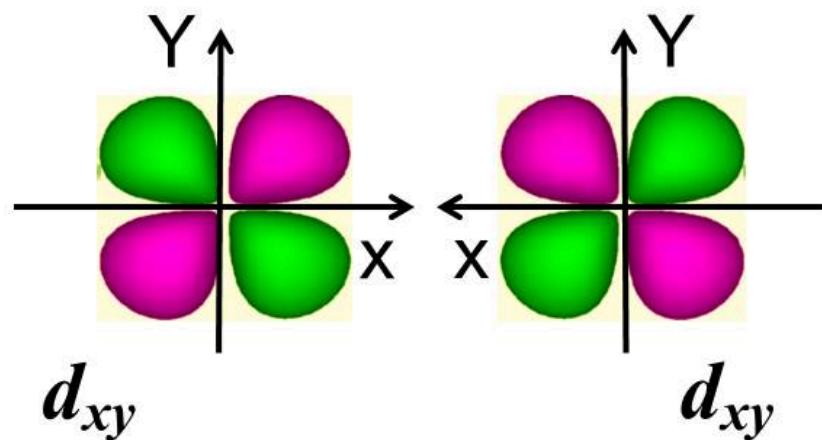
2025/5/14



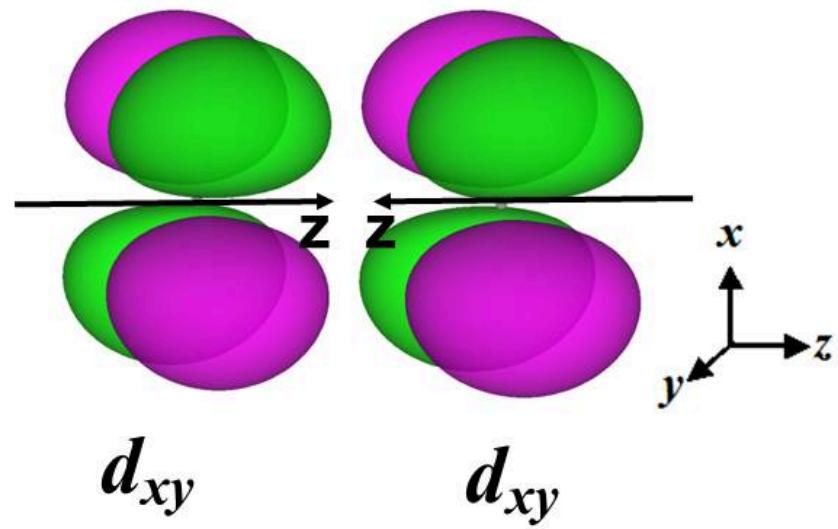


1. 画图示意  $d_{xy}$  和  $d_{xy}$  轨道沿  $x$  和  $z$  轴作用时，分别能形成何种类型的分子轨道。

解析：



“肩并肩”形成 $\pi$ 型-MO



“面贴面”形成 $\delta$ 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:

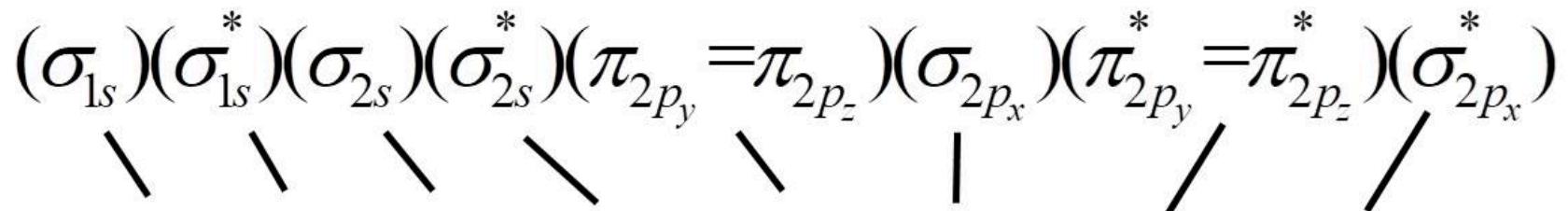
(1)  $C_2$ ,  $NO$ ,  $BN$ ,  $BO$  中含有  $B$ ,  $C$ ,  $N$  元素, 有“插氮现象”, 分子轨道能级序与  $B_2$ ,  $C_2$ ,  $N_2$  的能级序相同

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

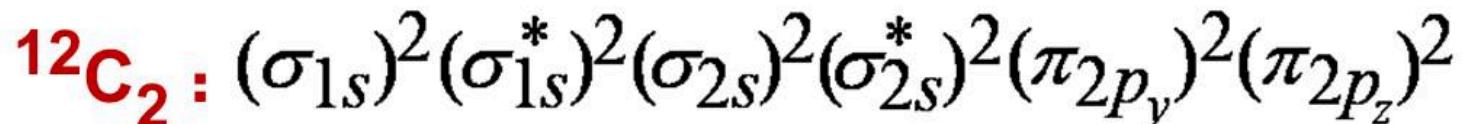
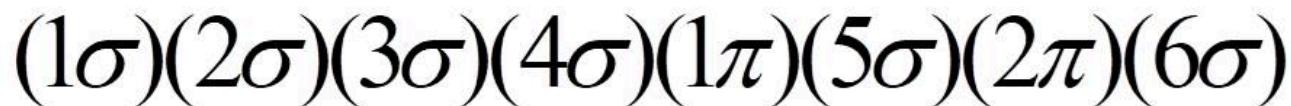
(3)  $NO$ ,  $BN$ ,  $BO$  等为异核双原子分子, 没有对称中心, 能级序要用  $1\sigma$ ,  $2\sigma$ , ...,  $1\pi$ ,  $2\pi$ , ... 表示



**B<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>** : 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



**$^{15}\text{NO}$** :  $(1\sigma)^2(2\sigma)^2(3\sigma)^2(4\sigma)^2(1\pi)^4(5\sigma)^2(2\pi)^1$

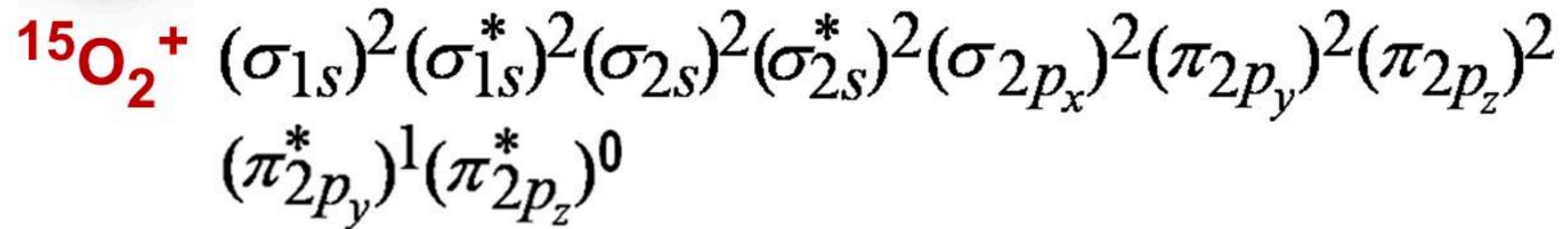
1个双电子 $\sigma$ 键 ( $5\sigma$ ) ; 1个三电子 $\pi$ 键; 1个双电子 $\pi$ 键, 键级=2.5

**$^{12}\text{BN}$** :  $(1\sigma)^2(2\sigma)^2(3\sigma)^2(4\sigma)^2(1\pi)^4$

2个双电子 $\pi$ 键 ( $1\pi$ ) ,键级=2。

**$^{13}\text{BO}$** :  $(1\sigma)^2(2\sigma)^2(3\sigma)^2(4\sigma)^2(1\pi)^4(5\sigma)^1$

2个双电子 $\pi$ 键 ( $1\pi$ ) , 1个单电子 $\sigma$ 键 ( $5\sigma$ ) ,  
很容易被氧化。键级=2.5。

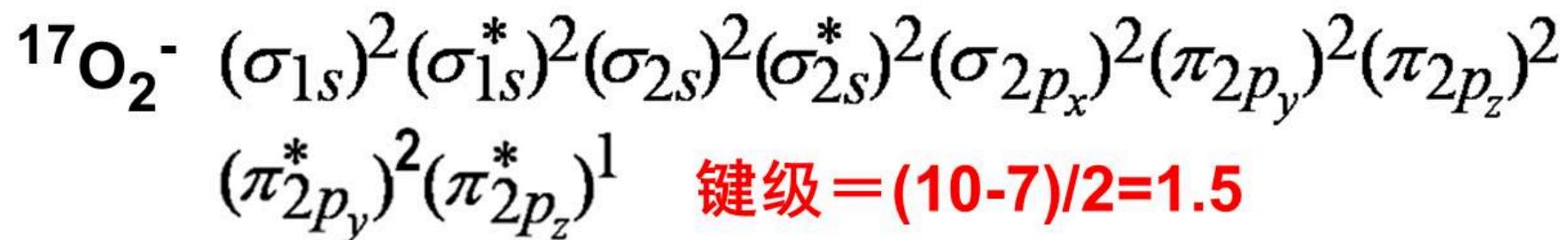
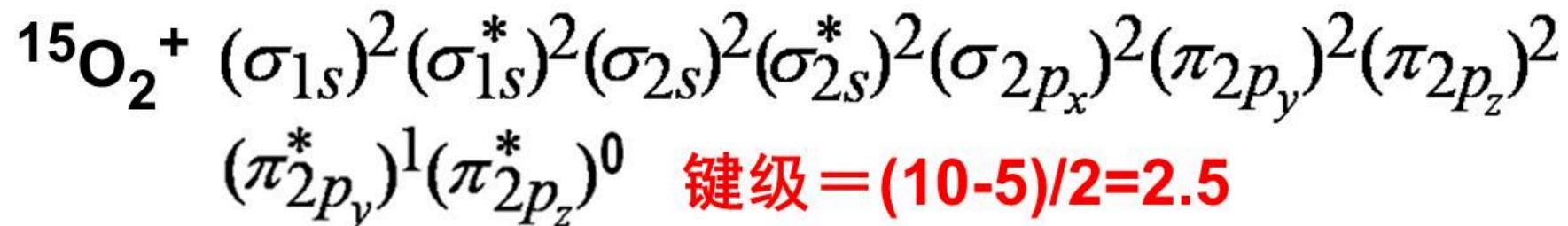
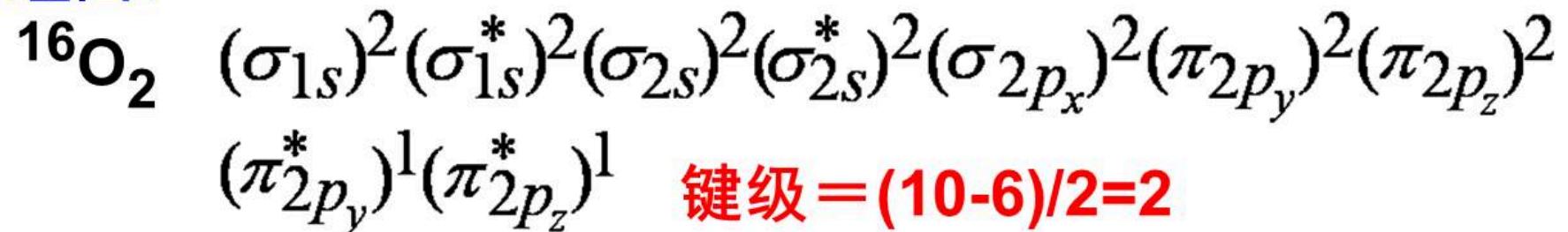


$$\text{键级} = (10 - 5) / 2 = 2.5$$

化学键特征：1个双电子 $\sigma$ 键 ( $\sigma_{2p_x}$ )；1个三电子 $\pi$ 键 ( $\pi_{2p_y}$ )；1个双电子 $\pi$ 键 ( $\pi_{2p_z}$ )。



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

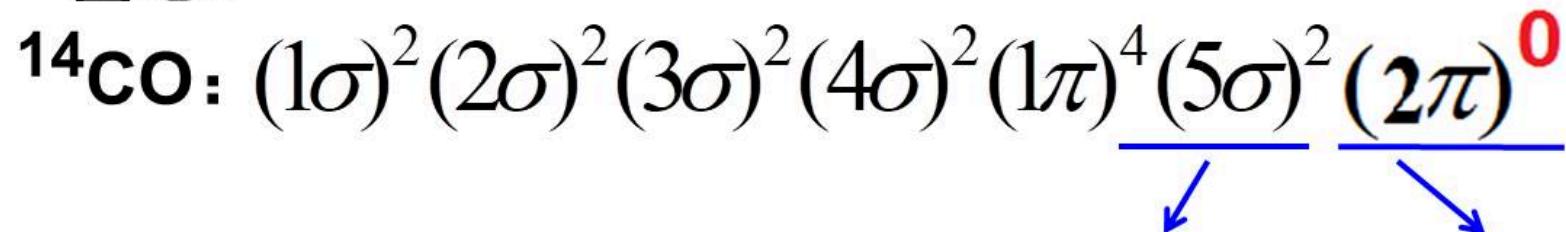


键级越大，键能越大，键长越短。



(3) 试写出CO和O<sub>2</sub>第一激发态的电子组态，基态电子谱项和键级。

基态：



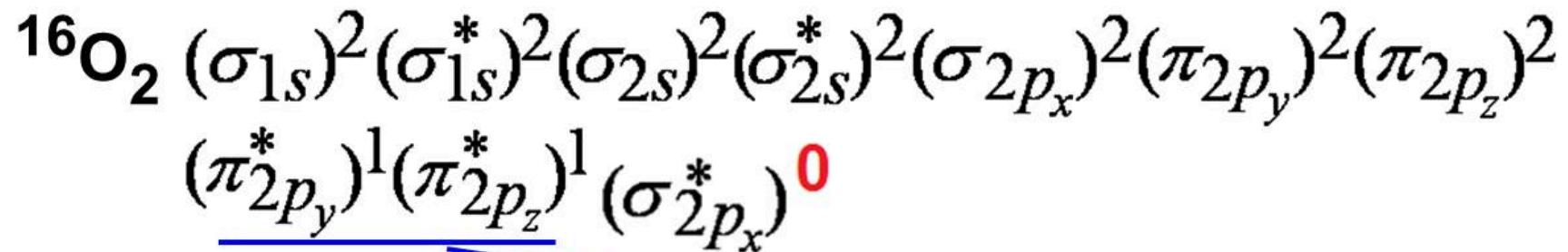
## 第一激发态:



$$\text{键级} = (9-5)/2 = 2$$



基态：

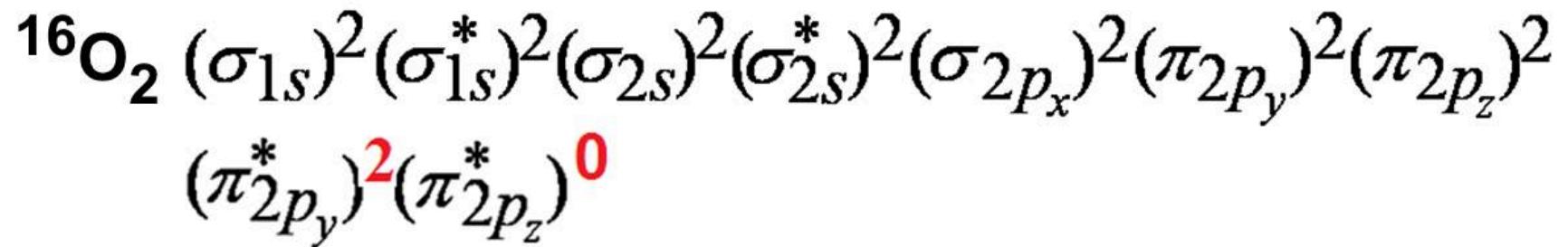


键级 =  $(10-6)/2=2$  单电子占据轨道  
(SOMO)

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



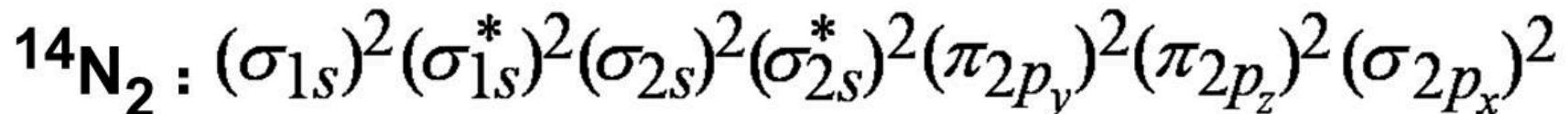
第一激发态：



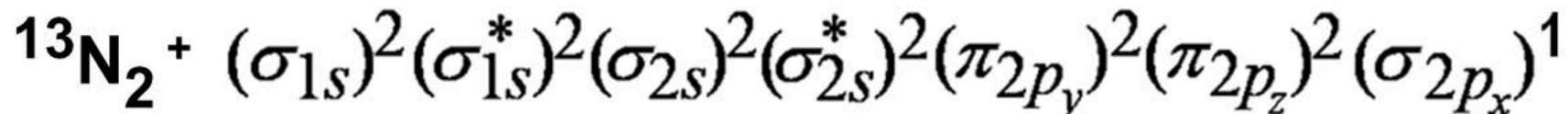
$$\text{键级} = (10 - 6) / 2 = 2$$



**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？

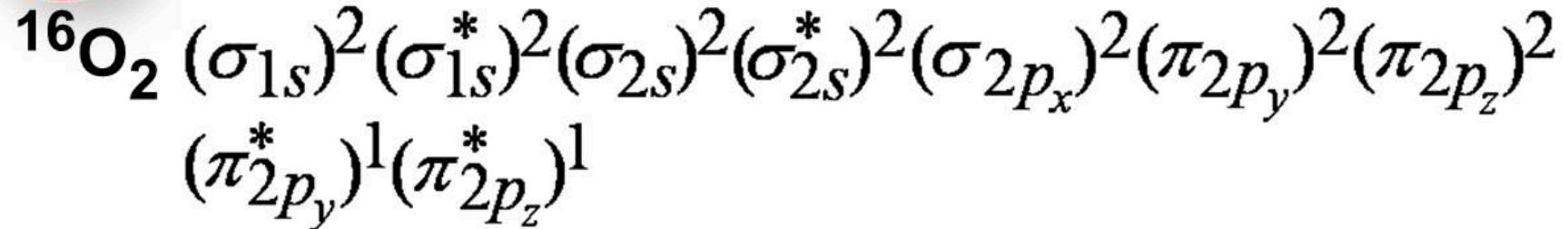


$$\text{键级} = (10-4)/2 = 3$$

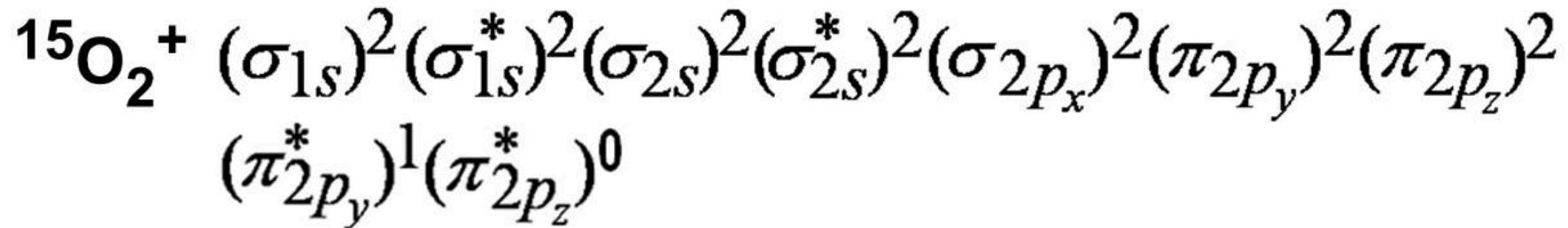


$$\text{键级} = (9-4)/2 = 2.5$$

$N_2$ 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（BO=2.5），键能也变小。



$$\text{键级} = (10-6)/2 = 2$$



$$\text{键级} = (10-5)/2 = 2.5$$

$\text{O}_2$ 的键级为2；相比 $\text{O}_2$ ,  $\text{O}_2^+$ 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。