

ZQKCHO 光电子能谱

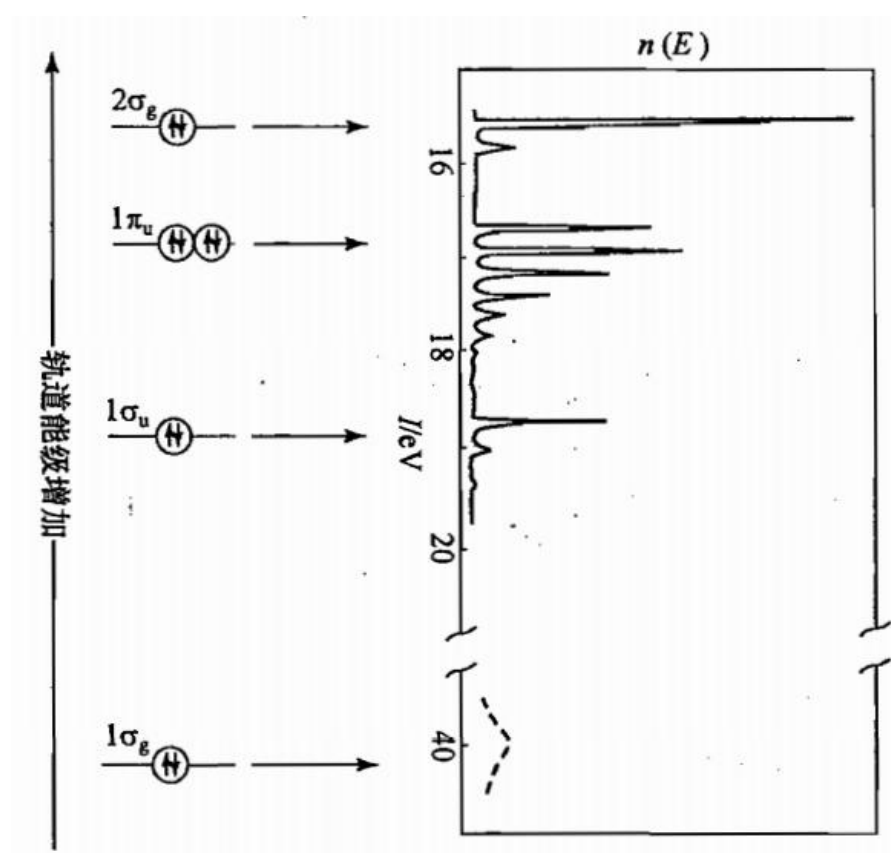
(11 分)光电子能谱是分子轨道理论的重要实验基础。根据光源不同,光电子能谱可分为紫外光电子谱(UPS)和X射线光电子能谱(XPS)

1. ①X射线光电子能谱常用 Al K α 辐射 ($h\nu=1486.6\text{eV}$) 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 $h\nu_0=2.486\text{eV}$, $m_e=9.1094\times 10^{-31}\text{kg}$,光速 $C=2.99792\times 10^8\text{m/s}$,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

N_2 的光电子能谱图:

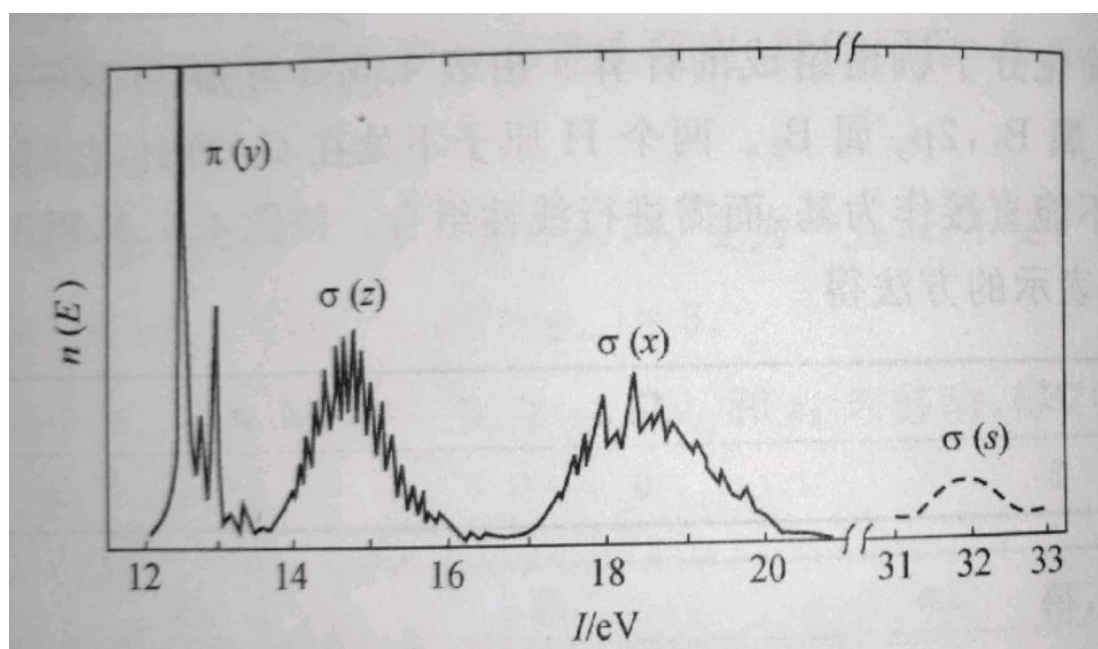


①在图上标出各峰所对应的分子轨道 (2 分)

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）