

## 第六章. 物质结构测验题

### 一、选择题

- 下列分子属于非极性分子的是：  
(A) HCl (B) NH<sub>3</sub> (C) SO<sub>2</sub> (D) CO<sub>2</sub>
- 下列分子中偶极矩最大的是：  
(A) HCl (B) H<sub>2</sub> (C) CH<sub>4</sub> (D) CO<sub>2</sub>
- 下列元素中，各基态原子的第一电离能最大的是：  
(A) Be (B) B (C) C (D) N (E) O
- H<sub>2</sub>O的沸点为 100°C，而H<sub>2</sub>Se的沸点是-42°C，这可用下列哪一种理论来解释：  
(A) 范德华力 (B) 共价键 (C) 离子键 (D) 氢键
- 下列哪种物质只需克服色散力：  
(A) O<sub>2</sub> (B) HF (C) Fe (D) NH<sub>3</sub>
- 下列哪种化合物不含有双键和叁键：  
(A) HCN (B) H<sub>2</sub>O (C) CO (D) N<sub>2</sub> (E) C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>
- 能够充满 1~2 电子亚层的电子数是：  
(A) 2 (B) 6 (C) 10 (D) 14
- 下列哪一个代表 3d 电子量子数的合理状态：  
(A) 3、2、+1、+1/2 (B) 3、2、0、-1/2  
(C) A、B 都不是 (D) A、B 都是
- 下列化合物中，哪一个氢键表现得最强：  
(A) NH<sub>3</sub> (B) H<sub>2</sub>O (C) H<sub>2</sub>S (D) HCl
- 下列分子中键级最大的是：  
(A) O<sub>2</sub> (B) H<sub>2</sub> (C) N<sub>2</sub> (D) F<sub>2</sub>
- 下列物质中哪一个进行的杂化不是 sp<sup>3</sup> 杂化：  
(A) NH<sub>3</sub> (B) 金刚石 (C) CCl<sub>4</sub> (D) BF<sub>3</sub>
- 用来表示核外某一电子运动状态的下列各组量子数 (n, l, m, m<sub>s</sub>) 中，哪一组是合理的：  
(A) (2, 1, -1, -1/2) (B) (0, 0, 0, 1/2)  
(C) (3, 1, 2, +1/2) (D) (1, 2, 0, +1/2)  
(E) (2, 1, 0, 0)
- 所谓的原子轨道是指( )  
(A) 一定的电子云 (B) 核外电子的几率  
(C) 一定的波函数 (D) 某个径向的分布
- 下列电子构型中,属于原子基态的是( ),属于原子激发态的是( )。  
(A) 1s<sup>2</sup>2s<sup>1</sup>2p<sup>1</sup> (B) 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>  
(C) 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>3s<sup>1</sup>3p<sup>1</sup> (D) 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>3s<sup>2</sup>3p<sup>6</sup>4s<sup>1</sup>
- 周期表中第五、六周期的IVB, VB, VIB 元素性质非常相似,这是由于( )。  
(A) s 区元素的影响 (B) p 区元素的影响  
(C) d 区元素的影响 (D) 镧系收缩的影响
- 描述  $\psi_{3d_{z^2}}$  的一组 n,l,m 是( )  
(A) n=2,l=1,m=0 (B) n=3,l=2,m=0  
(C) n=3,l=1,m=0 (D) n=3,l=2,m=1
- 下列原子半径大小顺序中,正确的是( )



- 极性分子和非极性分子之间存在着 ( ) 作用。
- 3、离子极化的发生使键型由 ( ) 向 ( ) 转化。  
化合物的晶型也相应地由 ( ) 向 ( ) 转化。  
通常表现出化合物的熔、沸点 ( )，溶解度 ( )，  
颜色 ( )。
- 4、HCl 的沸点比 HF 要低得多，这是因为 HF 分子之间除了有 ( ) 外，还有存在 ( )。
- 5、根据分子轨道理论，N<sub>2</sub> 分子的电子构型是 ( )，F<sub>2</sub> 分子的电子构型为 ( )。
- 6、形成配位键的两个条件是：(1) ( )  
(2) ( )  
举两例说明其分子中存在配位键，如 ( ) ( )。

### 三. 简答题

- 1、A、B 两元素，A 原子的 M 层和 N 层的电子数分别比 B 原子的 M 层和 N 层的电子数少 7 个和 4 个。写出 A、B 两原子的名称和电子排布式，指出推理过程。
- 2、第四周期某元素原子中的未成对电子数为 1，但通常可形成 +1 和 +2 价态的化合物。试确定该元素在周期表中的位置，并写出 +1 价离子的电子排布式和 +2 价离子的外层电子排布式。
- 3、从原子结构解释为什么铬和硫都属于第 VI 族元素，但它们的金属性和非金属性不相同，而最高化合价却又相同？
- 4、“四氯化碳和四氯化硅都容易水解”，这句话对吗？
- 5、CO<sub>2</sub>，SO<sub>2</sub>，NO<sub>2</sub>，SiO<sub>2</sub>，BaO<sub>2</sub> 各是什么类型的化合物，指出它们的几何构型；若为分子型化合物，表明有无极性，并说明是怎样由原子形成分子的，分子的内原子间化学键是 σ 键还是 π 键、π 键或配键。
- 6、写出 O<sub>2</sub><sup>+</sup>，O<sub>2</sub>，O<sub>2</sub><sup>-</sup>，O<sub>2</sub><sup>2-</sup> 的分子轨道能级式，计算它们的键级，比较稳定性和磁性。
- 7、画出 dx<sup>2</sup>-y<sup>2</sup>、dxy 的原子轨道及电子云图形。
- 8、用杂化轨道理论分别说明 H<sub>2</sub>O、HgCl<sub>2</sub> 分子的形成过程（杂化类型）以及分子在空间的几何构型。

## 第六章.物质结构测验题答案

### 一、选择题

1. D 2. A 3. D 4. D 5. A 6. B 7. C 8. D 9. B 10. C 11. D 12. A 13. C 14. B、D, A、C 15. D 16. B 17. B 18. D 19. B 20. D 21. D 22. D 23. C 24. B 25. C

### 二、填空题

1、 $\sigma, \pi$ 。

2、取向力, 色散力, 诱导力。

3、离子键, 共价键; 离子晶体, 分子晶体; 降低, 降低, 变深。

4、分子间作用力, 氢键

5、N<sub>2</sub> [KKKK ( $\pi 2py$ )<sup>2</sup> ( $\pi 2pz$ )<sup>2</sup> ( $\sigma 2px$ )<sup>2</sup>

F<sub>2</sub> [KKKK ( $\sigma 2px$ )<sup>2</sup> ( $\pi 2py$ )<sup>2</sup> ( $\pi 2pz$ )<sup>2</sup> ( $\pi^* 2py$ )<sup>2</sup> ( $\pi^* 2pz$ )<sup>2</sup>

6、(1) 一个原子其价电子层有未共用的电子对

(2) 另一个原子其价电子层有空轨道

如: CO, NH<sub>4</sub><sup>+</sup>

### 三、简答题

1、解:

A 为钒(V)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$

B 为硒(Se)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^4$

2、解: 第四周期某元素原子中的未成对电子数为 1 的可为

K, Ga, Sc, Cu

ds 区 IB 族的  $_{29}\text{Cu}$

Cu<sup>+</sup> 电子排布式  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$

Cu<sup>2+</sup> 外层电子排布式  $3s^2 3p^6 3d^9$

3、解:

S 的电子排布式  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

$Z' = Z - \sigma = 16 - (2 \times 1.00 + 8 \times 0.85 + 5 \times 0.35) = 5.45$

Cr 电子排布式  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$

$Z' = Z - \sigma = 24 - (10 \times 1.00 + 13 \times 0.85) = 2.95$

原子半径  $r_{\text{Cr}} = 1.27(\text{A}) > r_{\text{S}} = 1.02(\text{A})$

4、解 不对。四氯化碳不容易水解, 因为四氯化碳中, 碳原子只能利用 2s, 2p 轨道成键, 最大共价数限制为四, 碳原子不能再接受水分子中氧原子提供的电子对。而四氯化硅容易水解, 因为和 3s, 3p 能量相近的 3d 轨道是空的, 所以它可以接受水分子中氧原子提供的电子对。

5、解 CO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub> 为分子型化合物, SiO<sub>2</sub> 是共价大分子化合物, BaO<sub>2</sub> 是离子型的化合物。在 CO<sub>2</sub> 分子中, C 原子采用 sp 杂化, 两个 sp 杂化轨道上的单电子与氧原子形成

两个 sp-p 的  $\sigma$  键，另还形成两个三中心四电子键的大  $\pi$  键  $\Pi_3^4$ 。SO<sub>2</sub> 的几何构形为 V 形，有极性。在 SO<sub>2</sub> 分子中，S 原子采用 sp<sup>2</sup> 杂化，两个 sp<sup>2</sup> 杂化轨道上的两个单电子与氧原子形成两个 sp<sup>2</sup>-p 的  $\sigma$  键，另外还形成一个三中心四电子的大  $\pi$  键  $\Pi_3^4$ 。在 NO<sub>2</sub> 分子中，N 原子采用 sp<sup>2</sup> 杂化轨道上的单电子与氧原子形成两个 sp<sup>2</sup>-p 的  $\sigma$  键，另外还形成一个三中心三电子的大  $\pi$  键  $\Pi_3^3$ 。有极性。

BaO<sub>2</sub> 的结构为 Ba<sup>2+</sup>[O<sub>2</sub>]<sup>2-</sup>，其中氧原子与氧原子间为 p-p 的  $\sigma$  键。

6、解 O<sub>2</sub> [KKKK ( $\sigma_{2px}$ )<sup>2</sup> ( $\pi_{2py}$ )<sup>2</sup> ( $\pi_{2pz}$ )<sup>2</sup> ( $\pi^*_{2py}$ )<sup>1</sup> ( $\pi^*_{2pz}$ )<sup>1</sup>  
键级 2，顺磁性。

O<sub>2</sub><sup>2-</sup>[KKKK ( $\sigma_{2px}$ )<sup>2</sup> ( $\pi_{2py}$ )<sup>2</sup> ( $\pi_{2pz}$ )<sup>2</sup> ( $\pi^*_{2py}$ )<sup>2</sup> ( $\pi^*_{2pz}$ )<sup>2</sup>  
键级 1，反磁性。

O<sub>2</sub><sup>-</sup>[KKKK ( $\sigma_{2px}$ )<sup>2</sup> ( $\pi_{2py}$ )<sup>2</sup> ( $\pi_{2pz}$ )<sup>2</sup> ( $\pi^*_{2py}$ )<sup>2</sup> ( $\pi^*_{2pz}$ )<sup>1</sup>  
键级 1.5，顺磁性。

O<sub>2</sub><sup>+</sup>[KKKK ( $\sigma_{2px}$ )<sup>2</sup> ( $\pi_{2py}$ )<sup>2</sup> ( $\pi_{2pz}$ )<sup>2</sup> ( $\pi^*_{2py}$ )<sup>1</sup> 键级 2.5，  
顺磁性。键由强到弱为: O<sub>2</sub><sup>+</sup>>O<sub>2</sub>>O<sub>2</sub><sup>-</sup>>O<sub>2</sub><sup>2-</sup>

7、略.详见教材

8、H<sub>2</sub>O 分子为不等性 sp<sup>3</sup> 杂化，分子在空间的几何构型为 V 型  
HgCl<sub>2</sub> 分子为 sp 杂化，分子在空间的几何构型为直线型