

中山大学

2019 年攻读硕士学位研究生入学考试试题

科目代码: 920

科目名称: 结构化学

考试时间: 2018 年 12 月 23 日 下午

考生须知
全部答案一律写在答题纸上, 答在试题纸上的不计分! 答题要写清题号, 不必抄题。

中山大学材料学院(深圳)2019 年招收攻读硕士学位研究生入学考试试题

试题名称: 结构化学, 时间 180 分钟, 满分 150 分。

一. 选择题(每题 5 分, 共 50 分)

- 下列分子中, 非线性的是 ()
A、 CO_2 B、 CS_2 C、 SO_2 D、 C_2H_2
- 以下为四个量子数(n, l, m, m_l)的四种组合, 合理的是 ()
A、2, 2, 0, $-1/2$ B、2, 1, 0, $-1/2$
C、2, 1, 2, $+1/2$ D、2, 0, 1, 1
- 已知 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ 是低自旋配合物, 那么中心离子 d 轨道的电子排布为 ()
A、 $t_{2g}^3 e_g^2$ B、 $t_{2g}^2 e_g^3$
C、 $t_{2g}^4 e_g^1$ D、 $t_{2g}^5 e_g^0$
- 中心离子 d 轨道在八面体场中分裂为两组 t_{2g} 和 e_g , 对其符号, 下列理解错误的是 ()
A、t 表示三重简并 B、e 表示二重简并
C、g 表示中心对称 D、u 表示镜面对称
- 一维势箱中粒子的零点能效应表明 ()
A、一维势箱中粒子的最低能量等于零
B、一维势箱中粒子的最低能量不可确定
C、一维势箱中粒子的最低能量不等于零
D、一维势箱中粒子的势能总是为零
- 电子的总角动量可表示为 ()
A、 $\sqrt{j(j+1)} \frac{h}{2\pi}$ B、 $\sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}$
C、 $\sqrt{s(s+1)} \frac{h}{2\pi}$ D、 $\sqrt{s(s+1)} \frac{h}{2\pi} + \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}$
- $[\text{FeF}_6]^{3-}$ 络离子的磁矩为: ()
A、 $3 \mu_B$ B、 $5 \mu_B$ C、 $2.5 \mu_B$ D、 $5.9 \mu_B$

8. δ 分子轨道由何种原子轨道重叠而成 ()
 A、两个 p 轨道 B、两个 f 轨道
 C、一个 d 轨道和一个 f 轨道 D、两个 d_{xy} 轨道或两个 $d_{x^2-y^2}$ 轨道

9. 实物粒子的德布罗意关系式为 ()
 A、 $\lambda = \frac{\hbar}{p}$ B、 $\lambda = \frac{h}{p}$ C、 $\lambda = \frac{\hbar}{mV}$ D、 $\lambda = \frac{p}{h}$

10. 下列分子中, Cl 原子最活泼的是 ()
 A、 C_6H_5Cl B、 $C_6H_5CH_2Cl$ C、 $(C_6H_5)_2CHCl$ D、 $(C_6H_5)_3CCl$

二. (10分) 指出下列分子所属点群(点群符号写在括号内, 每小题 2 分)

- 1、 CO_2 ()
 2、 CH_3Cl ()
 3、反式 $CHCl=CHCl$ ()
 4、苯 ()
 5、椅式环己烷 ()

三. (24分) 请完成下列表格 (每空 3 分)

Z(原子序数)	24	29	44	41
基组态	$4s^13d^5$	$4s^13d^{10}$	$5s^14d^7$	$5s^14d^4$
能量最低的谱项				
能量最低的光谱支项				

四. (16分) (1) 说明 N_3^- 的几何构型和成键情况; (2) 用 HMO 法求离域 π 键的波函数和离域能。

五. (30分) 判断下列配位离子是高自旋型还是低自旋型, 画出 d 电子排布方式, 计算 LFSE (用 Δ_0 表示): (1) $Mn(H_2O)_6^{2+}$ (2) $Fe(CN)_6^{4-}$ (3) FeF_6^{3-}

配位离子	$Mn(H_2O)_6^{2+}$	$Fe(CN)_6^{4-}$	FeF_6^{3-}
d 电子排布			
自旋情况			
LFSE			

六. (20分) 简答题: 每题 4 分

- (1) 什么是晶体衍射的两个要素? 它们与晶体结构(例如晶胞的两要素)有何对应关系?
- (2) 写出能够阐明这些对应关系的表达式;
- (3) 晶体衍射的两要素在 X 射线粉末衍射图上如何反映;
- (4) 写出 Bragg 方程的两种表达方式;
- (5) 说明 (hkl) 与 hkl , $d_{(hkl)}$ 与 d_{hkl} 之间的关系。