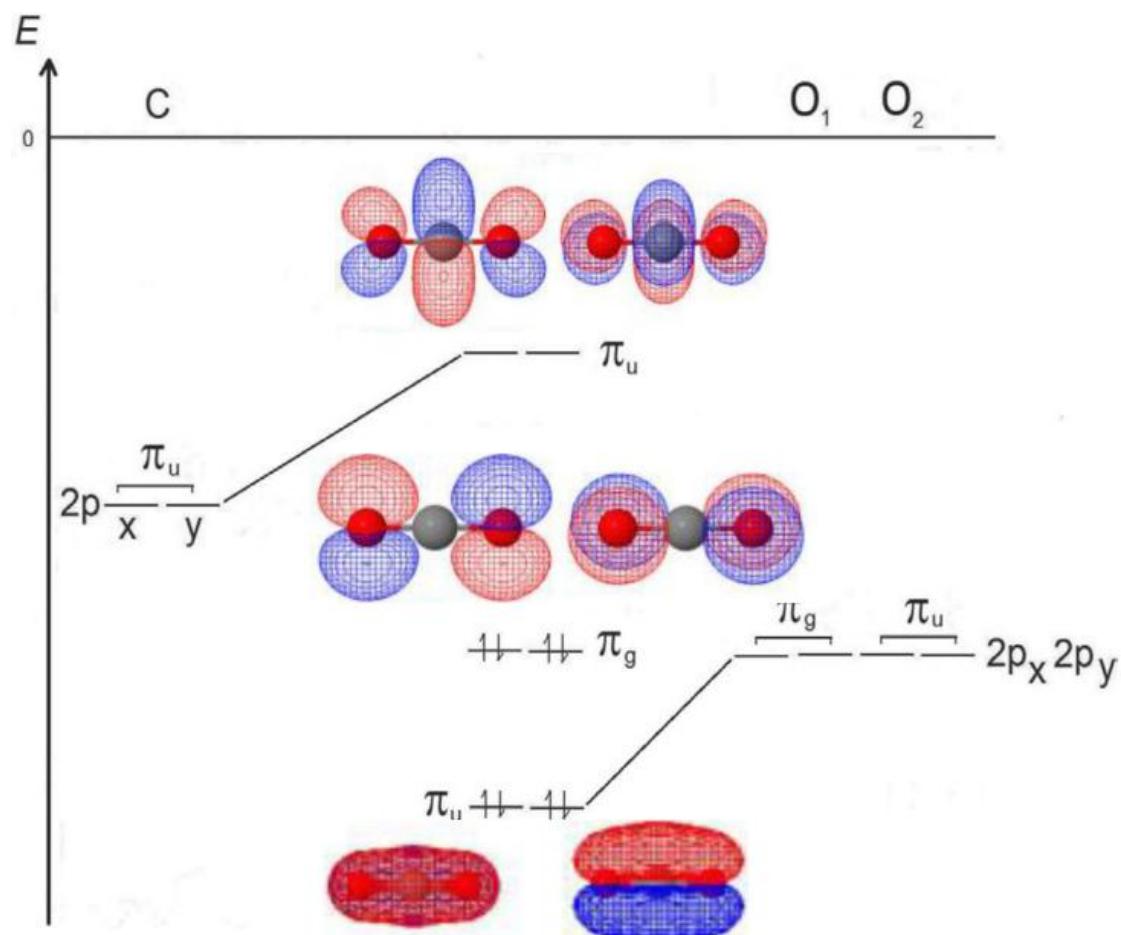


## ZQKCHO-分子结构

(12 分)分子轨道理论是当今化学发展强有力的驱动之一

\*已知  $\text{CO}_2$  的 ( $\pi$ ) 分子轨道能级图如下：



(1)  $\text{NO}_2^+$  为  $\text{CO}_2$  的等电子体，请写出  $\text{NO}_2^+$  的空间构型，并分别从轨道、电荷两个角度指出其中亲电性最强的原子

(2) 姜-泰勒效应是化学物质中的常见现象，它对我们理解分子结构有着巨大的帮助

① 解释为何  $\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$  与溶剂进行配体交换的速率特别快

② 写出苯与环丁二烯的点群以及其中碳碳键长的种数，解释环丁二烯骨架结构异常的原因

③根据题干信息及(1), 运用分子轨道理论预测  $\text{NO}_2$ 、 $\text{NO}_2^+$  的空间构型, 并配以示意图或文字说明

(3) 超共轭现象也是分子轨道理论研究的热门内容, 其对分子结构稳定性有着不可忽视的影响。

① $\text{PO}_4^{3-}$ 、 $\text{SO}_4^{2-}$  中, P-O、S-O 分别短于一般的 P-O、S-O 单键的事实广为人知, 但实验发现,  $\text{NO}_3^-$  中 N-O 键键长也较一般的 N-O 单键短, 请解释原因

②已知  $\text{PF}_2\text{NMe}_2$  中 N 周围的三个原子共平面, P 的 3d 轨道能量实际上远远高于 N 的 2p 轨道, 试图从超共轭角度画出其优势构象并配以简单文字解释