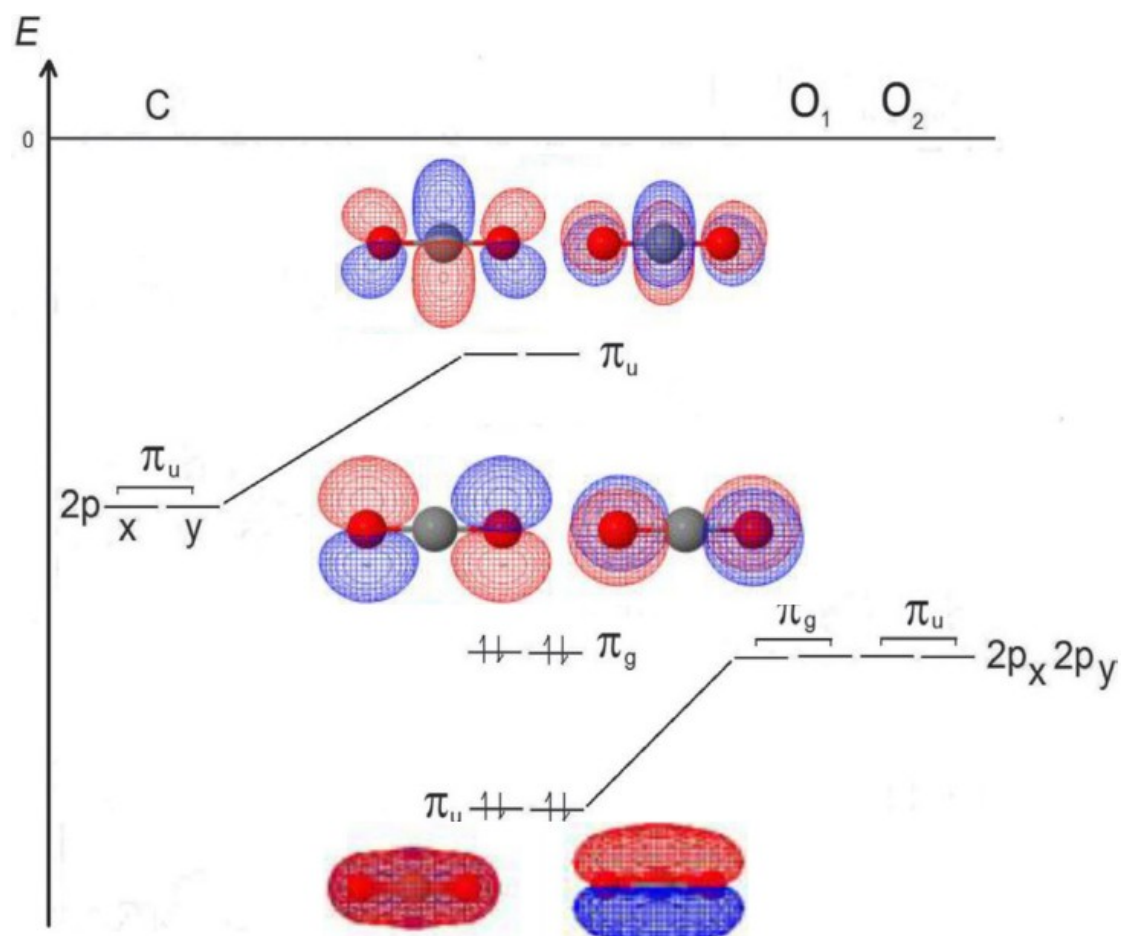


ZQKCHO

(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 CO_2 的 (π) 分子轨道能级图如下:



(1) NO_2^+ 为 CO_2 的等电子体, 请写出 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 NO_2 、 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 PO_4^{3-} 、 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， NO_4^{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 PF_2NMe_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