

三、元素和化合物的结构化学

化学学科久盛不衰的任务是耕耘元素周期。围绕一个元素或一类化合物，开展合成与结构系统的结构研究，以总结规律，是为元素和化合物的结构化学。它代表着化学和结构化学发展的传统方向。

当今已知化合物累计超过 1000 万种。元素结构化学已为周期表中最丰盛的碳元素耕耘了一大片土地。非碳元素的结构化学亦硕果累累。氢以能与元素碳实现最佳匹配并生成氢键而独具特色。硼与氢能生成含多中心键的缺电子化合物。硅则以其四配位占主导地位为其结构特征。惰性气体和贵金属两类不活泼元素在周期表中宛如两片贫脊的荒地，但这两块荒地也相继在 60—70 年代取得了突破。

元素结构化学发展的总趋向是不断强化从碳元素向非碳元素，主要是金属元素，特别是 d 区元素的扩展。根据剑桥晶体结构数据库的资料，广义金属有机物与纯有机物所测结构数在 1975 年至 1990 年中已接近 2/3 的高比例。基于 d 区元素在周期表中处于承上启下的地位，其成键方式多样，变价范围宽广，又往往是各类重要化学、生物体系中的主活性组分，或与特殊的光、电、磁物理性能相联系。故无论从理论还是应用角度考虑，d 区元素及其各类化合物（金属有机物、簇合物、配合物）的结构化学已处于前沿研究的重要地位。此中尤以均相、复相催化与过渡元素对小分子的活化最为重要。如 $(\text{pph})_3\text{RhCl}$ 在常温常压下即可催化氢化烯类，后进一步改造为手性膦配体铑催化剂 $[\text{Rh}(\text{L}^*)_2\text{双烯}]^+$ ，在加氢反应中表现出对映体专一性，使产物具有高光学纯度。据此实现了产率高达 98% 的工业合成多巴。此为 d 区元素化合物对小分子 H_2 实行配位催化活化并对传统有机化工实行变革的典型实例。