

“十一五”国家重点图书

· 化学与应用化学丛书 ·

# 高等配位化学

朱龙观 主编



华东理工大学出版社  
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

“十一五”国家重点图书  
化学与应用化学丛书

# 高等配位化学

朱龙观 主编

### 图书在版编目(CIP)数据

高等配位化学/朱龙观主编. —上海:华东理工大学出版社, 2009. 5

(化学与应用化学丛书)

ISBN 978 - 7 - 5628 - 2481 - 7

I. 高… II. 朱… III. 配合物化学—高等学校—教材 IV. O641. 4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 012281 号

“十一五”国家重点图书

化学与应用化学丛书

## 高等配位化学

主 编 / 朱龙观

责任编辑 / 刘 强

责任校对 / 张 波

出版发行 / 华东理工大学出版社

社 址:上海市梅陇路 130 号,200237

电 话:(021)64250306(营销部) (021)64252174(编辑室)

传 真:(021)64252707

网 址:[www.hdlgpress.com.cn](http://www.hdlgpress.com.cn)

印 刷 / 常熟华顺印刷有限公司

开 本 / 787 mm×1092 mm 1/16

印 张 / 21.25

字 数 / 524 千字

版 次 / 2009 年 5 月第 1 版

印 次 / 2009 年 5 月第 1 次

印 数 / 1 - 2000 册

书 号 / ISBN 978 - 7 - 5628 - 2481 - 7 / O · 201

定 价 / 58.00 元

(本书如有印装质量问题,请到出版社营销部调换。)

# “十一五”国家重点图书《高等配位化学》编委会

## ○ 总顾问



**郑兰荪** 中国科学院院士，厦门大学教授，无机化学家。现任无机合成与制备化学、分子反应动力学国家重点实验室学术委员会主任；固体表面物理化学国家重点实验室学术委员会副主任；结构化学、配位化学、原子分子物理和波谱国家重点实验室学术委员会委员；2006—2010年教育部高等学校化学与化工学科教学指导委员会副主任委员，化学类专业教学指导分委员会主任委员；科技部“973计划”“物质性能的分子设计与结构调控”项目首席科学家。主要从事原子团簇科学的研究。1994年获国家自然科学基金首届杰出青年科学基金资助；2000年被聘任为长江学者特聘教授；2006年获国家自然科学奖二等奖。

## ○ 主任委员



**陈小明** 中山大学教授，博士生导师。2000—2004年被聘任为长江学者特聘教授；现任中国晶体学会副理事长，中国化学会理事，中国稀土学会理事，《无机化学学报》副主编，《科学通报》特邀编辑以及《结构化学》《中国稀土学报》《中国化学》《高等学校化学学报》编委。主要从事微孔配位聚合物、磁性配位聚合物、动态配位聚合物、发光化合物的合成化学与晶体工程、金属配合物的合成化学等研究工作。作为第一完成人获国家自然科学奖二等奖和广东省自然科学奖一等奖，并获得香港求是基金会“杰出青年学者奖”、第五届“中国青年科技奖”和教育部“全国优秀教师”等个人奖励。已发表二百余篇SCI收录论文。



**朱龙观** 浙江大学教授，博士生导师。主要研究金属串分子导线、配位聚合物化学、高分子材料应用等。已完成两项国家自然科学基金项目，在研一项浙江省自然科学基金重点项目，通过一项浙江省科技厅鉴定项目。出版教材《分子设计导论》（2000年高等教育出版社出版）和《综合化学实验》（2005年科学出版社出版）。已发表SCI收录论文168篇。

# “十一五”国家重点图书《高等配位化学》编委会

## ● 编 委



**袁天佑** 广西大学教师。现任广西化学化工学会理事、广西大学教学督导员、广西大学实验室工作指导委员会委员。主要研究配位化学，长期从事无机化学、工程化学的教学工作。完成国家自然科学基金项目一项、广西教委科研项目两项。2006—2007年被评为广西自治区科协“学会先进工作者”；2004年获广西自治区师德论坛征文比赛一等奖；连续八次被学生民主评选为“我心目中的好老师”。出版三本教材，《无机化学实验》获广西自治区优秀教材三等奖。已发表学术论文二十余篇。



**邵超英** 东华大学教师，硕士生导师。主要研究环境分析方法、环境修复方法、环境地球化学，针对多糖高分子吸附材料性能、在线吸附痕量分析方法及应用、土壤环境中有机污染物测试方法等进行研究。已发表科研论文十余篇。



**王芳辉** 北京化工大学教师。主要研究纳米材料合成与改性及其在油田化学品中的应用。参与国家自然科学基金、国际合作项目、国家“863”项目、铁道部项目等。参与编写《燃料电池系统原理设计应用》《可再生能源开发技术》《高等无机合成》等教材。已发表科研论文二十余篇，SCI或EI收录15篇。



**鲁礼林** 武汉科技大学教师。担任药学无机化学和医学化学的教学工作，主要从事超分子光电功能配合物设计合成、对配合物的性质进行量子化学和分子动力学方法模拟研究。参与国家自然科学基金、全军医学科学技术研究“十五”重大课题等项目。已发表科研论文十余篇，SCI或EI收录7篇。



**强 敏** 武汉科技大学教授，硕士生导师。主要从事应用化学和材料化学研究工作。参与三项国家项目和两项省部级项目的研究。参与两本《有机化学》教材的编写。已发表学术论文二十余篇。

# “十一五”国家重点图书·化学与应用化学丛书·

## 编委会成员名单

### 总顾问

郑兰荪(中国科学院院士,厦门大学)

张玉奎(中国科学院院士,中国科学院大连化学物理研究所)

刘若庄(中国科学院院士,北京师范大学)

**杨锦宗**(中国科学院院士,大连理工大学)

刘新厚(中国科学院理化技术研究所)

梁逸曾(中南大学)

### 主任委员(以拼音为序)

陈光巨(北京师范大学)

陈小明(中山大学)

杜一平(华东理工大学)

冯亚青(天津大学)

高士祥(南京大学)

龚跃法(华中科技大学)

何仁(大连理工大学)

胡常伟(四川大学)

黄可龙(中南大学)

黄元河(北京师范大学)

蓝闽波(华东理工大学)

李浩然(浙江大学)

李祥高(天津大学)

林贤福(浙江大学)

穆劲(华东理工大学)

聂进(华中科技大学)

宁桂玲(大连理工大学)

荣国斌(华东理工大学)

童叶翔(中山大学)

王海水(华南理工大学)

王利民(华东理工大学)

谢如刚(四川大学)

杨光富(华中师范大学)

袁履冰(大连理工大学)

张维冰(中国科学院大连化学物理研究所)

张文清(华东理工大学)

### 委员(以拼音为序)

安永林(大连理工大学)

陈东红(华中科技大学)

陈国荣(华东理工大学)

陈立功(天津大学)

陈若愚(江苏工业学院)

方德彩(北京师范大学)

冯文芳(华中科技大学)

郭璇华(华南理工大学)

杭义萍(华南理工大学)

胡坪(华东理工大学)

康诗钊(华东理工大学)

李方实(南京工业大学)

李桂玲(华中科技大学)

李明慧(大连工业大学)

李奇(北京师范大学)

李硕凡(华南理工大学)

李向清(华东理工大学)

刘海燕(华东理工大学)

刘建宇(华南理工大学)	刘淑芹(大连理工大学)	卢 怡(华东理工大学)
鲁礼林(武汉科技大学)	罗 钊(华中科技大学)	罗曦芸(上海博物馆)
吕玄文(华南理工大学)	马思渝(北京师范大学)	潘铁英(华东理工大学)
钱 枫(华东理工大学)	邵超英(东华大学)	舒谋海(上海交通大学)
宋慧宇(华南理工大学)	唐明生(郑州大学)	唐 乾(华中科技大学)
唐燕辉(华东理工大学)	陶晓春(华东理工大学)	童晓峰(华东理工大学)
王芳辉(北京化工大学)	王 磊(华东理工大学)	王立世(华南理工大学)
王 敏(华南理工大学)	王 氢(华东理工大学)	王全瑞(复旦大学)
王世荣(天津大学)	王文锦(华南理工大学)	王亚光(华东理工大学)
王 燕(华东理工大学)	王朝霞(华东理工大学)	伍新燕(华东理工大学)
徐志珍(华东理工大学)	许 琳(华南理工大学)	许艳杰(天津大学)
杨铁金(齐齐哈尔大学)	杨 肖(大连工业大学)	于建国(北京师范大学)
俞开潮(华中科技大学)	袁红玲(华中科技大学)	袁天佑(广西大学)
张春梅(华东理工大学)	张大德(华东理工大学)	张 敏(华东理工大学)
张绍文(北京理工大学)	张小平(北京师范大学)	张玉兰(华东理工大学)
张玉良(华东理工大学)	张兆国(上海交通大学)	张正波(华中科技大学)
赵 平(华东理工大学)	郑炎松(华中科技大学)	仲剑初(大连理工大学)
周丽绘(华东理工大学)	周志彬(华中科技大学)	朱 红(北京交通大学)
朱龙观(浙江大学)	邹 刚(华东理工大学)	

“十一五”国家重点图书《化学与应用化学丛书》联系邮箱 hxyyyhx@163.com

**本书由中国科学院郑兰荪院士  
审定编写大纲**

# 序

无机化学作为一门历史最为悠久的化学学科之一,与其他化学分支学科相比,近百年来发展速率相对不快。然而,近年由于在纳米科技、尤其是在纳米材料(包括以纳米孔洞等纳米结构为主要特征的无机和无机-有机杂化材料)制备上取得的突出进展,使得这门古老的学科又焕发了青春活力,并且带动了相关学科的发展。

通过近年来的快速发展,我国的无机化学学科已经改变了过去的“弱势”地位,为我国化学学科的均衡发展与国际竞争能力的增强,做出了较为突出的贡献。据统计,我国研究人员近几年在几个国际最高水平化学期刊上所发表的论文中,与无机化学学科有关的工作占了将近一半。与此相适应,我国无机化学学科的研究队伍、特别是研究生的队伍也增长得较快。因此,根据无机化学学科近年快速发展的态势,编写新的研究生教材,及时地更新与充实研究生的基础知识,使研究生的培养与教育适应学科的发展,已成为一项迫在眉睫的任务。华东理工大学出版社所出版的“化学与应用化学丛书”有多本教材,包括《高等无机化学》《高等无机合成》《高等配位化学》等,正顺应了学科发展的迫切需要,必将为我国无机化学学科人才的培养做出积极的贡献。

近年我国无机化学学科的快速发展,既是由于国际前沿学科发展的推动,也是由于国内该学科的研究人员注重发挥我国在合成化学上的优势,注重对合成产物结构(包括形态)的表征和研究,注重无机化学与有机化学等其他化学分支学科的交叉与合作。然而,无机化学学科要取得进一步的发展,还需要注重合成产物的功能,将无机化合物的结构与性能紧密地关联起来,而且还要注重与生命科学等非化学学科的交叉与融合。令人欣喜的是,这些知识与领域在这套教材中都得到较为充分的阐述。我相信,这套教材能够使研究生了解当今无机化学学科的发展趋势和最新科研进展,拓宽和培养研究生的学术视野和科学素养,从而为我国无机化学研究队伍的培养夯实基础。

中国科学院院士 郑兰荪

# 前　　言

近几年配位化学在超分子化学与功能应用性两个热点的推动下迅速发展,基础学科研  
究与潜在应用紧密结合是当前学科发展的一个重要特征。配位化学在催化、储气材料及分子  
器件等方面有巨大发展潜力。鉴于配位化学的快速发展以及国内众多学校开设了多种多样  
与配位化学有关的课程,我们应华东理工大学出版社之邀请编写了这本书,旨在提高读者对配位  
化学应用性的认识、拓展在配位化学方面的视野,并展示配位化学的一些发展前沿与研究方向。

由于研究生科研工作繁忙,开设的课程学时一般较短,因此本书选择配位化学中近几年  
发展较为迅速的几个领域加以介绍,每章为控制一定的篇幅并不深入展开,但阅读者可以通  
过书后提供的参考文献进一步阅读相关内容。全书共 10 章,介绍了配合物的功能应用性、  
配合物制备以及功能配合物的应用领域;本书对配合物的理论研究、实验研究、配合物的基  
础性研究以及潜在应用均有所涉及。相信本书对刚进入配位化学研究领域或对配位化学研  
究感兴趣的高年级本科生、研究生能有一点参考价值。

目前各高校及研究机构都有强大的电子期刊资料库,在这繁杂的文献海洋中,从中取材  
介绍给学生确有一定难度,因为常有一些研究似有相互矛盾之处,如 O. M. Yaghi 等系列  
MOF 型材料储氢研究就受到其他课题组的强烈质疑。因此本书只是一个尝试,希望能抛砖  
引玉,为配位化学课程的发展尽点力。

参加本书编写的人员与分工如下:浙江大学朱龙观(第 1~2 章,第 7~9 章),东华大学  
邵超英、北京化工大学王芳辉、武汉科技大学鲁礼林、武汉科技大学强敏(第 3~6 章),广西  
大学袁天佑(第 10 章)。由于各位撰写者工作十分繁忙,在组织、编写过程中碰到了许多困  
难,因此能完成本书实属不易。

感谢郑兰荪先生、陈小明先生为提高本书质量所付出的辛勤劳动。

由于编者水平有限,文献资料浩如烟海,选材与资料引用肯定有诸多不尽如人意之处,  
恳请批评指正。

# 目 录

<b>第1章 功能配位化学</b> .....	1
1.1 国内配位化学的研究历史和最新进展 .....	1
1.2 功能配合物的广泛应用性 .....	3
1.2.1 作为功能材料的应用 .....	3
1.2.2 作为药物的应用 .....	5
1.3 配合物作为先进纳米机器的应用前景 .....	8
习题 .....	10
<b>第2章 配合物合成与晶体培养</b> .....	11
2.1 配合物合成 .....	11
2.1.1 经典溶液合成法 .....	11
2.1.2 扩展经典溶液合成法 .....	12
2.1.3 固相合成法 .....	15
2.1.4 电化学合成方法 .....	16
2.1.5 水热或溶剂热合成法 .....	17
2.2 配合物晶体培养 .....	26
2.3 水热或溶剂热条件下的有机反应 .....	26
2.3.1 C—C 键的形成 .....	27
2.3.2 硝化反应 .....	27
2.3.3 羟基化 .....	28
2.3.4 C—N 键的形成 .....	30
2.3.5 脱羧反应 .....	30
2.3.6 磷化反应 .....	31
习题 .....	32
<b>第3章 配合物结构研究方法</b> .....	34
3.1 过渡金属配合物的电子光谱 .....	35
3.1.1 配体内部的电子光谱 .....	36
3.1.2 配位场光谱 .....	36
3.1.3 电荷迁移光谱 .....	46
3.2 核磁共振波谱 .....	47
3.2.1 核磁共振基本原理 .....	47
3.2.2 配位化合物的核磁共振谱 .....	60
3.3 电子顺磁共振技术 .....	73

3.3.1 基本原理 .....	74
3.3.2 EPR 与 NMR 的比较 .....	74
3.3.3 EPR 谱的影响因素 .....	74
3.3.4 EPR 研究对象及方法 .....	75
3.3.5 过渡金属配合物的研究 .....	76
3.4 X 射线衍射分析 .....	79
3.4.1 X 射线衍射 .....	79
3.4.2 X 射线结构分析在配位化学中的应用 .....	80
3.5 配合物的磁性研究 .....	86
3.5.1 反磁性与顺磁性 .....	87
3.5.2 磁化率 .....	90
3.5.3 金属离子间的超交换相互作用及理论模型 .....	91
3.5.4 桥键角与超交换相互作用的关系 .....	94
3.5.5 羧基桥联双核 Cu(II) 配合物与超交换相互作用 .....	94
3.5.6 配合物磁性研究的其他例子 .....	95
习题 .....	96

<b>第4章 生物体系中的配合物 .....</b>	<b>97</b>
4.1 生命过程中的配位化合物 .....	97
4.1.1 生物体内的各种酶 .....	97
4.1.2 生物体内的蛋白质 .....	97
4.2 配位化合物在医药方面的应用 .....	98
4.2.1 金属配合物作为药物 .....	98
4.2.2 配体作为螯合药物 .....	98
4.2.3 配合物用作抗凝血剂和抑菌剂 .....	98
4.2.4 配合物在临床检验和生化实验中的应用 .....	98
4.3 金属配位离子在生物体中的作用 .....	99
4.3.1 参与生物体内的氧化还原过程 .....	99
4.3.2 作为 Lewis 酸 .....	99
4.3.3 稳定核酸构型 .....	101
4.4 酶 .....	103
4.4.1 金属酶及金属蛋白 .....	103
4.4.2 碳酸酐酶和羧肽酶 A .....	104
4.4.3 固氮酶 .....	106
4.4.4 维生素 B <sub>12</sub> .....	107
4.4.5 血红蛋白和肌红蛋白 .....	108
4.5 酶的模拟 .....	110
4.5.1 含锌酶的模拟 .....	110
4.5.2 铜酶的模拟 .....	111
4.5.3 固氮酶的模拟 .....	114

4.6 药物 .....	115
4.6.1 金属离子同药物的作用 .....	115
4.6.2 抗癌药物 .....	117
习题 .....	121
<b>第5章 金属有机化合物 .....</b>	<b>123</b>
5.1 金属茂夹心配合物 .....	124
5.1.1 金属茂夹心配合物的结构 .....	124
5.1.2 金属茂夹心配合物的合成 .....	126
5.1.3 金属茂夹心配合物的化学反应 .....	129
5.1.4 金属茂夹心配合物的应用 .....	137
5.2 金属烷基化合物 .....	138
5.2.1 制备 .....	138
5.2.2 反应 .....	140
5.2.3 烷基金属化合物在有机合成中的应用 .....	142
5.2.4 烷基铝在实际中的应用 .....	143
5.3 金属羰基化合物 .....	144
5.3.1 西奇威克(Sidgwick)有效原子数规则及16电子、18电子规则 .....	144
5.3.2 金属羰基化合物中的化学键及其分子内重排 .....	145
5.3.3 金属羰基化合物的合成 .....	148
5.3.4 金属羰基化合物的反应 .....	151
5.3.5 金属类羰基化合物 .....	153
5.4 π键金属有机化合物 .....	155
5.4.1 π键金属有机化合物的结构 .....	155
5.4.2 烯烃π键金属有机化合物的稳定性 .....	156
5.4.3 π键金属有机化合物的合成 .....	157
5.4.4 π键金属有机化合物的反应 .....	158
5.5 金属卡宾、卡拜配合物 .....	161
5.5.1 金属卡宾配合物 .....	161
5.5.2 金属卡拜配合物 .....	172
5.6 金属有机化合物的催化反应 .....	175
5.6.1 催化加氢 .....	175
5.6.2 催化脱氢 .....	176
5.6.3 催化氧化 .....	177
5.6.4 氢胺化 .....	178
5.6.5 羰基化反应 .....	179
5.6.6 加氢甲酰化 .....	181
5.6.7 异构化反应 .....	182
5.6.8 烯烃的聚合 .....	183
习题 .....	185

<b>第6章 原子簇化合物</b>	186
6.1 富勒烯及其性质	186
6.1.1 C <sub>60</sub> 的结构及欧拉定律	186
6.1.2 其他富勒烯分子的结构	187
6.1.3 C <sub>60</sub> 的制备	187
6.1.4 C <sub>60</sub> 的衍生化及富勒烯金属包合物(EMF)	188
6.1.5 C <sub>60</sub> 及其衍生物的应用	189
6.2 过渡金属簇合物	195
6.2.1 等瓣相似原理	195
6.2.2 铜、银、金原子簇	196
6.2.3 铁原子簇	199
6.2.4 钴原子簇	201
6.2.5 钯、铂原子簇	204
6.2.6 金属原子簇化合物的应用	208
6.3 碳纳米管	209
6.3.1 碳纳米管的制备及其纯化	210
6.3.2 碳纳米管的修饰	210
6.3.3 碳纳米管的掺杂	211
6.3.4 碳纳米管在复合材料方面的应用	211
6.3.5 碳纳米管在纳米器件中的应用	212
6.4 硼烷、碳硼烷、金属硼烷和金属碳硼烷	212
6.4.1 硼烷和碳硼烷	213
6.4.2 金属硼烷和金属碳硼烷	217
6.4.3 碳硼烷在医学领域中的应用	219
6.4.4 金属硼烷的催化作用	221
习题	223
<b>第7章 超分子配合物</b>	224
7.1 超分子化学	224
7.2 氢键导向的配合物	226
7.3 芳环堆积导向的配合物	228
7.4 配合物中弱键作用	231
7.4.1 弱键作用的普遍性	231
7.4.2 配合物中金属原子与配位原子间弱键作用	232
7.4.3 金属原子间的弱键作用	235
习题	236
<b>第8章 配位聚合物</b>	237
8.1 1D 配位聚合物	239

8.1.1 金属与配体计量比为 1 : 1 的 1D 配位聚合物 .....	239
8.1.2 金属与间隔配体计量比为 1 : 1.5 的 1D 配位聚合物 .....	240
8.2 2D 配位聚合物 .....	241
8.2.1 正方格子 .....	241
8.2.2 其他 2D 建筑 .....	243
8.3 3D 配位聚合物 .....	244
8.3.1 金刚石网络 .....	244
8.3.2 八面体网络 .....	245
8.3.3 其他 3D 网络 .....	246
8.4 配位聚合物的储气功能特性 .....	247
8.4.1 Zn - RBDC 类配位聚合物 .....	252
8.4.2 $[\text{Cu}_3(\text{TMA})_2(\text{H}_2\text{O})_3]_n$ 配位聚合物 .....	254
8.4.3 配位聚合物 $[\text{Cu}(4,4'-\text{bipy})_2\text{SiF}_6]_n$ .....	255
习题 .....	256
<b>第 9 章 分子电子器件 .....</b>	<b>258</b>
9.1 分子开关 .....	259
9.1.1 异构体互变与配位变化的分子开关 .....	259
9.1.2 氧化还原实现的开关作用 .....	259
9.1.3 轮烷或索烃分子开关 .....	261
9.2 分子梭 .....	261
9.3 分子转子 .....	263
9.4 分子棘齿 .....	264
9.5 分子闸 .....	264
9.6 分子镊子 .....	265
9.7 分子电梯 .....	266
9.8 分子齿轮 .....	266
9.9 分子导线 .....	269
9.9.1 基于有机化合物的分子导线 .....	271
9.9.2 基于生物分子的分子导线 .....	271
9.9.3 基于金属配合物的分子导线 .....	271
习题 .....	278
<b>第 10 章 配合物的化学键理论 .....</b>	<b>280</b>
10.1 历史的回顾 .....	280
10.2 价键理论 .....	280
10.2.1 价键理论的基本点 .....	280
10.2.2 电中性原理 .....	282
10.2.3 对价键理论的评价 .....	283
10.3 晶体场理论 .....	283

10.3.1 晶体场理论的基本点 .....	283
10.3.2 晶体场理论在配位化学中的应用 .....	293
10.3.3 对晶体场理论的评价 .....	295
10.4 配合物的分子轨道理论 .....	296
10.4.1 配合物分子轨道理论的基本点和处理方法 .....	296
10.4.2 金属离子与配体间的 $\sigma$ 键合 .....	296
10.4.3 金属离子与配体间的 $\pi$ 键合 .....	299
10.4.4 配合物的分子轨道理论对光谱化学序列的解释 .....	300
10.5 角重叠模型(AOM) .....	301
10.5.1 角重叠参数与角重叠因子 .....	301
10.5.2 配合物中心离子d轨道的能级 .....	302
10.5.3 d电子不同排布时的成键能力 .....	306
10.5.4 角重叠模型对光谱化学序列的解释 .....	308
10.5.5 AOM对配合物空间构型的解释 .....	309
习题 .....	310
 参考文献 .....	313

# 第1章 功能配位化学

## 1.1 国内配位化学的研究历史和最新进展

依据 1980 年中国化学会无机化学命名原则,配合物可以定义为:由可以给出孤对电子或多个不定域电子的一定数目的离子或分子(统称为配体)和具有接受孤对电子或多个不定域电子的空位的原子或离子(统称为中心原子),按一定的组成和空间构型所形成的化合物。由此可见,一个配合物中至少由两部分组成,即中心原子和配体。有记录可查的配合物是 18 世纪发现的普鲁士蓝(Prussian blue, Berlin blue),其化学组成为  $\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ,而真正对配合物从理论上进行解释的是 A. Werner 于 1893 年发表的论文。配位化学是在无机化学基础上发展起来的,但目前它是一门具有很强交叉性的学科,戴安邦认为配位化学是无机化学的通道。早期的配位化学集中在研究以金属阳离子为中心,与含 N、O、S、P 等给体原子的配体形成的“Werner 型配合物”。随着对配位化学研究的深入,人们发现配合物的价键和空间结构变化多样,而且由于配合物在生产实践和科学实验中有重要应用(如在研究原子核裂变基础上发展起来的铀和超铀元素的配合物)以及配位化学与有机合成化学和结构化学的有机结合,使配位化学打破了传统的无机、有机和物理化学间的严格界限(如 1951 年 Pauson 和 Miller 对二茂铁的合成等)。

现代配位化学沿着广度、深度和应用三个方向不断得到发展与进步。从广度看,自 Werner 创立配位化学理论学说以来,配位化学一直处于无机化学研究的前沿领域,有大量优秀的化学家从事配位化学的研究,为配位化学的发展做出了较大贡献。从深度看,众多与配位化学研究有关的学者获得了 Nobel 化学奖,如 Werner 创建配位化学, Ziegler 和 Natta 发明金属烯烃催化剂, Lipscomb 创立硼烷理论, Wilkinson 和 Fischer 发展了金属有机化学, Hoffmann 提出等瓣理论, Taube 提出固氮反应机理, Cram、Lehn 和 Pedersen 对于超分子化学的研究, Michel、Deisenhofer 和 Huber 测定出光合作用反应中心膜蛋白-色素的三维空间结构、揭示出电子和能量的传递作用等。从应用看,众多配位化合物在实际工业生产中获得应用,如金属簇合物作为均相催化剂,配合物在湿法冶金和元素分析、分离中也一直有重要的应用。随着配合物研究的深入以及结合其他高新技术发展,具有特殊物理、化学和生物化学功能的功能配合物得到发展,如三维配位聚合物储气与催化的应用研究十分活跃。因此现代配位化学在合成、结构、性质和理论研究方面取得了一系列进展。

自 Werner 创建配位化学至今,人们熟知的化学主要是研究以共价键相结合的分子的合成、结构、性质和变化规律的学科。但最近二十年超分子化学的发展,使配位化学上升到一个新的阶段,超分子化学也成为配位化学的一个主要研究领域(也是配位化学不断得到深化的动力)。超分子化学可简单地定义为分子间弱相互作用和分子组装的化学。分子间的相互作用形成了各种化学、物理和生物中高选择性的识别、反应、传递和调控过程。近来 Lehn