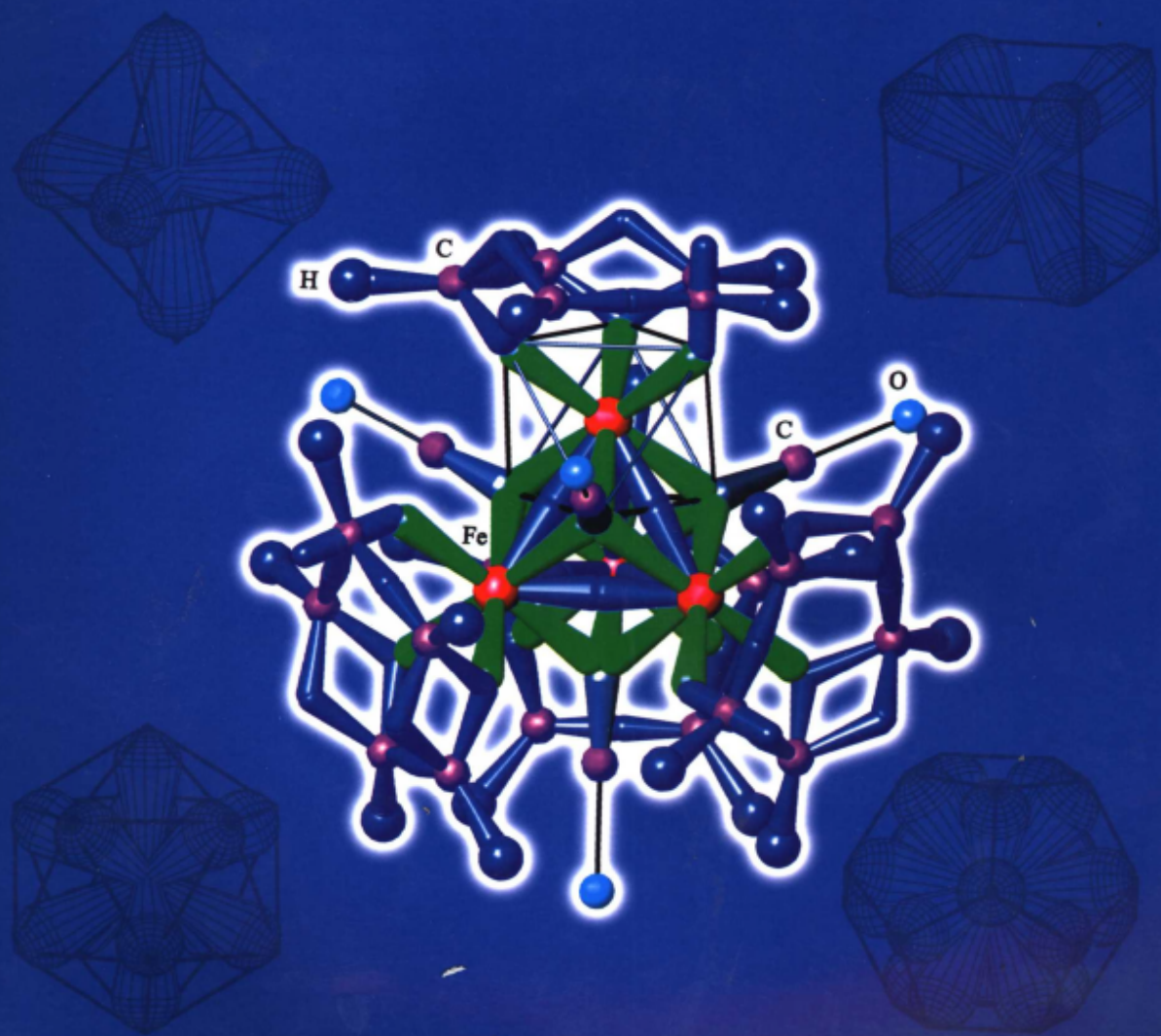


对称原子结构 与分子拓扑结构

■ 徐树峰 著



河北科学技术出版社

美术编辑:刘英君

9 787537 534697 >

对称原子结构 与分子拓扑结构

■ 徐树峰 著

河北科学技术出版社

图书在版编目 (C I P) 数据

对称原子结构与分子拓扑结构 / 徐树峰著. —石家庄:
河北科学技术出版社, 2005
ISBN 7-5375-3469-1

I. 对... II. 徐... III. ①对称-原子结构②对称-
分子结构 IV. 0572.23

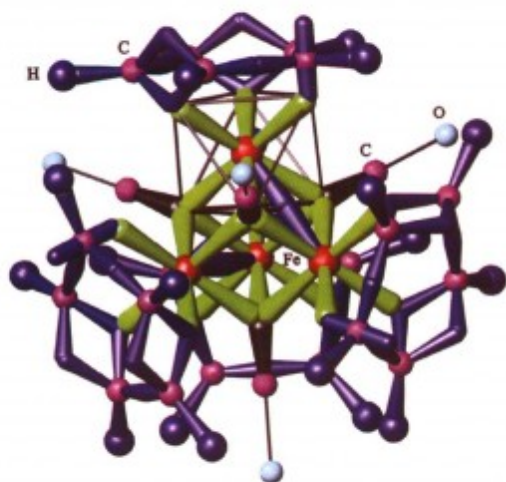
中国版本图书馆CIP数据核字 (2006) 第125680号

对称原子结构与分子拓扑结构

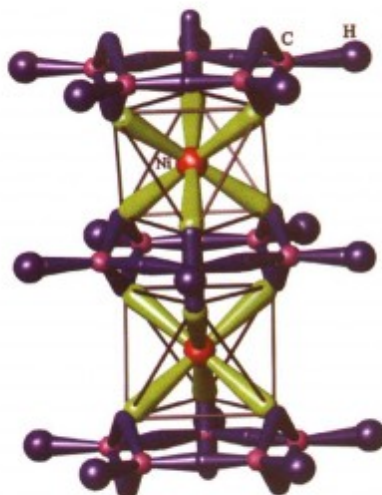
徐树峰 著

出版发行 河北科学技术出版社
地 址 石家庄市友谊北大街330号 (邮编: 050061)
印 刷 河北新华印刷一厂
经 销 新华书店
开 本 787×1092 1/16
印 张 21.5
字 数 550, 000
版 次 2006年12月第1版
2006年12月第1次印刷
印 数 1500
书 号 ISBN7-5375-3469-1/O·48
定 价 39.00元

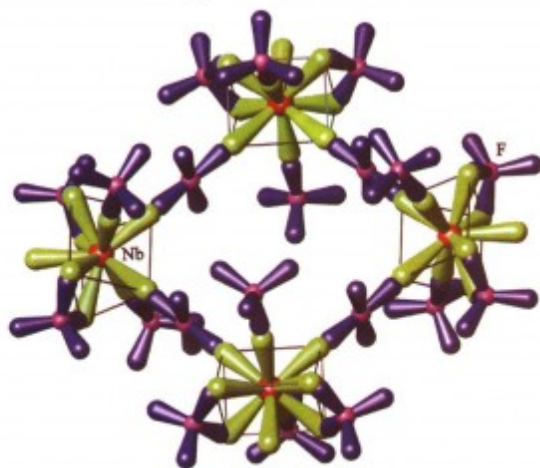
版权所有 翻印必究



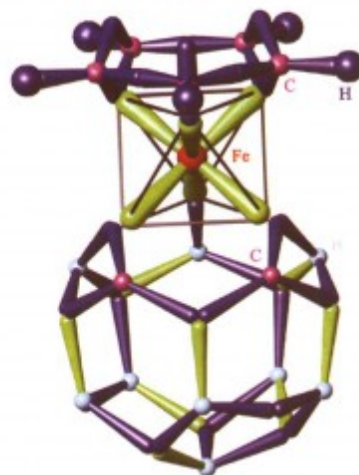
$\text{Fe}_4(\text{CO})_4(\text{C}_5\text{H}_5)_4$



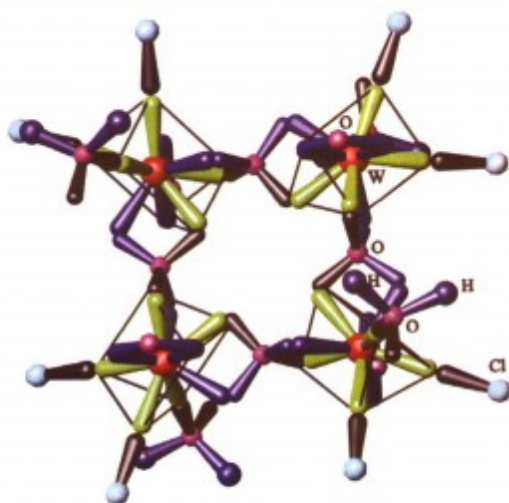
$[\text{Ni}_2(\text{C}_5\text{H}_5)_3]^+$



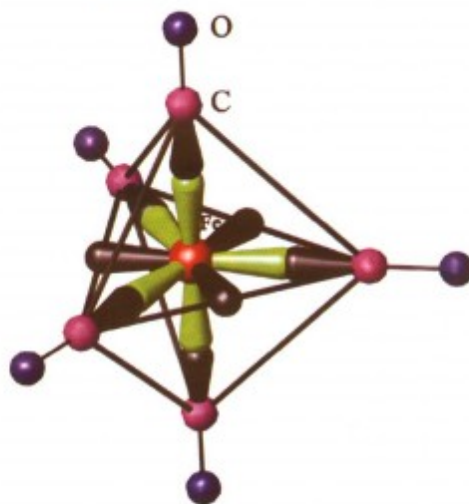
NbF_5



$[(\text{C}_5\text{H}_5)\text{Fe}(\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{11})]^-$

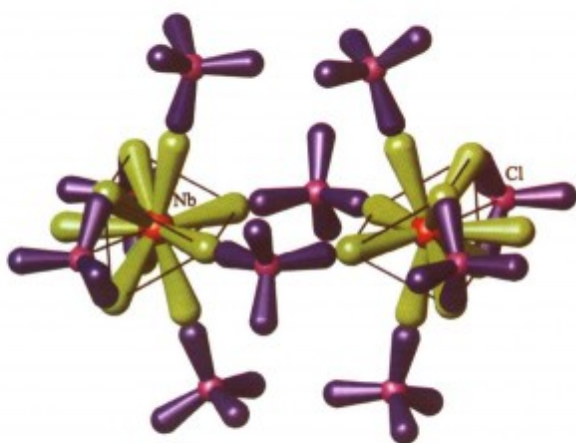


$[\text{W}_4\text{O}_8\text{Cl}_8(\text{H}_2\text{O})_4]^{2-}$

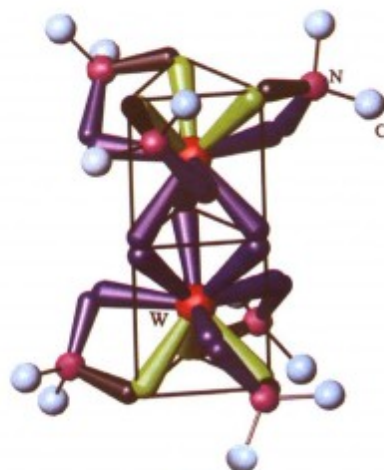


$\text{Fe}(\text{CO})_5$

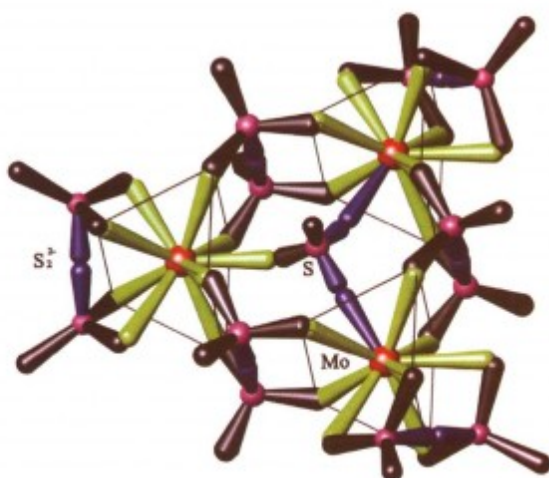
本书插图全部为三维彩色旋转图，如有需要可与作者联系 E-mail: xsf108@126.com



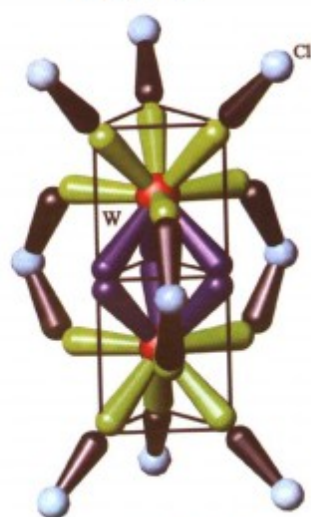
NbCl_5



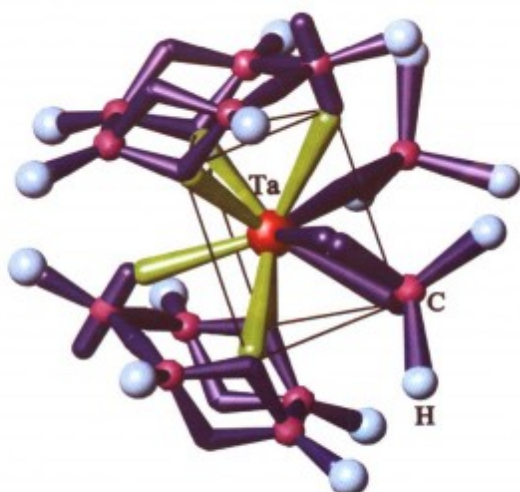
$\text{W}_2(\text{NR}_2)_6$



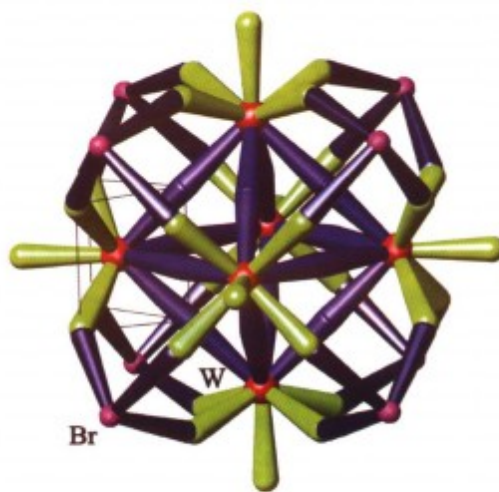
$[\text{Mo}_3\text{S}(\text{S}_2)_6]^{2-}$



$[\text{W}_2\text{Cl}_9]^{3-}$



$(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{Ta}(\text{CH}_2)(\text{CH}_3)$



$[\text{W}_6\text{Br}_8]^{4+}$

序 言

——探究多电子原子结构的新方法

由于组成原子的电子非常小，而它的运动速度又非常快，人们尚不能直接观测到组成原子的电子结构（运动方式及电子运动轨道的方位），因此人们只能通过原子表现出来的一些性质来间接推测原子的电子结构。

19 世纪 80 年代初期，光谱学的研究取得了很大进展，积累了大量的资料，在对这些浩繁、杂乱资料的长期整理研究中，人们发现了氢原子光谱线规律，找到了利用原子光谱研究、推测原子内部“电子能级”结构的窗口，开辟了从原子光谱角度探测、推究原子内部“电子能级”结构的时代。

一直到今天，原子光谱仍是研究原子结构和分子结构的主要方法之一。

由于分子由原子组成，原子结构决定分子结构，分子空间几何结构和组成它的原子的电子运动轨道的方位密切相关，存在因果关系。因此可以说分子空间几何结构是原子内部电子运动轨道方位的“云室”，分子几何结构是原子结构的直观具体显现，借助分子空间几何结构，人们能够直接观察到或间接推测到组成分子的原子电子运动轨道的方位，所以，除了能够从原子光谱线角度，人们可以获取原子内部电子结构的相关信息外，从分子空间几何结构角度，人们也能够获得原子内部“电子运动轨道方位”的相关资料信息。

例如对于非常简单的 NH_3 内部孤电子对的方位问题，人们还不能通过实验直接探测到它的具体方位，但人们可以通过它与过渡金属离子所形成的络合物的几何结构，来间接确定孤电子对的具体方位。

可以说，原子光谱是人们了解原子内部电子运动能级结构的一个窗口，而分子空间几何结构是人们认识原子内部电子运动轨道方位结构的另一个窗口。因此，依据大量的分子空间结构的实验数据，通过整理、归纳、研究大量分子空间几何结构的统一成键规律，从中归纳出多电子原子内部电子运动轨道方位的统一性规律，也是人们研究认识、探测、推究原子电子结构的科学方法之一。

科学上的每次重大发现，都离不开相关知识和相关实验资料的大量积累，人们对多原子结构的进一步认识也是如此。

随着科学的进步和发展，人们相继合成了数以万计的形形色色、种类繁多的金属有机络合物、原子簇络合物等，并测定了它们的几何结构，这些分子或络合物向我们提供了大量分子空间结构的丰富珍贵信息，而这些丰富珍贵的分子几何结构，向人们直接或间接地显露了分子中原子内部电子运动轨道的方位，使人们能够推测甚至“目睹”到原子中电子运动轨道

的具体位置。这些分子或络合物空间几何结构珍贵数据的大量积累，为人们从另一个角度发现和确定科学统一的原子结构和化学键理论，奠定了基础，也为人们开启了科学地认识原子结构的大门。

20 多年来，本人通过对大量分子空间几何结构数据的整理、归纳、研究，逐渐发现了隐藏在这些分子空间几何结构中的统一性成键规律：分子空间几何结构与原子内部电子在柏拉图对称正多面体上的分布密切相关，存在因果关系，从而发现了描绘原子内部电子运动轨道方位物理图像的对称原子结构模型。

依据对称原子结构模型处理多电子原子结构问题，不仅能够直观、简明、圆满地解释元素周期律等问题，而且能够直观、简明、圆满地解释第二过渡系电子组态的特殊变化问题，并为八隅体稳定性规律提供了科学依据；依据对称原子结构模型处理分子空间几何结构问题，使分子拓扑结构和原子结构密切相关，二者存在因果关系：不仅能够用四面体成键直观、简明、统一性地处理主族非金属化合物的空间结构问题；能够用八面体成键直观、简明、统一性地处理第一过渡金属所形成的正八面体络合物、畸变八面体络合物、平面正方形络合物、三角双锥络合物以及四方锥型络合物的空间几何结构问题；而且能够用三帽三角柱成键直观、简明、统一性地处理第二、第三过渡系金属离子所形成的三帽三角柱络合物、四方反棱柱络合物、带帽三角柱络合物、十二面体络合物、带帽八面体络合物、五角双锥络合物的空间构型问题；并且对于目前其他理论和方法还都不能解释或尚不能直观、统一性地解释的很多问题，利用对称模型亦能够给予直观、简明、统一性的令人满意的处理。

当把这种对称稳定普遍规律，应用到特殊的氢原子结构时，意外地发现了自旋相反与电子自转的因果关系，发现了经典力学在微观领域依旧适用的条件，继而发现了电子自转与波粒二象性的因果关系，验证了爱因斯坦的隐变量观点。

利用自转不仅可以直观、统一性地解释电子波粒二象性、电子双缝实验、电子隧道效应和“量子效应”，而且可以简明、统一性地描绘电子配对以及自旋相反的直观物理图像。把自转因素补充进去，经典力学在微观领域依旧适用，电子运动有轨迹可寻、具有确定的轨道，用经典力学不仅可以直观、圆满、统一性地解释氢原子结构和氦原子结构问题，而且可以直观、统一性地解释电子圆周运动不辐射电磁波的系列问题等。

由于本人才疏学浅，于有意无意中闯入了神秘、奇异的微观领域，因此错误难免，敬请专家学者批评指正。

作 者

2006 年 9 月

目 录

第一章 运动电子的自转与波粒二象性	(1)
引言	(1)
§ 1.1 运动电子自转、自旋、速度的关系	(3)
§ 1.2 自转导致运动电子具有波动性	(4)
1.2.1 自转导致运动电子具有波动性	(4)
1.2.2 电子波长 λ 和频率 ν 的直观物理意义	(4)
1.2.3 电子波长 λ 和频率 ν 与速度 v 的关系	(4)
§ 1.3 电子双缝实验的诠释	(5)
§ 1.4 电子隧道效应的诠释	(6)
§ 1.5 “上帝是否掷骰子”的直接检验实验	(7)
§ 1.6 自转与电子在限定体系的量子性	(8)
§ 1.7 $E = \gamma mc^2$ 与电子的静质能、平动动能和旋转能量的对应	(9)
第二章 氢原子结构	(13)
引言	(13)
§ 2.1 玻尔氢原子结构模型	(13)
§ 2.2 自转与波动性	(14)
§ 2.3 自转与角动量量子化条件	(15)
§ 2.4 自转与氢原子的球型结构	(15)
§ 2.5 自转与氢原子不辐射电磁波的原因	(17)
§ 2.6 氢原子半径及能量的计算	(18)
2.6.1 氢原子半径的计算	(18)
2.6.2 氢原子能量的计算	(19)
第三章 氦原子结构	(21)
引言	(21)
§ 3.1 电子配对的直观物理图像	(21)
§ 3.2 氦原子的球型结构	(22)
§ 3.3 自旋相反的物理意义	(24)
§ 3.4 Pauli 原理的物理本质	(26)
§ 3.5 氦原子体系的受力分析	(26)
§ 3.6 氦原子体系能量和半径的计算	(28)
§ 3.7 氦原子电离能的计算	(30)
第四章 直观对称原子结构模型	(33)
引言	(33)

§ 4.1	多电子原子结构	(35)
4.1.1	电子在原子核外的运动方式	(35)
4.1.2	电子运动轨道的伸展方向	(37)
§ 4.2	直观对称原子结构模型	(37)
§ 4.3	对称驻波轨道形成和电子排布规则	(40)
§ 4.4	多电子原子结构的物理图像	(42)
4.4.1	第一周期的核外电子排布	(42)
4.4.2	第二周期的核外电子排布	(43)
4.4.3	第三周期的核外电子排布	(44)
4.4.4	第四周期的核外电子排布	(44)
4.4.5	第五周期的核外电子排布	(46)
4.4.6	第六周期的核外电子排布	(48)
4.4.7	第七周期的核外电子排布	(50)
4.4.8	第八周期的核外电子排布	(51)
4.4.9	第九周期的核外电子排布	(52)
§ 4.5	对称模型与元素周期律	(53)

第五章 四面体成键与主族非金属化合物的结构

导言	(55)
§ 5.1 化学键的本质	(56)
§ 5.2 主族非金属元素的结构特征	(56)
§ 5.3 碳单质及化合物的结构与四面体成键	(57)
5.3.1 碳的结构特征	(57)
5.3.2 立方金刚石的结构与正四面体成键	(57)
5.3.3 六方金刚石的结构与正四面体成键	(58)
5.3.4 石墨的结构与四面体成键	(59)
5.3.5 球碳的结构与四面体成键	(60)
5.3.6 CH_4 和 C_2H_6 的几何结构与拓扑结构	(61)
5.3.7 C_2H_4 的几何结构与拓扑结构	(62)
5.3.8 CO_2 的几何结构与拓扑结构	(62)
5.3.9 C_2H_2 和 HCN 的几何结构与拓扑结构	(63)
5.3.10 CO 的几何结构与拓扑结构	(64)
5.3.11 C_6H_6 的几何结构与拓扑结构	(64)
5.3.12 C_3H_6 和 C_3H_3^- 的几何结构与拓扑结构	(66)
§ 5.4 氮的化合物结构与四面体成键	(68)
5.4.1 氮的结构特征	(68)
5.4.2 N_2 的结构与拓扑结构	(68)
5.4.3 NH_3 的几何结构与拓扑结构	(68)
5.4.4 $\text{N}(\text{SiH}_3)_3$ 的几何结构与拓扑结构	(69)
5.4.5 HN_3 和 N_3^- 的几何结构与拓扑结构	(70)

5.4.6	NO 的几何结构与拓扑结构	(71)
5.4.7	FNO 的几何结构与拓扑结构	(72)
5.4.8	NOCH ₃ 的几何结构与拓扑结构	(72)
5.4.9	N ₂ O 和(NO ₂) ⁺ 的几何结构与拓扑结构	(73)
5.4.10	N ₂ O ₃ 的几何结构与拓扑结构	(73)
5.4.11	N ₂ O ₄ 的几何结构与拓扑结构	(74)
5.4.12	NO ₃ ⁻ 和NO ₄ ³⁻ 的几何结构与拓扑结构	(74)
§ 5.5	氧的化合物结构与四面体成键	(75)
5.5.1	氧的结构特征	(75)
5.5.2	O ₂ 的结构	(76)
5.5.3	O ₃ 的几何结构与拓扑结构	(77)
5.5.4	H ₂ O 的几何结构与拓扑结构	(77)
5.5.5	H ₂ O ₂ 的几何结构与拓扑结构	(78)
5.5.6	SO 的几何结构与拓扑结构	(78)
5.5.7	XeO ₃ 、XeO ₄ 的几何结构与拓扑结构	(78)
5.5.8	O 的四个轨道都参与成键的化合物结构	(79)
§ 5.6	氟的化合物结构与四面体成键	(80)
§ 5.7	磷的化合物结构与四面体成键	(80)
5.7.1	磷的结构特征	(80)
5.7.2	P ₂ 的几何结构与拓扑结构	(81)
5.7.3	P ₄ 的几何结构与拓扑结构	(81)
5.7.4	PH ₃ 的几何结构与拓扑结构	(82)
5.7.5	P ₂ O ₃ 的几何结构与拓扑结构	(82)
5.7.6	P ₂ O ₅ 的几何结构与拓扑结构	(83)
5.7.7	PO ₄ ³⁻ 的几何结构与拓扑结构	(83)
5.7.8	PCl ₃ 的几何结构与拓扑结构	(84)
5.7.9	PCl ₅ 的几何结构与拓扑结构	(84)
§ 5.8	硫的化合物结构与四面体成键	(85)
5.8.1	硫的结构特征	(85)
5.8.2	H ₂ S 的几何结构与拓扑结构	(85)
5.8.3	SO ₂ 的几何结构与拓扑结构	(85)
5.8.4	SO ₃ 的几何结构与拓扑结构	(86)
5.8.5	SO ₄ ²⁻ 的几何结构与拓扑结构	(86)
5.8.6	立方 ZnS 的几何结构与拓扑结构	(87)
5.8.7	六方 ZnS 的几何结构与拓扑结构	(88)
5.8.8	SF ₆ 的几何结构与拓扑结构	(89)
5.8.9	Me ₃ NSO ₂ 的几何结构与拓扑结构	(89)
§ 5.9	氯的化合物结构与四面体成键	(90)
5.9.1	氯的结构特征	(90)
5.9.2	HCl 的拓扑结构	(90)

§ 5.10 第三周期非金属含氧酸根离子的结构	(91)
§ 5.11 铍的化合物结构与四面体成键	(92)
5.11.1 铍的结构特征	(92)
5.11.2 链状多聚 BeCl_2 的几何结构与拓扑结构	(92)
5.11.3 立方 BeO 的几何结构与拓扑结构	(93)
5.11.4 气态 BeCl_2 的几何结构与拓扑结构	(94)
5.11.5 二甲基铍 $\text{Be}(\text{CH}_3)_2$ 的几何结构与拓扑结构	(95)
§ 5.12 铝的化合物结构与四面体成键	(97)
5.12.1 铝的结构特征	(97)
5.12.2 三甲基铝 $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$ 的几何结构与拓扑结构	(98)
5.12.3 Al_2Cl_6 的几何结构与拓扑结构	(98)

第六章 四面体成键与硼烷结构 (101)

导言	(101)
§ 6.1 硼的结构特征	(102)
§ 6.2 硼烷的成键方式	(103)
§ 6.3 硼烷的几何结构与四面体成键	(104)
6.3.1 B_2H_6 的几何结构与拓扑结构	(105)
6.3.2 B_3H_9 的几何结构与拓扑结构	(105)
6.3.3 B_4H_{10} 的几何结构与拓扑结构	(106)
6.3.4 B_5H_9 的几何结构与拓扑结构	(106)
6.3.5 B_6H_{10} 的几何结构与拓扑结构	(107)
6.3.6 B_3H_{11} 的几何结构与拓扑结构	(107)
6.3.7 B_8H_{12} 的几何结构与拓扑结构	(108)
6.3.8 $\text{B}_{10}\text{H}_{14}$ 的几何结构与拓扑结构	(109)
§ 6.4 封闭性硼烷的几何结构与四面体成键	(110)
6.4.1 $\text{B}_3\text{H}_5^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(111)
6.4.2 $\text{B}_6\text{H}_6^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(112)
6.4.3 $\text{B}_7\text{H}_7^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(112)
6.4.4 $\text{B}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(113)
§ 6.5 $\text{R}-12\text{B}_{12}$ 的几何结构与四面体成键	(114)
6.5.1 B_{12} 十二面体结构单元内部的拓扑结构	(114)
6.5.2 同层 B_{12} 结构单元之间的成键方式	(115)
6.5.3 不同层 B_{12} 结构单元之间的成键方式	(116)
§ 6.6 碳硼烷的几何结构与四面体成键	(116)
6.6.1 $\text{C}_2\text{B}_3\text{H}_5$ 的几何结构与拓扑结构	(117)
6.6.2 $\text{C}_2\text{B}_4\text{H}_6$ 的几何结构与拓扑结构	(118)
6.6.3 $\text{C}_2\text{B}_4\text{H}_8$ 的几何结构与拓扑结构	(118)
6.6.4 $\text{C}_2\text{B}_5\text{H}_9$ 的几何结构与拓扑结构	(119)
6.6.5 $\text{C}_2\text{B}_{10}\text{H}_{12}$ 的几何结构与拓扑结构	(120)

§ 6.7	$[\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{11}]^{2-}$ 的拓扑结构与络合物结构	(121)
6.7.1	$[\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{11}]^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(121)
6.7.2	$[(\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{11})\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)]^-$ 的几何结构与拓扑结构	(121)
6.7.3	$[\text{Fe}(\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{11})_2]^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(122)
6.7.4	$[\text{Cu}(\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{11})_2]^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(123)
第七章	对称模型与第一过渡系金属络合物的结构	(125)
导言		(125)
§ 7.1	第一过渡系金属元素的结构特征	(126)
§ 7.2	形成正八面体构型络合物的结构原因	(127)
7.2.1	TiCl_6^{3-} 的几何结构与拓扑结构	(127)
7.2.2	$\text{Cr}(\text{CO})_6$ 的几何结构与拓扑结构	(128)
7.2.3	MnF_6^{4-} 的几何结构与拓扑结构	(129)
7.2.4	$\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$ 的几何结构与拓扑结构	(130)
7.2.5	$\text{Co}(\text{NH}_3)_6^{3+}$ 的几何结构与拓扑结构	(131)
7.2.6	$\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$ 的几何结构与拓扑结构	(132)
§ 7.3	配位体对B电子能量和分布的影响	(133)
7.3.1	配位体对B电子能量的影响	(133)
7.3.2	配位体对B电子分布的影响	(133)
§ 7.4	B电子的分布对八面体几何构型的影响	(138)
7.4.1	畸变八面体络合物与B电子分布的关系	(139)
7.4.2	B^9 组态畸变八面体络合物 $\text{Cu}(\text{bipy})_3(\text{ClO}_4)_2$ 的拓扑结构	(139)
7.4.3	B^9 组态畸变八面体络合物 CuX_2 的拓扑结构	(141)
7.4.4	B^8 组态畸变八面体络合物 $\text{Ni}(\text{diars})_2\text{I}_2$ 的拓扑结构	(142)
7.4.5	B^4 组态畸变八面体络合物 $\text{Mn}(\text{O}_2\text{C}_2\text{H}_5)_3$ 的拓扑结构	(144)
§ 7.5	特殊畸变八面体络合物的结构	(146)
7.5.1	四方锥构型络合物 $\text{Ni}(\text{CN})_5^{3-}$ 的几何结构与拓扑结构	(146)
7.5.2	三角双锥构型络合物 $\text{Fe}(\text{CO})_5$ 的几何结构与拓扑结构	(148)
7.5.3	三角双锥构型络合物 CuCl_5^{3-} 的几何结构与拓扑结构	(150)
7.5.4	四方锥构型络合物 MnCl_5^{2-} 的几何结构与拓扑结构	(151)
7.5.5	平面正方形络合物 $\text{Ni}(\text{CN})_4^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(153)
7.5.6	平面三角形络合物与八面体成键	(154)
§ 7.6	第一过渡系金属环戊二烯络合物的结构	(155)
7.6.1	第一过渡系金属形成环戊二烯络合物的结构原因	(155)
7.6.2	$\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ 的几何结构与拓扑结构	(156)
7.6.3	$\text{Ni}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ 的几何结构与拓扑结构	(158)
7.6.4	$(\text{C}_5\text{H}_5)\text{Mn}(\text{CO})_3$ 的几何结构与拓扑结构	(160)
7.6.5	$[(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{Fe}(\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{11})]^-$ 的几何结构与拓扑结构	(161)
7.6.6	$[\text{Ni}_2(\text{C}_5\text{H}_5)_4]^+$ 的几何结构与拓扑结构	(161)
7.6.7	$[\text{Fe}_3(\text{C}_5\text{H}_5)_4]^{2+}$ 的几何结构与拓扑结构	(162)

§ 7.7 正八面体与正四面体混合方位成键的络合物结构	(163)
7.7.1 形成正四面体络合物的结构原因	(163)
7.7.2 正八面体与正四面体混合方位成键的结构原因	(164)
7.7.3 $\text{Ti}(\text{NO}_3)_4$ 的几何结构与拓扑结构	(164)
7.7.4 CrO_4^{3-} 的几何结构与拓扑结构	(166)
7.7.5 $(\text{NH}_3)_3\text{CrO}_4$ 的几何结构与拓扑结构	(167)
§ 7.8 五配位和六配位构型络合物的可逆转换	(168)
7.8.1 五配位和六配位可逆转换的结构原因	(168)
7.8.2 血红蛋白和肌红蛋白的结构	(168)
7.8.3 血红蛋白Hb中五配位 Fe^{2+} 的成键方式	(169)
7.8.4 $\text{Hb}(\text{O}_2)$ 中六配位 Fe^{2+} 的成键方式	(171)
7.8.5 $\text{Hb}(\text{O}_2)$ 中配位态 O_2 的成键方式	(172)
§ 7.9 第一过渡系原子簇化合物的几何结构与拓扑结构	(173)
7.9.1 双核络合物 $\text{Cr}_2(\text{CH}_3\text{COO})_4(\text{H}_2\text{O})_2$ 的几何结构与拓扑结构	(173)
7.9.2 双核络合物 $\text{Cu}_2(\text{CH}_3\text{COO})_4(\text{H}_2\text{O})_2$ 的几何结构与拓扑结构	(175)
7.9.3 双核络合物 $\text{Cr}_2\text{Cl}_6^{3-}$ 的几何结构与拓扑结构	(176)
7.9.4 双核络合物 $\text{Mn}_2(\text{CO})_{10}$ 的几何结构与拓扑结构	(178)
7.9.5 双核络合物 $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$ 的几何结构与拓扑结构	(179)
7.9.6 双核络合物 $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ 的几何结构与拓扑结构	(181)
7.9.7 三核原子簇化合物 $\text{Fe}_3(\text{CO})_{12}$ 的几何结构与拓扑结构	(183)
7.9.8 三核原子簇化合物 $(\text{CCH}_3)\text{Co}_3(\text{CO})_9$ 的几何结构与拓扑结构	(184)
7.9.9 四核原子簇化合物 $\text{Co}_4(\text{CO})_{12}$ 的几何结构与拓扑结构	(185)
7.9.10 四核原子簇化合物 $\text{Fe}_4(\text{C}_2\text{H}_5)_4(\text{CO})_4$ 的几何结构与拓扑结构	(187)
7.9.11 五核原子簇化合物 $[\text{Ni}_5(\text{CO})_{12}]^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(189)
7.9.12 六核原子簇化合物 $[\text{HCo}_6(\text{CO})_{15}]^-$ 的几何结构与拓扑结构	(191)

第八章 对称模型与第二过渡系金属络合物的结构

导言	(194)
§ 8.1 第二过渡系金属元素的结构特征	(195)
§ 8.2 立方八面体成键与内层电子分布的因果关系	(196)
§ 8.3 三帽三角柱成键与内层电子分布的因果关系	(198)
8.3.1 TcH_9^{2-} 的几何结构与拓扑结构	(199)
8.3.2 $\text{Mo}(\text{dien})(\text{CO})_3$ 的几何结构与拓扑结构	(200)
8.3.3 $\text{K}_2[\text{Mo}_2\text{O}_5(\text{C}_2\text{O}_4)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ 的几何结构与拓扑结构	(202)
8.3.4 NbCl_5 的几何结构与拓扑结构	(203)
8.3.5 NbOCl_3 二聚体的几何结构与拓扑结构	(205)
8.3.6 NbF_5 四聚体的几何结构与拓扑结构	(206)
8.3.7 $[\text{Mo}_3\text{S}(\text{S}_2)_6]^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(207)
8.3.8 $\text{Mo}(\text{C}_6\text{H}_6)(\text{CO})_3$ 的几何结构与拓扑结构	(209)
8.3.9 $\text{Mo}_2(\text{NMe})_6$ 的几何结构与拓扑结构	(210)

§ 8.4	第二过渡系金属环戊二烯络合物的结构	(211)
8.4.1	第二过渡系金属形成环戊二烯络合物的结构原因	(211)
8.4.2	$\text{Ru}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ 的几何结构与拓扑结构	(212)
8.4.3	$(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{MoH}_2$ 的几何结构与拓扑结构	(213)
8.4.4	$(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{NbCl}_2$ 的几何结构与拓扑结构	(214)
8.4.5	$(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{ZrCl}_2$ 的几何结构与拓扑结构	(215)
8.4.6	$(\text{C}_5\text{H}_5)\text{Mo}(\text{CO})_3(\text{C}_2\text{H}_5)$ 的几何结构与拓扑结构	(216)
§ 8.5	畸变三帽三角柱络合物的结构	(218)
8.5.1	八配位十二面体构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(218)
8.5.2	八配位四方反棱柱构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(219)
8.5.3	七配位单帽三角柱构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(221)
8.5.4	七配位五角双锥构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(222)
8.5.5	七配位带帽八面体构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(223)
8.5.6	部分六配位八面体构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(224)
8.5.7	六配位三角柱构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(224)
§ 8.6	正六面体面心与棱中心混合方位成键的络合物结构	(225)
8.6.1	$\text{Mo}(\text{CO})_6$ 的几何结构与拓扑结构	(225)
8.6.2	$[\text{Ru}_2\text{N}_2(\text{NH}_3)_6]^{4+}$ 的几何结构与拓扑结构	(227)
8.6.3	$\text{Mo}_2\text{Cl}_9^{3-}$ 的几何结构与拓扑结构	(228)
8.6.4	$[\text{Ru}_2\text{OCl}_{10}]^{4-}$ 的几何结构与拓扑结构	(230)
8.6.5	$[\text{Ru}_3\text{O}_2(\text{NH}_3)_4]^{6+}$ 的几何结构与拓扑结构	(231)
8.6.6	平面正方形构型络合物的成键方位	(233)
§ 8.7	第二过渡系原子簇化合物的几何结构与拓扑结构	(233)
8.7.1	双核络合物 $\text{Mo}_2\text{Cl}_8^{4-}$ 的几何结构与拓扑结构	(234)
8.7.2	双核络合物 $\text{Mo}_2(\text{CH}_3\text{COO})_4$ 的几何结构与拓扑结构	(235)
8.7.3	双核络合物 $\text{Mo}_2(\text{CH}_2\text{SiMe}_3)_6$ 的几何结构与拓扑结构	(236)
8.7.4	双核络合物 $\text{Mo}_2(\text{OR})_6$ 的几何结构与拓扑结构	(237)
8.7.5	双核络合物 $\text{Mo}_2(\text{CH}_2\text{CMe}_3)_6$ 的几何结构与拓扑结构	(238)
8.7.6	双核络合物 $[\text{Mo}_2(\mu-\text{S}_2)(\text{S}_2)_4]^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(239)
8.7.7	链状 NbCl_4 的几何结构与拓扑结构	(241)
8.7.8	三核原子簇化合物 $[\text{Mo}_3\text{O}_4(\text{C}_2\text{O}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_3]^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(243)
8.7.9	三核原子簇化合物 $[\text{Mo}_3(\mu_3-\text{O})(\mu_2-\text{O})_3\text{F}_6]^{5-}$ 的几何结构与拓扑结构	(244)
8.7.10	三核原子簇化合物 Mo_3O_{13} 的几何结构与拓扑结构	(245)
8.7.11	四核原子簇化合物 $\text{Mo}_4\text{S}_3\text{X}(\mu-\text{dtp})_3(\text{dtp})_3$ 的几何结构与拓扑结构	(247)
8.7.12	六核原子簇化合物 $\text{Mo}_6\text{Cl}_8^{4+}$ 的几何结构与拓扑结构	(248)
8.7.13	六核原子簇化合物 $\text{Nb}_6\text{Cl}_{12}^{2+}$ 的几何结构与拓扑结构	(250)
8.7.14	六核原子簇化合物 $\text{Rh}_6(\text{CO})_{16}$ 的几何结构与拓扑结构	(251)
8.7.15	六核原子簇化合物 $[\text{HRu}_6(\text{CO})_{18}]^-$ 的几何结构与拓扑结构	(253)

第九章	对称模型与第三过渡系金属络合物的结构	(257)
-----	--------------------	-------

导言	(257)
§ 9.1 第三过渡系金属元素的结构特征	(258)
§ 9.2 三帽三角柱成键与内层电子分布的因果关系	(259)
9.2.1 ReH_9^{2-} 的几何结构与拓扑结构	(260)
9.2.2 $\text{WH}_6(\text{PMe}_2\text{Ph})_3$ 的几何结构与拓扑结构	(260)
9.2.3 双核络合物 $\text{W}_2(\text{NR}_2)_6$ 的几何结构与拓扑结构	(261)
9.2.4 双核络合物 $\text{W}_2(\text{CH}_2\text{CMe}_3)_6$ 的几何结构与拓扑结构	(262)
9.2.5 TaCl_5 的几何结构与拓扑结构	(263)
9.2.6 TaOCl_3 二聚体的几何结构与拓扑结构	(265)
9.2.7 TaF_5 四聚体的几何结构与拓扑结构	(266)
9.2.8 $[\text{W}_4\text{O}_{12}\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_4]^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(267)
9.2.9 $\text{Ta}(\text{CHCMe}_3)(\text{C}_5\text{Me}_5)(\text{C}_2\text{H}_5)\text{PMe}_3$ 的几何结构与拓扑结构	(269)
§ 9.3 第三过渡系金属环戊二烯络合物的结构	(270)
9.3.1 第三过渡系金属形成环戊二烯络合物的结构原因	(270)
9.3.2 $\text{Os}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ 的几何结构与拓扑结构	(271)
9.3.3 $(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{TaH}_3$ 的几何结构与拓扑结构	(272)
9.3.4 $(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{WH}_3^+$ 的几何结构与拓扑结构	(273)
9.3.5 $(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{WH}_2$ 的几何结构与拓扑结构	(274)
9.3.6 $(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{ReH}$ 的几何结构与拓扑结构	(275)
9.3.7 $(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{Ta}(\text{CH}_2)(\text{CH}_3)$ 的几何结构与拓扑结构	(276)
§ 9.4 畸变三帽三角柱络合物的几何结构与拓扑结构	(277)
9.4.1 八配位十二面体构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(277)
9.4.2 八配位四方反棱柱构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(278)
9.4.3 七配位单帽三角柱构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(279)
9.4.4 七配位五角双锥构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(280)
9.4.5 七配位带帽八面体构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(281)
9.4.6 六配位三角柱构型络合物与三帽三角柱成键的因果关系	(282)
§ 9.5 三角柱面心与棱中心混合方位成键的络合物结构	(283)
9.5.1 $[(\text{CN})_4\text{OReO}]^{3-}$ 的几何结构与拓扑结构	(284)
9.5.2 $[(\text{CN})_4\text{OReOReO}(\text{CN})_4]^{4-}$ 的几何结构与拓扑结构	(285)
9.5.3 $\text{Re}_2\text{OCl}_3(\text{PPh}_3)_2(\text{C}_2\text{H}_5\text{COO})$ 的几何结构与拓扑结构	(287)
9.5.4 $\text{Re}_2\text{OCl}_3(\text{PPh}_3)_2(\text{C}_2\text{H}_5\text{COO})_2$ 的几何结构与拓扑结构	(288)
9.5.5 $\text{W}_2\text{S}_2(\text{Et}_2\text{NCS}_2)_4$ 的几何结构与拓扑结构	(290)
9.5.6 $\text{W}_2\text{S}_2(\text{Et}_2\text{NCS}_2)_2(\text{OR})_4$ 的几何结构与拓扑结构	(291)
9.5.7 $[\text{Cl}_3\text{ReOReCl}_3]^-$ 的几何结构与拓扑结构	(292)
9.5.8 $\text{ReOCl}_3(\text{PEt}_2\text{Ph})_2$ 的几何结构与拓扑结构	(294)
9.5.9 $\text{Re}(\text{NR})\text{Cl}_3(\text{PEt}_2\text{Ph})_2$ 的几何结构与拓扑结构	(295)
9.5.10 $\text{ReNCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ 的几何结构与拓扑结构	(296)
9.5.11 $\text{ReNCl}_2(\text{PEt}_2\text{Ph})_3$ 的几何结构与拓扑结构	(297)
9.5.12 $\text{Re}_2(\text{CH}_3)_3(\text{CH}_3\text{COO})_4$ 的几何结构与拓扑结构	(299)

§ 9.6 第三过渡系原子簇化合物的几何结构与拓扑结构	(300)
9.6.1 双核络合物 $W_2Cl_9^{3-}$ 的几何结构与拓扑结构	(300)
9.6.2 双核络合物 $W_2(NC_2H_5)_4Cl_2$ 的几何结构与拓扑结构	(302)
9.6.3 双核络合物 $W_2(R_2NCOO)_6$ 的几何结构与拓扑结构	(303)
9.6.4 双核络合物 $Re_2(CH_3COO)_4Cl_2$ 的几何结构与拓扑结构	(304)
9.6.5 双核络合物 $Re_2Cl_8^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(306)
9.6.6 双核络合物 $Re_2Cl_5(DTH)_2$ 的几何结构与拓扑结构	(308)
9.6.7 三核原子簇化合物 Re_3Cl_9 的几何结构与拓扑结构	(310)
9.6.8 三核原子簇化合物 $Re_3Cl_3(CH_2SiMe_3)_6$ 的几何结构与拓扑结构	(311)
9.6.9 三核原子簇化合物 $[W_3O_2(CH_3COO)_6(H_2O)_3]^{2+}$ 的几何结构与拓扑结构	(312)
9.6.10 四核原子簇化合物 $Ir_4(CO)_{12}$ 的几何结构与拓扑结构	(314)
9.6.11 四核原子簇化合物 $[Re_4(\mu_3-S)_4(\mu_2-S)_6]^{4-}$ 的几何结构与拓扑结构	(315)
9.6.12 四核原子簇化合物 $Re_4(\mu_3-H)_4(CO)_{12}$ 的几何结构与拓扑结构	(317)
9.6.13 四核原子簇化合物 $Re_4(CO)_{16}^{2-}$ 的几何结构与拓扑结构	(319)
9.6.14 六核原子簇化合物 $W_6Br_8^{4+}$ 的几何结构与拓扑结构	(320)
9.6.15 六核原子簇化合物 $Ta_6Cl_{12}^{2+}$ 的几何结构与拓扑结构	(321)
9.6.16 六核原子簇化合物 $[HOS_6(CO)_{18}]^-$ 的几何结构与拓扑结构	(322)
§ 9.7 第六周期 $Ce(NO_3)_6^{3-}$ 的几何结构与拓扑结构	(324)
后记	(327)