

# 目 录

中譯本序	
第三版序	
第二版序	
第一版序	
<b>第一章 共振和化学鍵</b> .....	<b>1</b>
1-1 价鍵理論的发展 .....	1
1-2 化学鍵的类型 .....	3
化学鍵的定义 .....	3
离子鍵和其他的靜电型鍵 .....	3
共价鍵 .....	4
金属鍵; 分数鍵 .....	6
1-3 共振的觀念 .....	6
1-4 氫分子离子和单电子鍵 .....	9
基态氫原子 .....	10
氫分子离子 .....	10
維里(Virial)定理 .....	14
Hellmann-Feynman 定理 .....	15
单电子鍵形成的条件 .....	16
1-5 氫分子和电子对鍵 .....	17
Condon 对氫分子的处理 .....	17
氫分子的 Heitler-London 处理法 .....	18
部分离子性和变形作用 .....	19
生成电子对鍵的条件 .....	21
<b>第二章 原子的电子結構和形成共价鍵的形式規則</b> .....	<b>24</b>
2-1 綫光譜的解釋 .....	24
2-2 定态; Bohr 頻率原理 .....	27
2-3 氫原子的定态 .....	28
2-4 碱金属原子的电子結構 .....	32
$l$ 的选择定則 .....	34

2-5	自旋的电子和譜綫的精細結構 .....	35
2-6	多价电子原子的电子結構 .....	38
2-7	Pauli 不相容原理和元素周期系 .....	40
2-8	Zeeman 效应与原子和单原子离子的磁学性质 .....	51
	杂化的原子状态 .....	52
2-9	关于共价鍵形成的形式規則 .....	54
<b>第三章</b>	<b>共价鍵的部分离子性和原子的相对电負性 .....</b>	<b>58</b>
3-1	从一种极端鍵型向另一种极端鍵型的过渡 .....	59
	鍵型的連續变化 .....	59
	鍵型的不連續变化 .....	61
3-2	鍵型和原子排列 .....	63
3-3	在双原子的卤化物分子中鍵的性质 .....	65
3-4	卤化物分子的鍵能;正常共价鍵的能量 .....	69
	几何平均的假設 .....	72
3-5	单鍵鍵能的經驗值 .....	73
3-6	元素的电負性标度 .....	79
	电負性标度的訂立 .....	79
3-7	化合物在标准状态下的生成热;完整的电負性标度 .....	82
3-8	与其他性质間的关系 .....	86
3-9	原子的电負性和鍵的部分离子性 .....	87
3-10	有机物重排反应中的热函变化和电負性标度 .....	92
3-11	顏色和价鍵性质的联系 .....	94
<b>第四章</b>	<b>定向的共价鍵;鍵的强度和鍵角 .....</b>	<b>101</b>
4-1	原子軌道的性质和成鍵能力 .....	101
4-2	杂化鍵軌道;四面体型碳原子 .....	105
	关于四面体型軌道的一些結果的推导 .....	108
	四价碳原子的量子力学描述 .....	110
4-3	未共享电子对对杂化作用的影响 .....	112
	未共享电子对对分子电偶极矩的貢獻 .....	115
4-4	不完全 $s$ $p$ 层的軌道 .....	115
4-5	鍵軌道的集中 .....	117
4-6	滿填电子层中的电子分布 .....	119
4-7	繞单鍵的内阻旋轉 .....	120
	具有未共享电子对的原子間繞单鍵的内阻旋轉 .....	124

4-8	重键的轨道和键角	126
4-9	重键的部分离子性	131
4-10	未共享电子对对键能和键长的影响	131
<b>第五章</b>	<b>络合键轨道;键型的磁性判据</b>	<b>137</b>
5-1	包含 $d$ 轨道的键	137
5-2	八面体型键轨道	138
5-3	正方形键轨道	144
5-4	键型的磁性判据	151
5-5	八面体型络合物的磁矩	152
5-6	四面体型和正方形配位络合物的磁矩	158
5-7	电中性原理和八面体型络合物的稳定性	161
5-8	配位场理论	163
5-9	包含 $d$ 轨道的其他构型	165
5-10	具有未共享电子对的原子的构型	168
<b>第六章</b>	<b>分子在几个价键结构间的共振</b>	<b>175</b>
6-1	一氧化二氮和苯中的共振	175
6-2	共振能	180
	重键的键能值	180
	离子共振能和重键的部分离子性	181
	氮-氮叁键	182
	共振能的经验值	183
6-3	芳族分子的结构	189
	芳族分子中共振的定量处理	189
	芳族分子中取代基的定位效应	195
	共振对分子电偶极矩的影响	199
6-4	烃类自由基的结构及其稳定性	200
6-5	共振论的本质	204
<b>第七章</b>	<b>原子间距离及其与分子和晶体结构的关系</b>	<b>212</b>
7-1	正常共价分子中的原子间距离: 共价半径	212
7-2	对电负性差值的校正	217
7-3	双键和叁键的半径	219
7-4	原子间的距离和键的弹力常数	220
7-5	原子间的距离和共振	221
	芳烃中的键长	225

7-6	键级和键长; 在两个等效结构中共振所引起的键长的改变	228
7-7	单键: 叁键共振	228
7-8	键的等效性或非等效性的条件	230
7-9	四面体型和八面体型共价半径	232
	四面体型半径	232
	八面体型半径	237
	其他的共价半径	240
	锰的反常半径	242
7-10	分数键的原子间距离	243
7-11	单键金属半径的数值	244
7-12	原子的范德华半径和非键合半径	246
<b>第八章</b>	<b>分子中共振的类型</b>	<b>256</b>
8-1	简单的共振分子的结构	256
	一氧化碳和一硫化碳	256
	二氧化碳及相关的分子	257
	腈类和异腈类	259
8-2	邻近电荷规则和电中性规则	260
	氰酸盐与硫氰酸盐	263
8-3	硝基和羧基; 酸和碱的强度	264
8-4	酰胺和肽的结构	270
8-5	碳酸根、硝酸根和硼酸根离子及相关的分子	271
8-6	氯乙烯和氯苯的结构及其性质	276
8-7	共轭体系中的共振	278
	过氧分子	284
	含叁键的共轭系	285
8-8	杂环分子中的共振	286
8-9	超共轭作用	294
<b>第九章</b>	<b>含有部分双键性的化学键的分子和络离子的结构</b>	<b>301</b>
9-1	四氟化硅及有关分子的结构	301
9-2	四氟化硅及有关分子	304
9-3	氟氯甲烷和有关分子; 键型对化学反应性能的影响	304
9-4	较重非金属原子间所成键的部分双键性	306
9-5	卤化硼	308
9-6	较重元素的氧化物和含氧酸	310

氯酸根离子和有关离子.....	313
含氧酸的强度.....	314
硫酰氯和有关分子.....	317
较重元素的氧化物.....	318
9-7 过渡金属的羰基化合物及其他共价络合物的结构和稳定性...	320
过渡元素的氨基和硝基络合物.....	324
<b>第十章 单电子键和三电子键; 缺电子物质</b> .....	<b>331</b>
10-1 单电子键.....	331
10-2 三电子键.....	332
稳定的三电子键的生成条件.....	332
氮分子离子.....	333
10-3 氮的氧化物和它们的衍生物.....	334
氧化氮.....	334
二氧化氮.....	335
亚硝酰卤化物.....	336
亚硝基-金属络合物.....	337
二氧化氮.....	339
四氧化二氮.....	339
10-4 超氧化物离子和氧分子.....	341
臭氧化物离子.....	343
10-5 其他含三电子键的物质.....	344
半醌和有关物质的结构.....	345
10-6 缺电子物质.....	351
10-7 硼烷的结构.....	355
10-8 与硼烷有关的物质.....	365
10-9 含有桥式甲基的物质.....	367
作为反应中间物的正碳离子.....	368
烯炔和银离子的络合物.....	369
10-10 二茂铁和有关的物质.....	370
二茂铁的共振键处理.....	371
<b>第十一章 金属键</b> .....	<b>384</b>
11-1 金属的性质.....	384
11-2 金属价.....	385
11-3 金属轨道.....	389
11-4 金属的原子间距离及其键数.....	391

11-5	球体的最紧密堆积	394
	等效球体的立方与六方最紧密堆积	395
	含有非等效球体的最紧密堆积结构	397
11-6	金属元素晶体中的原子排列	399
	最紧密堆积的结构	399
	与最紧密堆积结构有关的金属结构	402
	立方体心排列	404
11-7	过渡金属的电子结构	404
11-8	金属半径和杂化键轨道	407
11-9	金属互化物的键长	411
11-10	基于简单基本结构的金属互化物的结构	414
11-11	二十面体型结构	415
11-12	$\gamma$ -合金; Brillouin 多面体	419
11-13	金属互化物中的电子迁移	421
11-14	金属与硼、碳和氮之间的化合物	425
11-15	含有金属-金属键的分子和晶体	427
11-16	硫化矿物的结构	432
<b>第十二章</b>	<b>氢 键</b>	<b>442</b>
12-1	氢键的性质	442
12-2	氢键对物质的物理性质的影响	445
12-3	含有氟原子的氢键	450
12-4	冰和水; 内包化合物	453
	内包化合物	457
	水	459
12-5	醇和有关物质	460
12-6	羧酸	464
	两个氧原子之间的对称氢键	470
12-7	氢键的光谱研究	471
	生成强氢键的化合物	471
	分子内弱氢键的生成	473
	影响氢键生成的因素	479
12-8	蛋白质中的氢键	482
12-9	核酸中的氢键	486
<b>第十三章</b>	<b>离子的大小与离子晶体的结构</b>	<b>495</b>

13-1	离子間作用力与晶格能	495
	Born-Haber 热化学循环	499
13-2	离子的大小: 一价半徑与晶体半徑	501
13-3	碱金属卤化物的晶体	508
	阴离子的接触与双重排斥力	509
	氯化铯型的排列	511
	离子相对大小对碱金属卤化物性质的影响的詳細討論	512
	碱金属卤化物的气体分子	518
13-4	其他简单离子晶体的結構	520
	碱土元素的氧化物、硫化物、硒化物与碲化物	520
	一些具有金紅石型与螢石型結構的晶体; 不对称价型物质的离子間距离	521
	配位数对离子間距离的影响	525
	在决定不同結構的相对稳定性对半徑比的影响	528
13-5	在离子晶体中大离子的最紧密堆积	530
13-6	确定复杂离子晶体結構的原則	531
	配位多面体的性质	532
	共頂点多面体的数目; 静电键規則	535
	多面体頂点、棱边和平面的共用	546
<b>第十四章</b>	<b>关于共振及其在化学上的意义的总结</b>	<b>554</b>
14-1	共振的本质	554
14-2	共振与互变异构現象的关系	555
14-3	共振体系的組成結構的真实性	558
14-4	共振概念的将来发展和应用	559
	附录 I 物理常数的数值	562
	附录 II Bohr 原子	563
	附录 III 类氢軌道	565
	附录 IV 为 Pauli 不相容原理所允許的原子的 Russell-Saunders 状态	569
	Zeeman 效应	570
	Paschen-Back 效应	571
	极端 Paschen-Back 效应	572
	两个等效的 $p$ 电子	573
	Landé $g$ -因子	574
	附录 V 共振能	578

附录 VI 价键结构的波函数 .....	581
附录 VII 分子光谱 .....	583
电子能量曲线; Morse 函数 .....	583
分子的振动和转动 .....	585
微波谱 .....	587
电子分子光谱 .....	587
联合散射光谱 .....	589
附录 VIII Boltzmann 分配定律 .....	590
经典力学中的 Boltzmann 分配定律 .....	591
附录 IX 原子、离子和分子的电极化率和电偶极矩 .....	593
电极化和介电常数 .....	593
电子极化率 .....	595
介电常数的 Debye 方程 .....	595
附录 X 物质的磁性 .....	598
抗磁性 .....	598
顺磁性 .....	599
铁磁性 .....	600
反铁磁性 .....	602
铁磁盐磁性 .....	603
附录 XI 氢卤酸的强度 .....	605
附录 XII 键能和键离解能 .....	609
英汉译名对照及索引 .....	611