



# 目 次

序	1~10
---	------

## 1 章 共鳴と化学結合

1.1	原子価理論の発展	1
1.2	化学結合の型式	3
	化学結合の定義	4
	イオン結合と他の静電結合	4
	共有結合	5
	金属結合, 分結合	7
1.3	共鳴概念	7
1.4	水素分子イオンと一電子結合	11
	水素原子の正規状態	11
	水素分子イオン	13
	ビリアル定理	15
	Hellmann-Feynman の定理	16
	一電子結合生成の条件	17
1.5	水素分子と電子対結合	18
	Condon の水素分子の取扱	18
	Heitler-London による水素分子の取扱	19
	部分的なイオン性と原子の変形	20
	電子対結合形成の条件	22

## 2 章 原子の電子構造と共有結合形成に関する形式的な規則

2.1	線スペクトルの解釈	23
2.2	定常状態, Bohr の振動数原理	26
2.3	水素原子の定常状態	27
2.4	アルカリ原子の電子構造	31
	$l$ に対する選択律	33
2.5	電子のスピンとスペクトル線の微細構造	33

2.6	2 個あるいはそれ以上の原子価電子を持った原子の電子構造	36
2.7	Pauli の排他原理と元素の周期律	38
2.8	Zeeman 効果, 原子および 1 原子イオンの磁氣的性質	48
	混成原子状態	49
2.9	共有結合形成の形式的規則	51

### 3 章 共有結合の部分的イオン性と原子の相対的電気陰性度

3.1	結合の一つの理想型より他の理想型へのうつりかわり	55
	結合型の連続的变化	55
	結合型の不連続的变化	57
3.2	結合の型と原子の配列	59
3.3	二原子分子, ハロゲン化物の結合の性質	62
3.4	ハロゲン化物分子の結合エネルギー。正常共有結合のエネルギー	67
	幾何平均の仮定	70
3.5	一重結合エネルギーの実測値	71
3.6	元素の電気陰性度	76
	電気陰性度の決定法	76
3.7	標準状態の化合物の生成熱; 完全な電気陰性度の目盛	79
3.8	他の諸性質との関係	83
3.9	原子の電気陰性度と結合の部分的イオン性	85
3.10	有機転移反応のエンタルピー変化と電気陰性度の尺度	90
3.11	色と結合型との関係	92

### 4 章 共有結合の方向性, 結合の強度と結合角

4.1	原子軌道の性質とその結合形成能力	95
4.2	混成結合軌道, 四面体型炭素原子	98
	四面体型軌道についてのいろいろな結果の導き方	102
	四価の炭素原子の量子力学的な記述	105
4.3	混成に対する不共有対の影響	106
	分子の電気双極子モーメントに対する不共有電子対の寄与	108

4.4	不完全な $s-p$ 殻の軌道	109
4.5	結合軌道の集結	111
4.6	完成殻の電子密度	113
4.7	一重結合のまわりの束縛回転	115
	不共有電子対を持った原子間の一重結合のまわりの束縛回転	119
4.8	多重結合に対する結合軌道と結合角	121
4.9	多重結合の部分的イオン性	126
4.10	結合エネルギー, 結合距離に対する不共有対の影響	127

## 5 章 複雑な結合軌道, 結合型の磁氣的判別

5.1	$d$ 軌道をふくんだ結合	129
5.2	八面体型結合軌道	130
5.3	正方形型結合軌道	135
5.4	結合型の磁氣的判定	143
5.5	八面体型錯化合物の磁気能率	144
5.6	四面体型, 正方形型に配位した錯化合物の磁気能率	150
5.7	電気中性原理と八面体型錯化合物の安定度	153
5.8	配位子場の理論	155
5.9	$d$ 軌道をふくむ他の原子配列	157
5.10	不共有電子対を持った原子の原子配列	161

## 6 章 数種の原子価結合構造間の分子の共鳴

6.1	亜酸化窒素とベンゼンにおける共鳴	164
6.2	共鳴エネルギー	169
	多重結合の結合エネルギー値	169
	イオン共鳴エネルギーと多重結合の部分的イオン性	170
	窒素・窒素三重結合	171
	共鳴エネルギーの実測値	172
6.3	芳香族分子の構造	178
	芳香族分子における共鳴の定量的考察	182

芳香族分子の置換基の配向	184
分子の電気双極子モーメントに対する共鳴の影響	189
6.4 炭化水素の遊離基の構造とその安定度	190
6.5 共鳴理論の本質	194

## 7 章 原子間距離, それと分子構造, 結晶構造との関係

7.1 正常共有結合分子の原子間距離, 共有結合半径	201
7.2 電気陰性度の差に対する補正	207
7.3 二重結合半径と三重結合半径	209
7.4 原子間距離と結合力定数	210
7.5 原子間距離と共鳴	212
芳香族炭化水素の結合の長さ	216
7.6 結合次数と結合の長さ; 二つの等価な構造の間の共鳴による 結合の長さの変化	218
7.7 一重結合と三重結合の共鳴	219
7.8 結合の等価, 非等価の条件	220
7.9 四面体型および八面体型共有結合半径	223
四面体型半径	223
八面体型半径	226
その他の共有結合半径	229
マンガン半径の異常性	231
7.10 分結合に対する原子間距離	232
7.11 金属一重結合半径の値	233
7.12 原子のファン・デル・ワールス半径と非結合半径	235

## 8 章 分子における共鳴の型

8.1 簡単な共鳴分子の構造	240
一酸化炭素と一硫化炭素	240
二酸化炭素とその関連分子	242
シアン化物とイソシアン化物	243
8.2 隣接荷電則と電気中性則	245

シアン酸塩とチオシアン酸塩	247
8.3 ニトロ基とカルボキシル基、酸および塩基の強さ	248
8.4 アミドとペプチドの構造	254
8.5 炭酸イオン、硝酸イオン、硼酸イオンおよびそれらの作る分子	256
8.6 クロルエチレン、クロルベンゼンの構造と性質	261
8.7 共役系における共鳴	263
雑沓分子	269
三重結合をふくむ共役系	270
8.8 異節環状分子における共鳴	271
8.9 超共役	276

## 9 章 二重結合性を帯びた結合をふくむ分子や錯イオンの構造

9.1 四塩化珪素とその関連分子の構造	278
9.2 四弗化珪素とその関連分子	281
9.3 弗化塩化メタンとその関連分子：化学反応性に対する結合型の影響	282
9.4 重い非金属原子間の結合の二重結合性	284
9.5 硼素のハロゲン化物	285
9.6 重い元素の酸化物と同じくオキシ酸	288
塩素酸イオンとその関連イオン	291
オキシ酸の強さ	292
弗化スルフリル酸と関連分子	296
重い元素の酸化物	296
9.7 遷移金属のカルボニルやその他の共有錯化合物の構造と安定度	298
遷移元素のシアン化物とニトロ錯化合物	303

## 10 章 一電子結合と三電子結合，電子不足物質

10.1 一電子結合	308
10.2 三電子結合	309
安定な三電子結合のできるための条件	309
ヘリウム分子イオン	311

10.3	窒素の酸化物とその誘導体	311
	酸化窒素	311
	酸化窒素の会合体	312
	ハロゲン化ニトロシル	313
	ニトロシル-金属錯化合物	314
	二酸化窒素	316
	四・二酸化窒素	317
10.4	超酸化物イオンと酸素分子	318
	オゾニドイオン	322
10.5	三電子結合を持ったその他の分子	322
	セミキノンおよびその類似物質の構造	324
10.6	電子不足物質	329
10.7	ボランの構造	333
10.8	ボランの関連物質	342
10.9	橋かけメチル基を持った物質	344
	反応の中間体としてのカルボニウムイオン	346
	オレフィンと銀イオンの錯化合物	347
10.10	フェロセンとその関連物質	348
	共鳴結合によるフェロセンの考察	349

## 11章 金属結合

11.1	金属の性質	356
11.2	金属原子価	357
11.3	金属軌道	361
11.4	金属の原子間距離と結合数	363
11.5	球の最密填充	366
	同等な球の立方型最密填充と六方型最密填充	366
	等価でない球からできている最密填充構造	369
11.6	金属元素の結晶における原子配列	370
	最密填充構造	371
	最密填充構造と関連のある金属構造	373

体心立方配列	374
11.7 遷移金属の電子構造	375
11.8 金属半径と混成結合軌道	377
11.9 金属間化合物の結合の長さ	381
11.10 簡単な単一構造を基調にした金属間化合物の構造	384
11.11 二十面体型構造	385
11.12 $r$ -合金, ブリルイン多面体	388
11.13 金属間化合物における電子移動	391
11.14 金属と硼素, 炭素, 窒素などとの化合物	395
11.15 金属-金属結合を持った分子や結晶	397
11.16 硫化物鉱物の構造	402

## 12章 水素結合

12.1 水素結合の性質	407
12.2 物質の物理的性質に対する水素結合の影響	411
12.3 弗素原子をふくむ水素結合	416
12.4 氷と水, 包接化合物	420
包接化合物	424
水	427
12.5 アルコールとその関連物質	428
12.6 カルボン酸	431
酸素原子間の対称的な水素結合	437
12.7 水素結合の分光学的研究	438
強い水素結合の形成を示す化合物	439
弱い分子内水素結合の形成	442
水素結合形成に影響する因子	448
12.8 蛋白質における水素結合	450
12.9 核酸の水素結合	454

## 13章 イオンの大きさとイオン結晶の構造

13.1 イオン間の力と結晶エネルギー	457
---------------------	-----



	Born-Haber の熱化学的輸行	461
13.2	イオンの大きさ。一価半径および結晶半径	463
13.3	アルカリハロゲン化物の結晶	470
	陰イオン接触と二重反発	472
	塩化セシウム型の配列	473
	ハロゲン化アルカリの性質が陰陽両イオンの大きさの比によってどのように 影響されるかについての考察	475
	ハロゲン化アルカリの気体分子	481
13.4	他の簡単なイオン結晶の構造	483
	アルカリ土類の酸化物, 硫化物, セレン化物, テルル化物	483
	金紅石型および螢石型構造の結晶, 非対称性原子価型の物質における イオン間距離	484
	イオン間距離に対する配位数の影響	488
	種々の構造の相対的安定度に対する半径比の影響	491
13.5	イオン結晶における大きなイオンの最密填充	492
13.6	複雑なイオン結晶の構造を決定している原理	494
	配位多面体の性質	495
	一隅を共有している多面体の数, 静電気原子価則	498
	多面体の隅, 稜および面の共有	507

## 14 章 共鳴についての総括的考察と化学に対する共鳴の意義

14.1	共鳴の本質	511
14.2	共鳴と互変異性との関係	512
14.3	共鳴系を作っている構造の実在性	516
14.4	共鳴概念の将来における発展と応用	517

## 付 録 と 索 引

付録 I	物理定数の値	521
付録 II	ボーア原子	522
付録 III	水素類似軌道	524
付録 IV	Pauli の排他律により許される原子の Russell-Saunders 状態	527
	ゼーマン効果	528

---

	Paschen-Back 効果	529
	極端な Paschen-Back 効果	530
	2 個の等価な $p$ 電子	531
	Landé の $g$ 因子	533
付録 V	共鳴エネルギー	536
付録 VI	原子価結合構造に対する波動関数	539
付録 VII	分子スペクトル	541
	電子エネルギー曲線, モース関数	541
	分子の振動と回転	542
	マイクロ波スペクトル	544
	分子の電子スペクトル	545
	ラマン効果	546
付録 VIII	Boltzmann の分布則	548
	古典力学における Boltzmann 分布則	549
付録 IX	電気分極率と原子, イオン, 分子の電気双極子モーメント	551
	電気分極と誘電率	551
	電子分極	553
	誘電率に対する Debye の式	553
付録 X	物質の磁氣的性質	556
	反磁性	556
	常磁性	557
	強磁性	559
	反強磁性	560
	フェリ磁性	561
付録 XI	ハロゲン化水素酸の強さ	560
付録 XII	結合エネルギーと結合解離エネルギー	565
	人名索引	1~10
	事項索引	11~18