

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие переводчика	9
Предисловие	13
Благодарности	15
Глава 1	
КАК В НАУКЕ ИССЛЕДУЮТ СЛОЖНЫЕ ПРОБЛЕМЫ	17
1.1. Введение: сложность моделей в науке	17
1.2. Из чего состоят молекулы?	20
1.3. Взаимодействия между атомами	21
1.4. Простейшие примеры: H_2 и LiH	23
1.4.1. Молекула водорода	23
1.4.2. Молекула гидрида лития	26
1.4.2.1. Что происходит с остальными электронами атома лития?	29
1.4.2.2. Каково влияние отталкивания ядер?	30
1.4.3. Сравнение H_2 и LiH	30
1.5. Что нужно рассмотреть дальше?	31
Приложение А	
КАК ПОНИМАТЬ 3D-КОНТУРЫ	34
А.1. Трехмерные образы	34
А.2. Распределение 2s-электрона лития	35
А.2.1. Как это соотносится с орбиталями, описанными в учебниках	37
А.2.2. О несферических распределениях	37



Приложение Б

ВОЗМОЖНО ЛИ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ?	39
Б.1. Связь с законами природы	39
Б.2. Устойчивые молекулы	40
Б.3. Равнораспределение энергии	41
Б.4. Квантовый вывод	43

Глава 2

ЧТО МЫ ЗНАЕМ ОБ АТОМАХ И МОЛЕКУЛАХ?	44
2.1. Электронная структура атомов	44
2.1.1. Атом водорода	44
2.1.2. Многоэлектронные атомы	47
2.1.3. Принцип Паули	49
2.1.3.1. Формулировка принципа Паули	49
2.1.4. Краткие выводы по структуре атомов	49
2.2. Эмпирическая химия	50

Приложение В

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ОРБИТАЛЕЙ	54
В.1. Что такое орбиталь?	54
В.2. Орбитали: атомные и молекулярные	57

Глава 3

СТРАТЕГИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ	58
3.1. Обзор	58
3.2. И снова гидрид лития	60
3.2.1. Поляризация и гибридные АО	60
3.2.2. Молекулярные орбитали	63
3.2.2.1. Краткие выводы	67

Приложение Г

ЯВЛЯЕТСЯ ЛИ ГИБРИДИЗАЦИЯ РЕАЛЬНЫМ ПРОЦЕССОМ?	70
---	----

Глава 4

ПРИНЦИП ПАУЛИ И ОРБИТАЛИ	72
4.1. Трудности с гелием	72
4.2. Когда орбитали взаимно исключают друг друга?	75



4.3. Как это работает для АО?	78
4.4. Молекула гелия: уточнение структуры	80
4.5. Роль атомных орбиталей в теории валентности	83
4.6. Общие выводы по LiH и He ₂	85

Глава 5

МНОГОАТОМНАЯ МОЛЕКУЛА: МЕТАН	86
5.1. Молекула метана, CH ₄	86
5.2. Электронная структура метана	87
5.3. Форма молекулы метана	89
5.4. Химическая связь и принцип Паули	91
5.4.1. Предварительные выводы по молекуле метана	92
5.5. Химическое описание метана	93
5.5.1. Как использовать эти структуры: метод валентных связей	95
5.6. Метан: выводы	98

Глава 6

НЕПОДЕЛЕННЫЕ ПАРЫ ЭЛЕКТРОНОВ	100
6.1. Почему не все электроны участвуют в химических связях?	100
6.2. Что такое неподеленная пара?	102
6.2.1. Молекула аммиака	104
6.2.2. Молекула воды	107
6.3. Формы простых молекул	108
6.3.1. Молекула воды: уточнение структуры	109
6.4. Реакции неподеленных пар	111
6.5. Краткие выводы	112

Глава 7

ОРГАНИЧЕСКИЕ МОЛЕКУЛЫ С КРАТНЫМИ СВЯЗЯМИ	113
7.1. Двойные и тройные связи	113
7.2. Многообразие кратных связей в молекулах	115
7.3. Этилен и метиловый альдегид	117
7.4. Двойная связь в этилене и метанале	119
7.4.1. Сигма- (σ) и пи- (π) обозначения в плоских молекулах	121
7.5. σ - и π -орбитали в C ₂ H ₄ и CH ₂ O	122
7.5.1. Контурсы молекулы этилена	123



7.5.2. Контурные диаграммы метанала	125
7.5.3. Относительные энергии двух связей	127
7.6. Реакционная способность двойной связи	128
7.7. Кратные связи: общая схема	129
Глава 8	
СИММЕТРИЯ МОЛЕКУЛ	130
8.1. Вопрос симметрии	130
8.2. Симметрия: обобщение	132
8.3. Исследование молекул H_2O и бензола	133
8.3.1. Молекула H_2O	134
8.3.2. σ -Система бензола	137
8.4. Молекулярные орбитали связей и молекулярные орбитали симметрии	140
8.5. Предостережение	141
Глава 9	
ДВУХАТОМНЫЕ МОЛЕКУЛЫ С КРАТНЫМИ СВЯЗЯМИ	143
9.1. Постановка задачи	143
9.2. Молекула азота, N_2	144
9.2.1. Энергии МО молекулы N_2	147
9.2.2. Симметрия и молекула N_2	149
9.3. Молекула монооксида углерода, CO	151
9.4. Другие гомоядерные двухатомные молекулы	153
9.4.1. Молекула кислорода, O_2	154
9.5. Уроки, извлеченные из рассмотрения двухатомных молекул	156
Глава 10	
ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНАЯ СВЯЗЬ	158
10.1. Введение: знакомые реакции	158
10.1.1. Растворение	159
10.1.2. Реакционная способность неподеленной пары: молекула CO	162
10.1.3. CO и атомы переходных металлов	164
10.2. Донорно-акцепторная связь: выводы	165



Глава 11

ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ ПОДСТРУКТУРЫ: АРОМАТИЧНОСТЬ	167
11.1. Молекула бензола	167
11.2. Делокализованные электроны	171
11.3. Нечувствительные к окружению π -подструктуры?	175
11.4. Систематика названий химических соединений и заключение	178

Глава 12

ОРГАНИЧЕСКАЯ И НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ	181
12.1. Комментарий по результатам	181
12.2. Азотная кислота и родственные молекулы	182
12.2.1. Нитрат-анион NO_3^-	186
12.3. Угольная кислота и карбонаты	188
12.4. Серная кислота и сульфаты	188

Глава 13

ДАЛЬШЕ ВНИЗ ПО ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ ЭЛЕМЕНТОВ	190
13.1. Что происходит с увеличением атомного номера?	190
13.2. Возможная «сдача в аренду» неподеленных пар	191
13.3. Конкретный случай: сера	192
13.4. Общий случай: гипервалентность	195
13.4.1. Одиночные или двойные связи?	197
13.4.2. Стерический эффект	198
13.5. Как описать эти связи?	199
13.5.1. Сравнение: 16 валентных электронов	200
13.6. Обобщающие выводы	205

Глава 14

НОВЫЙ ВЗГЛЯД НА ЭМПИРИЧЕСКИЕ ПРАВИЛА	207
14.1. Ограничения правила октета	207
14.2. Основы правила октета	208
14.3. Анализ заселенности	210
14.4. Резонанс и резонансные гибриды	213
14.5. Число окисления	214
14.6. Числовые правила и законы природы	217



Глава 15

О МОЛЕКУЛАХ — НАРУШИТЕЛЯХ ЗАКОНОВ	219
15.1. Исключения из правил	219
15.2. Гидриды бора и мостиковые связи	221
15.2.1. Гипотетическое соединение: BH_3	221
15.2.2. Обнаруженные соединения	222
15.2.3. Мостиковые трехцентровые связи	223
15.3. Другие трехцентровые связи?	225
15.4. Металлы и кристаллы	228
15.4.1. Металлы	229
15.4.2. Кристаллы	230
15.5. Водородная связь.....	232
15.6. Нарушители законов?	233

Глава 16

ПЕРЕХОДНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ	235
16.1. Предварительные сведения	235
16.2. Переходные металлы: влияние <i>d</i> -электронов	236
16.3. Экранирование в электронной структуре атомов	237
16.4. История и извинение	240
16.4.1. Кристаллическая модель	240
16.4.2. Модель молекулярных орбиталей	241
16.4.3. Химическая модель	244
16.4.4. Извинение	245
16.5. Замечания	246

Глава 17

ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ХИМИИ. ЗАКЛЮЧЕНИЕ	249
17.1. Проблемы теоретической химии	249
17.1.1. Межмолекулярные силы	249
17.1.2. Химические реакции	250
17.2. Заключение	253
Рекомендуемая литература	255