

شیمی فیزیک

ایرا لوین

جلد سوم: مکانیک کوانتومی و
طیف‌سنجی مولکولی

ویرایش پنجم

مترجمان:

دکتر غلامعباس پارسا

استاد دانشگاه صنعتی شریف

دکتر غلامرضا اسلامپور

استاد دانشگاه تربیت معلم تهران

دکتر بیژن نجفی

استاد دانشگاه صنعتی اصفهان

دکتر علی مقاری

استاد دانشگاه تهران



انتشارات خنجر

شیمی فیزیک / جلد سوم: مکانیک کوانتومی و طیف‌سنجی مولکولی

ویرایش پنجم

مؤلف: ایرا لوین

مترجمان: غلامرضا اسلامپور، غلامعباس یارسافر، علی مقاری، بیژن نجفی

ناشر: مؤسسه فرهنگی فاطمی

چاپ اول، ۱۳۸۶

شابک ۹۶۴-۳۱۸-۴۱۹-۶ (جلد ۳)

ISBN 964-318-419-6 (v.3)

شابک دوره ۹۶۴-۳۱۸-۴۲۰-X

ISBN 964-318-420-X (set)

تیراژ: ۱۵۰۰ نسخه

آماده‌سازی پیش از چاپ: واحد تولید مؤسسه فرهنگی فاطمی

- مدیر تولید: فرید مصلحی

- اجرای جلد: زهرا قورچیان

- حروفچینی و صفحه‌بندی (TjX-پارک): زهره امینی

- آماده‌سازی تصاویر: فاطمه ثقفی

- نمونه‌خوان: مهدی ملک‌زاده

- نظارت بر چاپ: علی محمدپور

لیتوگرافی: صاحب

چاپ و صحافی: چاپخانه خاشع

کلیه حقوق برای مؤسسه فرهنگی فاطمی محفوظ است.

مؤسسه فرهنگی فاطمی، تهران، کدپستی ۱۴۱۴۶ - خیابان دکتر فاطمی، شماره ۱۵۹

تلفن: ۸۸۹۶۱۴۲۲ - ۸۸۹۶۴۷۷۰ - ۸۸۹۵۶۲۵۸

info@fatemi.ir

Levine, Ira N.

لوین، ایرا، ۱۹۳۷-

شیمی فیزیک / ایرا لوین: مترجمان غلامرضا اسلامپور ... (و دیگران). - تهران: فاطمی، ۱۳۸۶.
ج ۳: مصور جدول، نمودار.

ISBN 964-318-420-X (دوره).

ISBN 964-318-417-X (ج ۱).

ISBN 964-318-418-8 (ج ۲).

ISBN 964-318-419-6 (ج ۳).

نهرستوری بر اساس اطلاعات فیا.

Physical chemistry, 5th ed, c2002.

عنوان اصلی:

مترجمان: ج ۱. ترمودینامیک -- ج ۲. ترمودینامیک محلولها و سینتیک شیمیایی -- ج ۳. مکانیک کوانتومی و طیف‌سنجی مولکولی.

۱. شیمی فیزیک. الف. اسلامپور، غلامرضا. ۱۳۳۰. مترجم. ب. عنوان.

۵۹/۴

QD۵۴۴/۴/۱۳۸۶

کتابخانه ملی ایران

۸۴-۲۲۶۲۱

فهرست

۹۳۹	۳-۱۹ اتم هیدروژن	هفت	پیشگفتار مترجمان
۹۵۱	۴-۱۹ اندازه حرکت زاویه‌ای	نه	پیشگفتار مؤلف
۹۵۳	۵-۱۹ اسپین الکترون	۸۷۳	فصل ۱۸ مکانیک کوانتومی
۹۵۵	۶-۱۹ اتم هلیوم و اصل پاولی	۸۷۴	۱-۱۸ تابش جسم سیاه و کوانتشن انرژی
۹۶۲	۷-۱۹ اندازه حرکت‌های زاویه‌ای اوربیتالی و اسپینی کل	۸۷۷	۲-۱۸ اثر فوتوالکتریک و فوتونها
۹۶۵	۸-۱۹ اتمهای چند الکترونی و جدول تناوبی	۸۷۹	۳-۱۸ نظریه بور در مورد اتم هیدروژن
۹۷۲	۹-۱۹ توابع موج هارتری-فاک و برهم‌کنش آرایشی	۸۸۱	۴-۱۸ فرضیه دوبروی
۹۷۶	۱۰-۱۹ خلاصه	۸۸۳	۵-۱۸ اصل عدم قطعیت
۹۸۵	فصل ۲۰ ساختار الکترونی مولکولی	۸۸۵	۶-۱۸ مکانیک کوانتومی
۹۸۵	۱-۲۰ پیوندهای شیمیایی	۸۹۲	۷-۱۸ معادله مستقل از زمان شرودینگر
۹۹۰	۲-۲۰ تقریب بورن-اینهایمر	۸۹۵	۸-۱۸ ذره در جعبه یک‌بعدی
۹۹۶	۳-۲۰ یون مولکول هیدروژن	۹۰۱	۹-۱۸ ذره در جعبه سه‌بعدی
۱۰۰۳	۴-۲۰ روش ساده MO برای مولکولهای دواتمی	۹۰۴	۱۰-۱۸ چندحالتی
۱۰۱۱	۵-۲۰ توابع موج SCF و هارتری-فاک	۹۰۵	۱۱-۱۸ عملگرها
۱۰۱۳	۶-۲۰ روش اوربیتال مولکولی برای مولکولهای چنداتمی	۹۱۲	۱۲-۱۸ نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی
۱۰۲۷	۷-۲۰ روش پیوند-والانس	۹۱۶	۱۳-۱۸ مسائل دودره‌ای
۱۰۲۹	۸-۲۰ محاسبه خواص مولکولی	۹۱۷	۱۴-۱۸ چرخنده صلب دودره‌ای
۱۰۳۴	۹-۲۰ محاسبه دقیق توابع موج الکترونی و خواص مولکولی	۹۱۹	۱۵-۱۸ روشهای تقریبی
۱۰۳۹	۱۰-۲۰ نظریه تابعی-دانسیته (DFT)	۹۲۳	۱۶-۱۸ عملگرهای هرمیتی
۱۰۴۷	۱۱-۲۰ روشهای نیم-تجربی	۹۲۷	۱۷-۱۸ خلاصه
۱۰۵۱	۱۲-۲۰ چگونگی انجام محاسبات شیمی کوانتومی	۹۳۷	فصل ۱۹ ساختار اتمی
۱۰۵۷	۱۳-۲۰ روش مکانیک-مولکولی (MM)	۹۳۷	۱-۱۹ واحدها
۱۰۶۲	۱۴-۲۰ دورنمای آینده	۹۳۸	۲-۱۹ زمینه تاریخی

۱۵-۲۰ خلاصه	۱۰۶۳	۶-۲۲ ترمودینامیک آماری گازهای دو اتمی و یک اتمی ایده آل ۱۲۲۰
فصل ۲۱ طیف‌سنجی و فوتوشیمی	۱۰۷۳	۷-۲۲ ترمودینامیک آماری گازهای چند اتمی ایده آل ۱۲۳۵
۱-۲۱ تابش الکترومغناطیسی	۱۰۷۳	۸-۲۲ خواص ترمودینامیکی گاز ایده آل و ثابتهای تعادل ۱۲۳۹
۲-۲۱ طیف‌سنجی	۱۰۷۷	۹-۲۲ آنتروپی و قانون سوم ترمودینامیک ۱۲۴۴
۳-۲۱ چرخش و ارتعاش مولکولهای دو اتمی	۱۰۸۶	۱۰-۲۲ نیروهای بین مولکولی ۱۲۴۸
۴-۲۱ طیفهای چرخشی و ارتعاشی مولکولهای دو اتمی	۱۰۹۴	۱۱-۲۲ مکانیک آماری سیالات ۱۲۵۵
۵-۲۱ تقارن مولکولی	۱۱۰۱	۱۲-۲۲ خلاصه ۱۲۶۱
۶-۲۱ چرخش مولکولهای چند اتمی	۱۱۰۴	فصل ۲۳ نظریه‌های سرعتهای واکنش ۱۲۷۱
۷-۲۱ طیف‌سنجی کهموج	۱۱۰۷	۱-۲۳ نظریه برخورد کُره سخت در واکنشهای فازگازی ۱۲۷۱
۸-۲۱ ارتعاش مولکولهای چند اتمی	۱۱۱۰	۲-۲۳ سطوح انرژی پتانسیل ۱۲۷۵
۹-۲۱ طیف‌سنجی فروسرخ	۱۱۱۵	۳-۲۳ دینامیک واکنش مولکولی ۱۲۸۵
۱۰-۲۱ طیف‌سنجی رامان	۱۱۲۲	۴-۲۳ نظریه حالت‌گذار برای واکنشهای گاز ایده آل ۱۲۹۳
۱۱-۲۱ طیف‌سنجی الکترونی	۱۱۲۶	۵-۲۳ فرمولبندی ترمودینامیکی TST ۱۳۰۶
۱۲-۲۱ طیف‌سنجی رزونانس مغناطیسی هسته‌ای	۱۱۳۳	برای واکنشهای فازگازی ۱۳۰۹
۱۳-۲۱ طیف‌سنجی رزونانس اسپین-الکترون	۱۱۵۲	۶-۲۳ واکنشهای تک مولکولی ۱۳۱۲
۱۴-۲۱ بخش چرخش نوری و دورنگی نمایی دورانی	۱۱۵۴	۷-۲۳ واکنشهای سه مولکولی ۱۳۱۲
۱۵-۲۱ طیف‌سنجی فوتوالکترونی	۱۱۵۶	۸-۲۳ واکنشها در محلول ۱۳۱۸
۱۶-۲۱ فوتوشیمی	۱۱۵۸	۹-۲۳ خلاصه ۱۳۱۸
۱۷-۲۱ نظریه گروه	۱۱۶۵	فصل ۲۴ جامدات و مایعات ۱۳۲۳
۱۸-۲۱ خلاصه	۱۱۷۹	۱-۲۴ جامدات و مایعات ۱۳۲۳
فصل ۲۲ مکانیک آماری	۱۱۹۳	۲-۲۴ پلیمرها ۱۳۲۴
۱-۲۲ مکانیک آماری	۱۱۹۳	۳-۲۴ پیوند شیمیایی در جامدات ۱۳۲۵
۲-۲۲ مجموعه سیستمهای بندادی	۱۱۹۵	۴-۲۴ انرژیهای چسبندگی در جامدات ۱۳۲۷
۳-۲۲ تابع تقسیم بندادی		۵-۲۴ محاسبات نظری انرژیهای چسبندگی ۱۳۲۹
برای سیستمی از ذرات بدون برهم‌کنش	۱۲۰۷	۶-۲۴ فاصله‌های بین اتمی در بلورها ۱۳۳۴
۴-۲۲ تابع تقسیم بندادی یک گاز ایده آل	۱۲۱۲	۷-۲۴ ساختارهای بلوری ۱۳۳۶
۵-۲۲ قانون توزیع بولتسمن		۸-۲۴ نمونه‌هایی از ساختارهای بلوری ۱۳۴۴
برای مولکولهای بدون برهم‌کنش	۱۲۱۵	۹-۲۴ تعیین ساختارهای بلوری ۱۳۴۹

پ ۱	پیوست	۱۳۵۷	۱۰-۲۴ تعیین ساختار سطوح
پ ۱	جدولهای ضمیمه	۱۳۶۱	۱۱-۲۴ نظریه نوار برای جامدات
پ ۹	پاسخهای مسائل انتخابی	۱۳۶۴	۱۲-۲۴ مکانیک آماری بلورها
پ ۱۵	فرهنگ واژه‌ها (انگلیسی به فارسی)	۱۳۷۱	۱۳-۲۴ نقایص در جامدات
پ ۱۹	نمابه	۱۳۷۲	۱۴-۲۴ مایعات
پ ۳۵	کتابشناسی	۱۳۷۸	۱۵-۲۴ خلاصه

www.ketab.ir

پیشگفتار مترجمان

حمد و سپاس خداوند متان را که توفیق عنایت فرمود تا کتاب شیمی فیزیک تألیف لوین (چاپ پنجم، ۲۰۰۲) را ترجمه کنیم و در سه مجلد در اختیار دانشجویان، دانش پژوهان و سایر علاقه‌مندان فارسی‌زبان قرار دهیم. این کتاب که یکی از مهمترین کتابهای مطرح در سطح جهان در زمینه شیمی فیزیک است می‌تواند به‌عنوان کتاب درسی دروس مختلف (شیمی فیزیکیهای ۱، ۲ و ۳، ترمودینامیک شیمیایی، سینتیک شیمیایی، شیمی کوانتومی و طیف‌سنجی مولکولی) دانشجویان علوم پایه، فنی و مهندسی، پزشکی و کشاورزی مورد استفاده قرار گیرد. به‌علاوه به‌دلیل ارجاعهای بسیار دقیق و بنیادی مباحث این کتاب به منابع و مأخذهای مهم، می‌توان از آن به‌عنوان یک کتاب مقدماتی برای ورود به موضوعات تحقیقاتی در زمینه‌های مختلف شیمی فیزیک استفاده کرد.

یکی از علل انتخاب این کتاب برای ترجمه، شیوه بیان توصیفی و بسیار دقیق مباحث آن است که با بیانی روان و جذاب به طرح موضوعات شیمی فیزیک پرداخته است. از ویژگیهای دیگر این کتاب آن است که نویسنده در ارائه مطالب هم استاد و هم دانشجو را مدنظر داشته است، به‌گونه‌ای که در بسیاری از مباحث کتاب این احساس حاصل می‌شود که گویی بحثی در طرفه بین استاد و دانشجو در جریان است. ارائه مطالب با چنین شیوه دوگانه همراه با مثالها، تمرینها و کاربردهای متعدد آن به‌گونه‌ای است که از این کتاب تا حد زیادی می‌توان به‌عنوان یک خودآموز دروس شیمی فیزیک نیز استفاده کرد. از ویژگیهای دیگر این کتاب، تعاریف دقیق واژه‌های کلیدی، هدایت دانشجو در نحوه به‌کارگیری معادلات و عاری از اشتباه بودن متن آن است.

در پایان از انتشارات فاطمی به جهت قبول انتشار این کتاب و همکاران خوب این مؤسسه به ویژه آقای مهدی ملک‌زاده که تلاش فراوانی برای بالا بردن کیفیت آن مبذول داشته‌اند صمیمانه سپاسگزاریم.

غلامرضا اسلامپور، غلامعباس پارسا،

علی مقاری، بیژن نجفی

۱۳۸۵

پیشگفتار مؤلف

این کتاب درسی برای درس شیمی فیزیک دوره کارشناسی است. در نگارش این کتاب، وضوح، دقت و عمیق بودن مطالب را مدنظر داشته‌ام. به منظور کمک در ساده‌شدن مطالعه کتاب، تعاریف دقیق، توضیح مفاهیم، جزئیات کامل اکثر معادلات و مرور مباحث مربوط به ریاضی و فیزیک را ارائه کرده‌ام. از مطالب سطحی، که موجب می‌شود دانشجوی فهم عمیقی از شیمی فیزیک دریافت نکند خودداری کرده‌ام. در عوض، کوشیده‌ام تا مطالب را به صورتی دقیق، بنیادی و جدید در سطحی که برای دوره کارشناسی ممکن باشد عرضه کنم.

اصلاحات در چاپ پنجم

مسائل. عنصر کلیدی در هر درس شیمی فیزیک حل مسئله است. در چاپ جدید اصلاحات زیر در مسائل اعمال شده است.

- بخشهای ۹-۱ در مورد پیشنهادهایی برای مطالعه و ۲-۱۲ در مورد حل مسئله توسعه داده شده است.
- بسیاری از مسائل صحیح / غلط که به جای محاسبه نیاز به فکر کردن دارد اضافه شده است تا از این طریق دانشجوی به سرعت بتواند پاسخ آن را تشخیص دهد.
- چندین مثال جدید حل شده در خصوص مسائلی که دانشجویان با آنها مشکل دارند اضافه شده است.
- دسته‌بندی مسائل مربوط به هر بخش که قبلاً به شکل جدولی در ابتدای مسائل بود به شکل جدیدی که به صورت جداگانه در ابتدای هر بخش منعکس شده است تغییر داده شده است تا راحت‌تر بتوان فهمید که مسائل مربوط به کدام بخش است.
- سؤالاتی در مورد دانشمندان مورد توجه اضافه شده است (مسائل ۱۸-۷۱، ۱۹-۷۲ و ۲۰-۶۳).

کاربردهای صفحه‌گستر. صفحه‌گسترها راهکار ساده‌ای را جهت حل مسائل پیچیده شیمی فیزیک در اختیار دانشجویان قرار می‌دهد بدون آنکه برای حل این مسائل به برنامه‌نویسی نیاز داشته باشند. آموزشهای مفصلی برای به‌کارگیری صفحه‌گستر در بخشهای مختلف کتاب داده شده است که عبارتند از:

- برازش چندجمله‌ای برای C_p (بخش ۵-۶).
 - حل معادله‌ای غیرخطی (بخش ۴-۶).
 - حل معادلات غیرخطی که در مسائل تعادلات همزمان رخ می‌دهد (بخش ۵-۶)
 - انجام برازش خطی و غیرخطی داده‌ها از طریق حداقل مربعات (بخش ۳-۷)
 - به‌کارگیری معادله حالت برای محاسبه فشار بخار و حجمهای مولی مایع و بخار در حالت تعادل (بخش ۵-۸)
 - محاسبه نمودار فاز مایع-مایع برای مینیم کردن G با به‌کارگیری مدل حل ساده (بخش ۱۱-۱۲).
 - کاربردهای اضافی صفحه‌گستر عبارتند از:
 - انتگرالگیری عددی معادلات سرعت با به‌کارگیری روش اولر اصلاح شده (بخش ۷-۱۷ و مسئله ۵۷-۱۷).
 - برازش داده‌های طیف‌سنجی برای تعیین ثابتهای مولکولی. (مسئله ۲۱-۳۲).
- شیمی کوانتومی. پیشرفتهای انجام شده در افزایش قدرت رایانه‌ها و توسعه روشهای محاسبات کوانتومکانیکی نظیر نظریه تابعی چگالی موجب شده است که محاسبات مکانیک کوانتومی برای مولکولها به‌عنوان ابزاری ضروری در بسیاری از سطوح شیمی مطرح شود. با اضافه کردن بخشهای جدید زیر، مبحث شیمی کوانتومی تقویت یافته است:
- بخش ۱۰-۲۰ در خصوص نظریه تابعی چگالی (DFT) به دانشجویان فهم بسیاری از کارآئیهای محاسباتی را ارائه کرده و روش محاسباتی در شیمی کوانتومی مولکولی به‌طور وسیعی به‌کار رفته است.
 - بخش ۱۲-۲۰ برای آشنا کردن دانشجویان با محاسبات شیمی کوانتومی از طریق به‌کارگیری برنامه‌های شیمی کوانتومی ارائه شده است. چندین مسئله برای کار در منزل داده شده است که در آنها از دانشجویان در مورد انجام محاسبات مکانیک کوانتومی و مکانیک مولکولی سؤال شده است (مسائل ۲۰-۵۵ و ۲۰-۵۹).
 - بخش ۱۳-۲۰ در مورد مکانیک مولکولی، ایده‌های اساسی این روش را که در سطح وسیعی برای مولکولهای بزرگ به‌کار می‌رود توضیح داده است.
 - بخش ۱۶-۱۸ عملگرهای هرمیتی را توضیح داده و برخی مباحث پیشرفته در مکانیک کوانتومی را ارائه می‌کند. این بخش انتخابی است و بدون آنکه تأثیری بر روی فهم بخشهای بعدی داشته باشد می‌تواند حذف شود.
 - بخش ۱۷-۲۱ در مورد نظریه گروه، گروه‌های تقارن و نمایشها را معرفی می‌کند. این بخش نیز در صورت تمایل می‌تواند حذف شود.

کاربردهای زیست‌شناسی. به منظور انعکاس افزایش دائمی اهمیت کاربردهای زیست‌شناسی در شیمی، مباحث بیوشیمی مطابق زیر اضافه شده است:

- فشارهای منفی و بالا رفتن شیره درخت (بخش ۴-۸).
- کاهش نقطه انجماد و پروتئینهای ضد یخ در موجودات زنده (بخش ۳-۱۲).
- روشهای طیف‌سنجی جرمی برای تعیین اوزان مولکولی پروتئینها (بخش ۳-۱۲).
- تخمین فاکتورهای تغلیظ مواد زیستی (bioconcentration factors) از ضرایب تقسیم اکتانل - آب (بخش ۷-۱۲).
- به‌کارگیری الکترودهای چاپ‌کننده به‌عنوان حسگر زیستی (biosensor) گلوکز (بخش ۵-۱۴).
- جداسازی مولکولهای زیستی با روش الکتروفورهای ژل و لوله موئینه (بخش ۶-۱۶).
- فلورسانس در ترتب DNA (بخش ۱۱-۲۱).
- طیف CD در مطالعه آرایش فضایی مولکولهای زیستی (بخش ۱۴-۲۱).
- میکروسکوپ نیروی اتمی (بخش ۱۰-۲۴).
- شبیه‌سازی کامپیوتری دینامیک مولکولی برای تاخوردگی پروتئین (بخش ۱۴-۲۴).
- سایر مباحث جدید. سایر مباحث اضافه شده یا توسعه داده شده عبارتند از:
 - آنژیوبی حفرة سیاه (بخش ۸-۳).
 - نقایص اصل لوشاتلیه (بخش ۶-۶).
 - تخمین خواص ترمودینامیکی با به‌کارگیری جمع‌پذیری گروهی (بخش ۱۰-۵).
 - تعادل واکنش همزمان (بخش ۵-۶ و ۶-۶).
 - هیدروژن مایع فلزی (بخش ۴-۷).
 - برنامه‌های کامپیوتری برای تخمین خواص ترمودینامیکی (بخش ۱۰-۵)، محاسبه نمودارهای فاز (بخش ۱۱-۱۲)، انجام محاسبات چند تعادلی (بخش ۶-۱۱)، معادلات انتگرالی سرعت (بخش ۷-۱۷) و انجام محاسبات شیمی کوانتومی (بخش ۱۲-۲۰).
 - سیالات فوق بحرانی (بخش ۳-۸).
 - مدل‌هایی برای ضرایب فعالیت محلولهای غیرالکترولیت (بخش ۵-۱۰).
 - رفتار ضرایب فعالیت الکترولیت در غلظتهای بالا (بخش ۸-۱۰).
 - لایه سطحی میکرو (بخش ۳-۱۳).
 - مغناطیسی شدن و آسایش در NMR (بخش ۱۲-۲۱).
 - مایعات یونی در دمای اطاق.
- ساده‌سازیها. برخی توضیحات برای ساده شدن باکوتاه نمودن، مطابق زیر صورت گرفته است:
 - بخش ۶-۱۰ در مورد محلولهای الکترولیت از طریق بردن ترمودینامیک زوج یون به بخش ۶-۱۰.
 - فصول ۱۴ (سیستمهای الکتروشیمیایی) و ۱۶ (فرایندهای انتقالی) با حذف چند مبحث کوچک خلاصه‌تر شده است.

- بخش ۸-۹ که در مورد خواص مولی جزئی و تعادل در محلولهای رقیق ایده‌آل بحث نموده بود خلاصه‌تر شده است.

- بخش ۱۰-۱۵ که در مورد توزیع برابر انرژی بحث کرده بود ساده‌تر و خلاصه‌تر شده است. واحدها و علامتها. در به‌کارگیری واحدها و علامتها بازنگری شده است:

- توضیح در مورد واحدهای گوسی حذف و برای الکتریسیته و مغناطیس فقط واحد SI به‌کار رفته است. به‌هرحال، برخی واحدهای غیر SI متعارف نظیر اتمسفر، تور، کالری، آنگستروم، دبی و پواز هنوز در برخی جاها به‌منظور آشنایی دانشجویان با آنها به‌کار رفته است.

- علامتها به‌طور کامل براساس توصیه‌های IUPAC تغییر داده شده‌اند.

سطح ریاضی. علیرغم عمق مطالب، سطح ریاضی آنها در حد معقولی حفظ شده است و از به‌کارگیری ریاضیات پیشرفته‌ای که برای دانشجویان ناآشناست پرهیز شده است. به‌دلیل آنکه ریاضیات معضلی است برای بسیاری از دانشجویانی که تلاش می‌کنند در زمینه شیمی فیزیک توانمند شوند، لذا مباحثی مروری در مورد آن ارائه شده است (بخش ۶-۱، ۸-۱ و ۸-۸).

سازماندهی. کتاب به‌گونه‌ای سازماندهی شده است که دانشجویان می‌توانند وسعت و منطق شیمی فیزیک را بهتر از بعباران شدن توسط فرمولها و ایده‌های نامنظم احساس نمایند. در این خصوص، فصول ترمودینامیک با یکدیگر جمع شده‌اند و مطالب شیمی کوانتومی با هم آمده‌اند. مکانیک آماری بعد از ترمودینامیک و شیمی کوانتومی آمده است.

معادلات. شماره معادلات مهم که باید به‌خاطر سیرده شوند ستاره زده شده‌اند. در ایجاد نظریه‌ها و رسیدن به معادلات، به‌طور واضحی فرضیه‌ها و تقریبهایی که زده شده‌اند بیان شده است، به‌طوری که دانشجویان نگران آن نخواهند بود که چه موقع آنها را به‌کار برند و چه وقت به‌کار نبرند. شرایط کاربرد معادلات مهم ترمودینامیکی به‌طور صریح در کنار آنها آمده است.

شیمی کوانتومی. شیمی کوانتومی درسی است که می‌تواند به دو صورت عرضه شود: مبحثی فوق‌العاده سنگین ریاضی که موجب می‌شود ایده‌های فیزیکی را برای بیشتر دانشجویان کارشناسی نامفهوم کند و یا مبحثی توصیفی محض که تکرار همان مباحثی است که دانشجویان از قبل در درسهای پیشین آموخته‌اند. محاسبات خواص مولکولی که در این کتاب بحث شده است جدید و براساس مفاهیم مکانیک مولکولی، نیمه‌تجربی، تابع چگالی محور، و قائم به خود است به قسمی که دانشجویان می‌توانند ارزش این محاسبات را نسبت به مباحث توصیفی غیرنظری درک کنند.

مسائل. هر فصل مسائل متنوع زیادی دارد (هم محاسبه‌ای و هم مفهومی) و پاسخ بسیاری از مسائل عددی داده شده‌اند. زمان در دسترس کلاس درس برای حل مسائل معمولاً محدود است، طوری که یک کتاب حل مسئله تهیه شده است و می‌تواند با اجازه استاد درس توسط دانشجویان خریداری شود. بخشهای ۲-۱۲ و ۱-۹ پیشنهادهای عملی برای حل مسئله و مطالعه را ارائه می‌نماید.