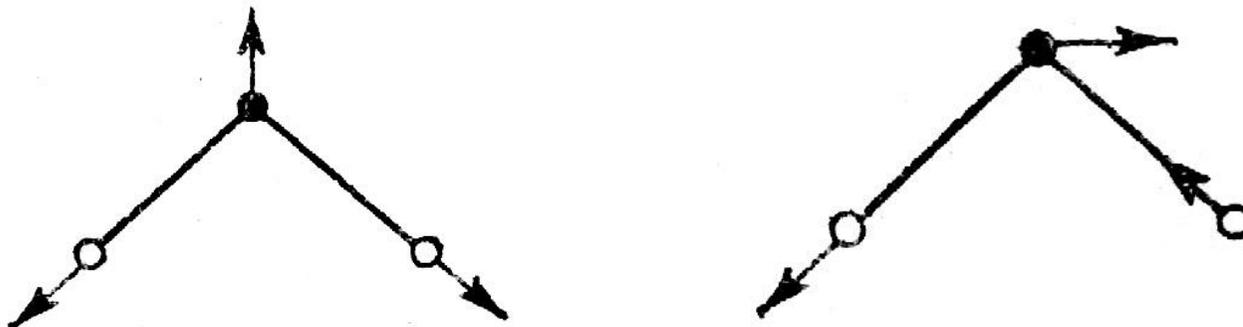
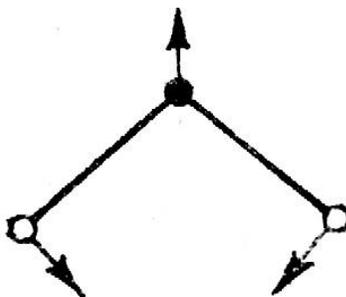


# Виды колебаний в нелинейной молекуле $\text{H}_2\text{O}$ .

2 типа валентных колебаний

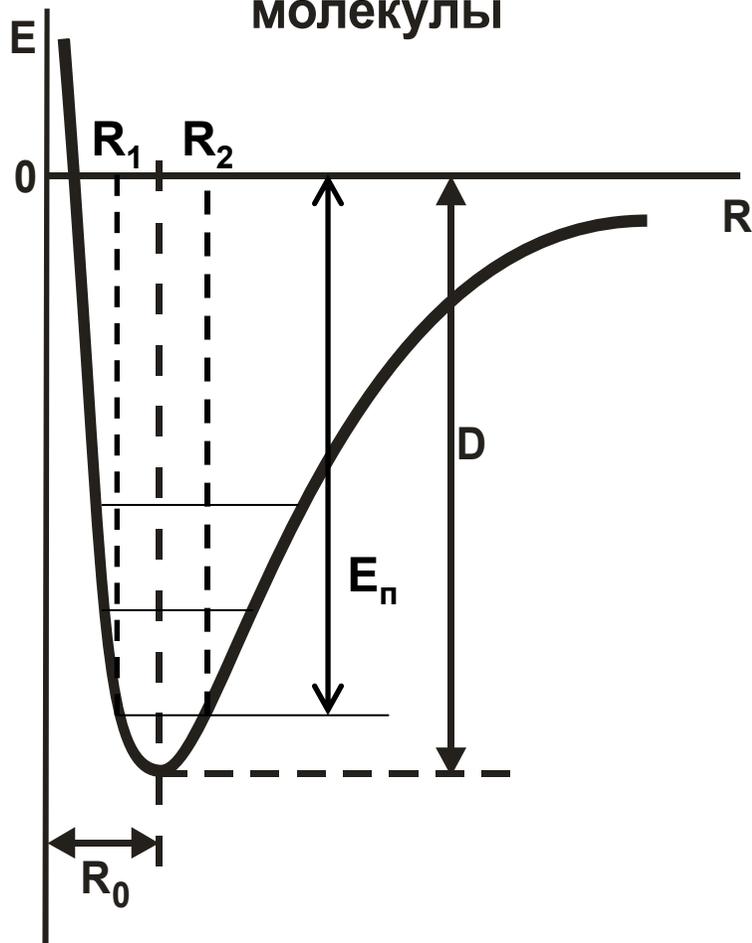


1 тип деформационных колебаний



У 3-х ат. нелинейной М. всего 9 степеней свободы. Из них: 3 – поступательных; 3 – вращательных; 3 – колебательных.

Кривая  
потенциальной энергии  $E(R)$   
молекулы



$R_1$  – минимальное расстояние  
между ядрами;  
 $R_2$  – максимальное расстояние  
между ядрами.

Т.к. не бывает полностью  
замороженных колебаний,  
то полная энергия  
молекулы  $E_n$  всегда больше  
минимума ( $D$ ), а расстояние  
между ядрами колеблется в  
пределах от  $R_1$  до  $R_2$ .

$R_0$  Равновесное расстояние между ядрами

$D$  Энергия химической связи

## Распределение Больцмана. Великая Китайская Стена.



У подножия стены  
всегда много людей.

Я



На вершине стены, куда  
тяжело подняться почти  
никого нет!

В мире молекул все  
точно так же.

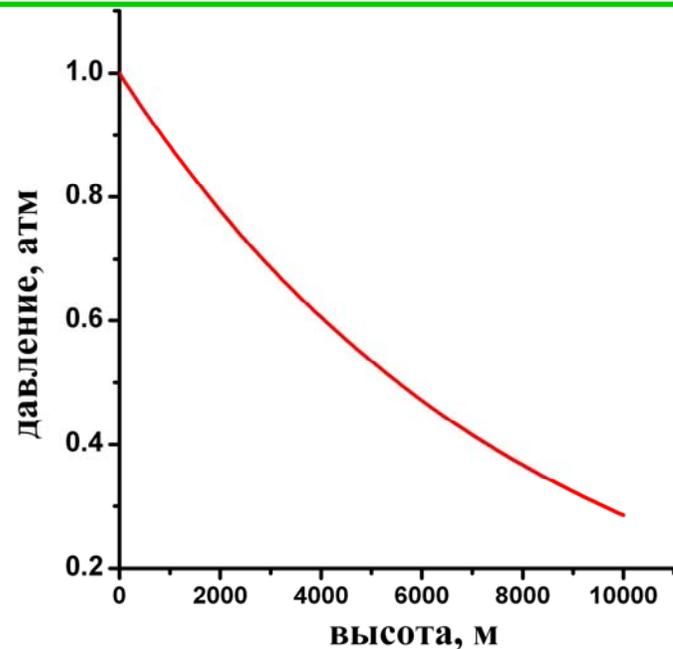
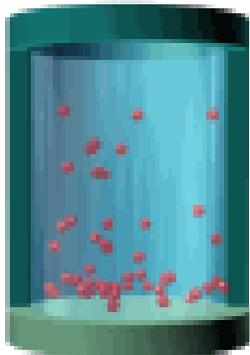
## Распределение Больцмана .

$$\omega_i = A \cdot e^{-E_i / k_B T}$$

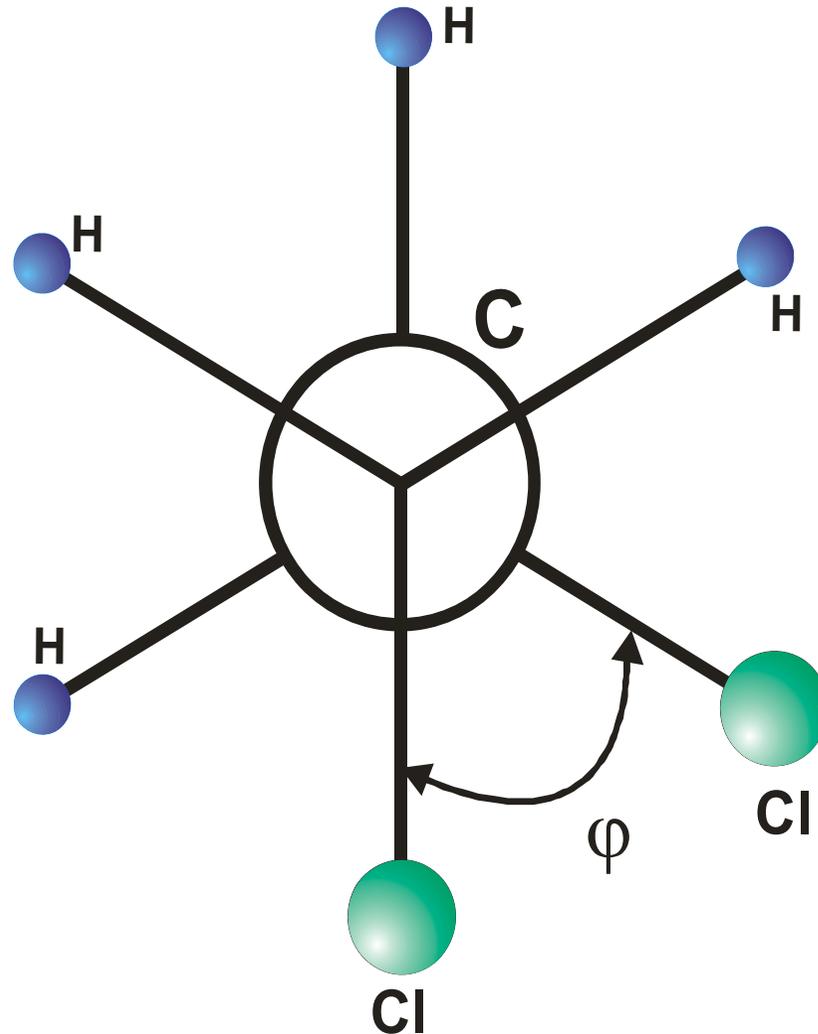
$W_i$  – вероятность найти частицу в состоянии с энергией  $E_i$ .

**Барометрическая формула (зависимость давления от высоты) – частный случай РБ.**

$$P = P_0 \exp\left(-M_r g \frac{h - h_0}{RT}\right)$$



# Молекула дихлорэтана в проекции Ньюмена



# Энергия молекулы дихлорэтана как функция торсионного угла

