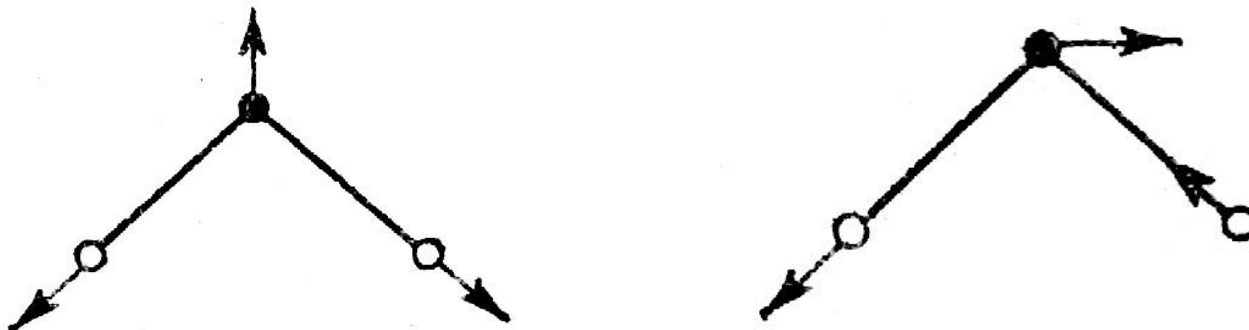
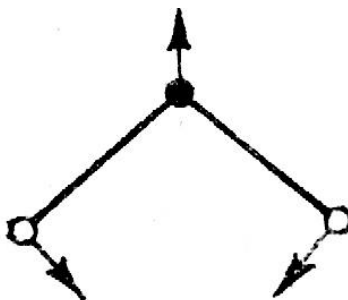


Виды колебаний в нелинейной молекуле H_2O .

2 типа валентных колебаний

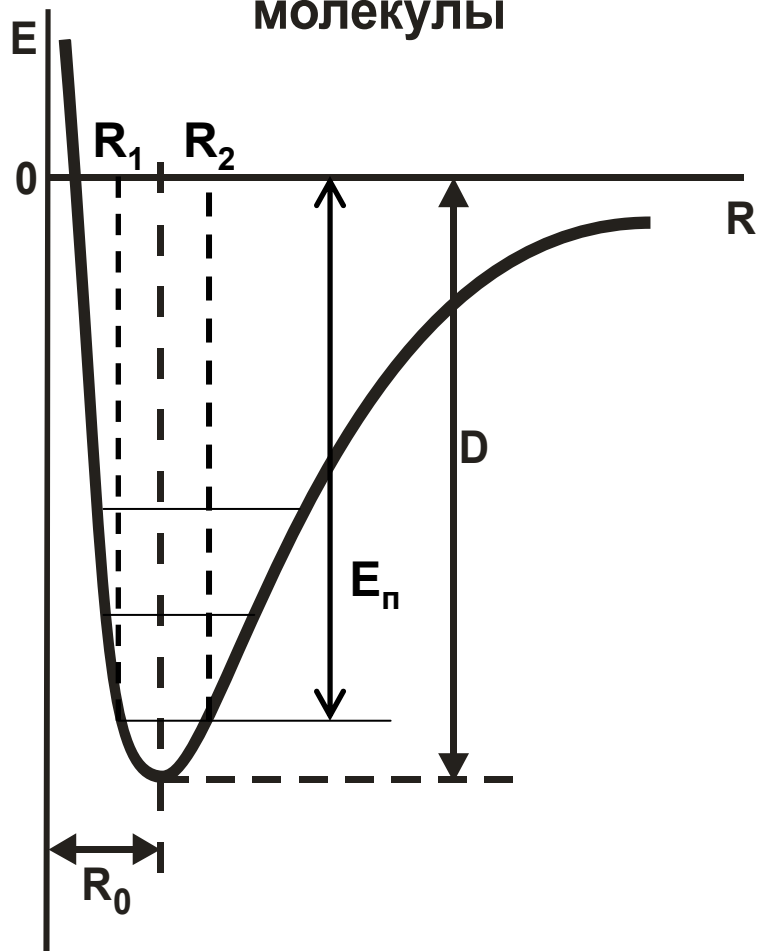


1 тип деформационных колебаний



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_0 Равновесное расстояние между ядрами

D Энергия химической связи

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 .**

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.

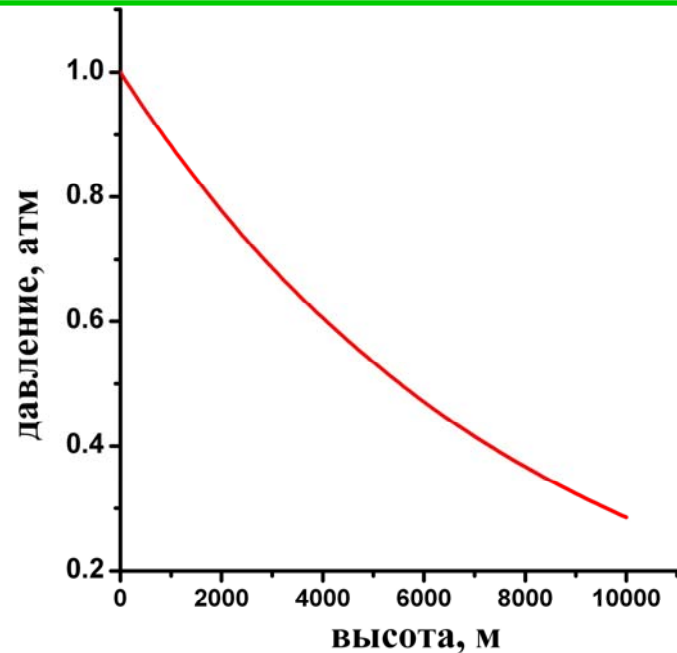
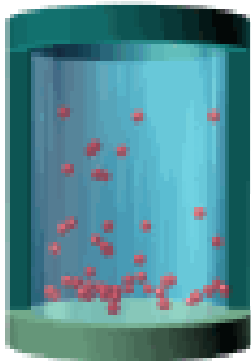
Распределение Больцмана .

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

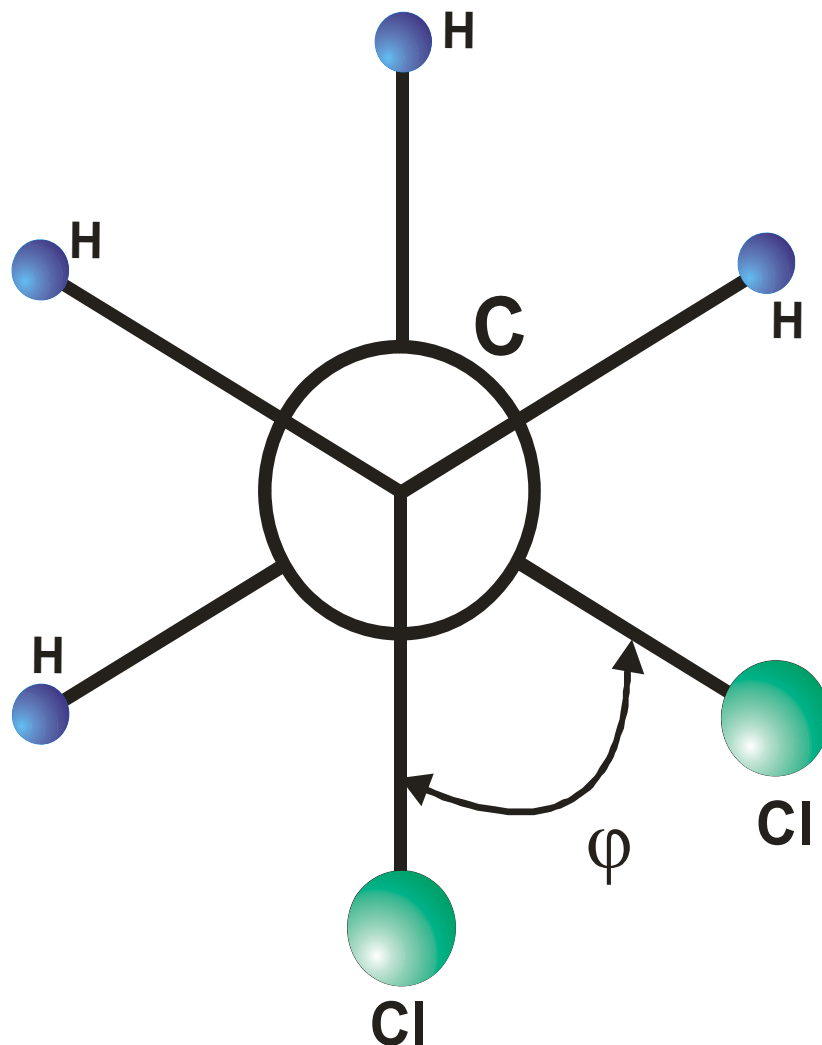
W_i – вероятность найти частицу в состоянии с энергией E_i .

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

