

CAPÍTOL 1

GRAUS DE LLIBERTAT.

Graus de llibertat:

Com tots els aspirants a 1er de carrera, anàvem mig espantats pel que ens poguéss passar; hi havia aquells que havien repetit el curs i ara eren veterans i ens deien que el nivell de batxiller no tenia res a veure amb la facultat, que vam anar allà enganyats i altres ...

També tinc el meu respecte pel llibre que teniu a la vostra disposició, ja que m'agradaria que fos d'ajut als estudiants.

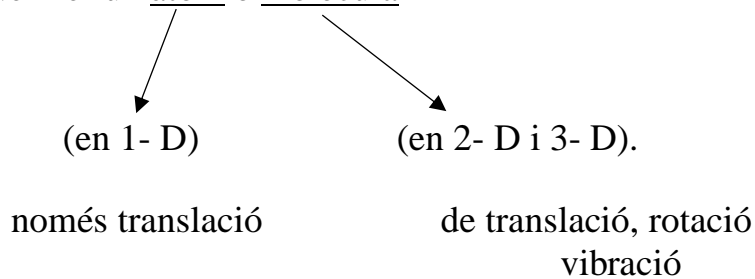
Començaré indicant el codi que s'utilitza en la definició de graus de llibertat (i llavors entendreu a través de l'equació de la teoria cinètica):

Hi ha 3 tipus de graus de llibertat:

1. **Traducció** : (orientacions en l'espai o moviments que poden realitzar) realitzar-se)
2. **Rotació** : (més tard el descriurem com a dibuix: (fig.1)
3. **Vibració**: (més tard el descriu com a dibuixos, com en el cas del CO₂).

Resulta que tenim m / n , on: n és el nombre d'àtoms de la molècula i m el nombre de translacions, rotacions o vibracions que es poden aconseguir (depenent de la molècula) i tot plegat s'anomena graus de llibertat.

És a dir, la translació, la rotació i la vibració són els tres moviments que poden fer un àtom o molècula

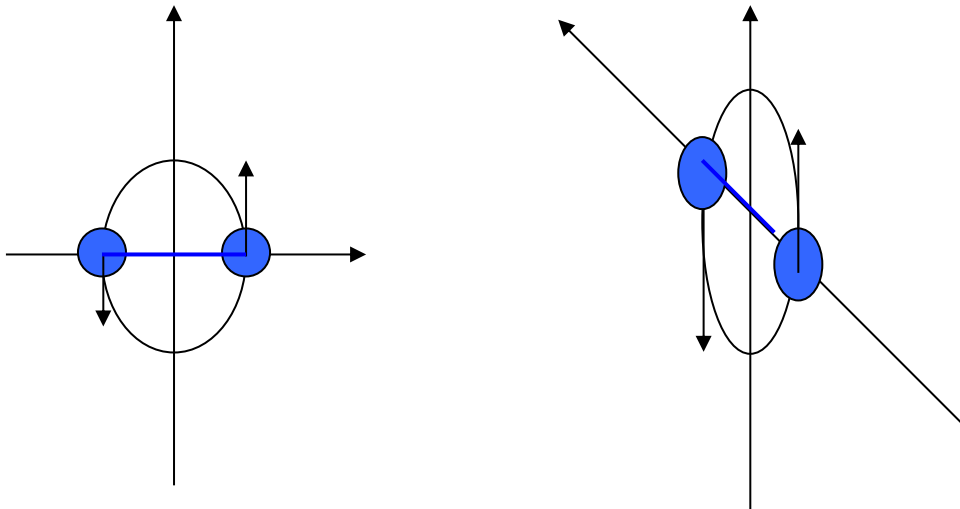


Els graus de llibertat, com explico a la pàgina següent, són contingut al número que apareix aquí: **Ec.Na = (3/2).R. T**

i prenen el nom de graus de llibertat.

En una translació es "gasten" 3 graus de llibertat perquè \exists tres dimensions. En una rotació depèn de si una **molècula** és **lineal** o **no lineal** (En el cas d'una molècula lineal només s'ajusta a dues rotacions en dues dimensions; vegeu la figura 1, mentre que en el cas d'una molècula no lineal hi ha les **3 orientacions** esperades).

Fig. 1:



Mentre que una vibració conté la resta de graus de llibertat.
 L'única E que pot canviar amb el T és l'E translació en **molècules monoatòmiques**. Et, Er, Ev que tenen diferents freqüències i temperatures, llavors:

$\Delta E / \Delta T$ és un tipus de divisió que deixa clar la relació bàsica.
 Coincideix amb Cv o $C_p = 3 / 2R$ en el cas de la transferència i on $1/2 R$ representa la direcció de cada torn; Per entendre millor això, en estudis posteriors, se sap que $C_p - C_v = R$, que no és superflu, assenyalava que $C_p = dH / dt$ i $C_v = dE / dT$. A més, a partir de la relació entre la E obtinguda al capítol 7 Teoria de la cinètica: $N_a \cdot E_c = (3/2) \cdot R \cdot T$
 aclarim que cada $1 / 2R$ correspon a una coordenada

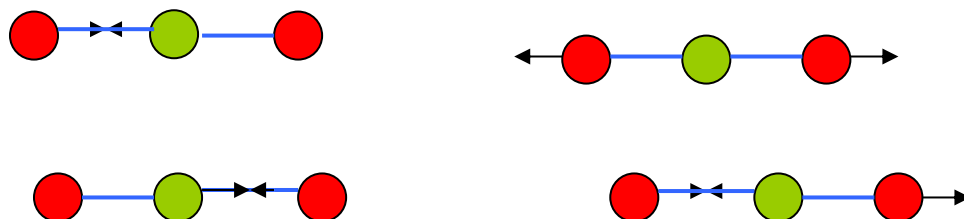
$$C_v = 3 / 2 \cdot R + 2 / 2 \cdot R + 1 / 2 \cdot R$$

se representen a la fig. 1

Aquesta és la contribució de la vibració



un altre exemple fàcil per a calcular directament: CO₂



vol dir que conté 4 modus vibracional (a més del 2 rotatius i el 3 de translació) que, a part de la AB₂ estequiomètrica també pot utilitzar per definir ABC.

Per entendre que totes les molècules tenen "x graus de llibertat" tot i ser **una** experiència **monoatòmica o poliatòmica**, vegeu que el nombre total de descripcions de cada mod (translació, rotació, vibració) s'ajusten al nombre total de graus de llibertat.

L' **espectre de vibracions (per exemple, Raman)** és el que us proporciona la quantitat de línies (o **modus de vibració**) i, per tant, podeu conèixer per intuïció les diferents formes (extensió, tensió, estirament, flexió ...).

Els diferents espectres se superposen i poden obtenir o endevinar quina vibració correspon a cada enllaç (fem un escombrat).