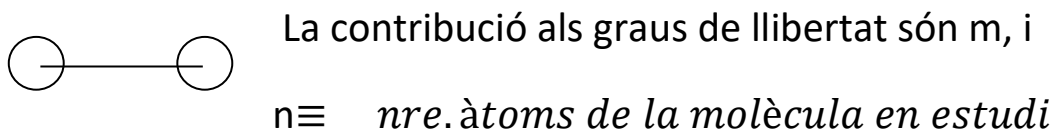


UNA ALTRA MANERA DE SABER LA CONTRIBUCIÓ DE TRANSLACIÓ, ROTACIÓ I VIBRACIÓ EN L'ENERGIA DE LES MOLÈCULES:

Recordeu la teoria cinètica de la matèria i l'equació dels gasos ideals? Doncs, si les combinem obtindrem això:

$F = (N/V) \cdot A \cdot c \cdot t \cdot (1/6) \cdot (1/t) \cdot (-2m \cdot c)$ i $F = P \cdot A$ i $P \cdot V = n \cdot R \cdot T$ i $E_c = m \cdot c^2$ tot això diu que: $N/3 \cdot E_c = n \cdot R \cdot T$, o sigui que: $N \cdot E_c = 3 \cdot R \cdot T$.

Ara, definim la capacitat calorífica com la quantitat de calor que fa falta per augmentar 1°C la quantitat d'un mol de substància, i es representa per \tilde{C}_v . Per tant $\tilde{C}_v = d\tilde{E}/dT = 3 \cdot R$ com sabem, en molècules diatòmiques (com els gasos):

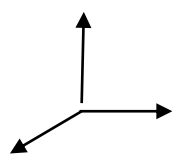
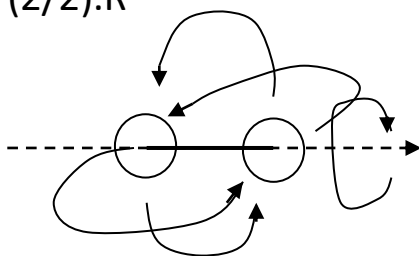


ja que m/n dóna sempre 3, independentment del tipus de molècules que estudiem. Posem exemples:


1 àtom solitari té 3 contribucions a la translació: $3R$, i 0 de rotació i 0 de vibració, lògicament. Aleshores, tenim $3R$.

Molècula diatòmica: 3 contribucions a la translació: $(3/2) \cdot R$, 2 de rotació:

$(2/2) \cdot R$

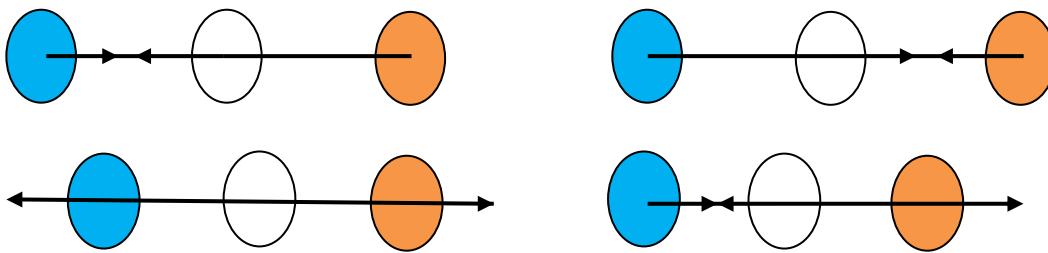


(Dels 3 eixos només en roten 2).

i 1 de vibració:  $(\frac{1}{2}) \cdot R$, que tots sumats donen $3R$.

En el cas d'una molècula AB_2 o ABC , els graus de llibertat corresponents a la vibració seran més amplis:

$3/3R$ de trans. }
 $2/3R$ de rot. } $3R$
 $4/3R$ de vibr. }

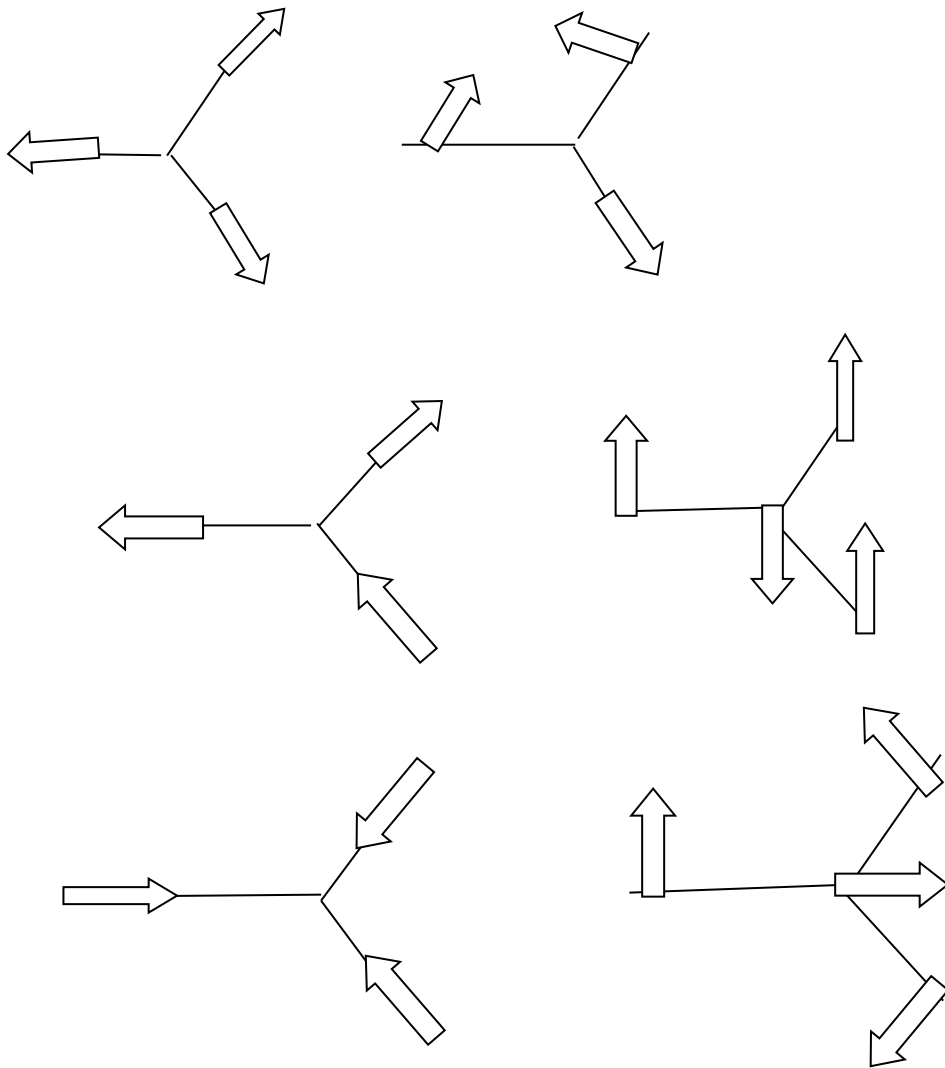


I en el cas d'una molècula de 4 àtoms com ara NO_3^- , la cosa comença a complicar-se:

$3/4R$ trans. }
 $3/4R$ rot. } $3R$
 $6/4R$ vibr. }

Ara sí que la molècula rota

significativament en tots 3 eixos.



Quan tenim una molècula tetragonal pertanyent al grup puntual D_{4h} (XeF₄):

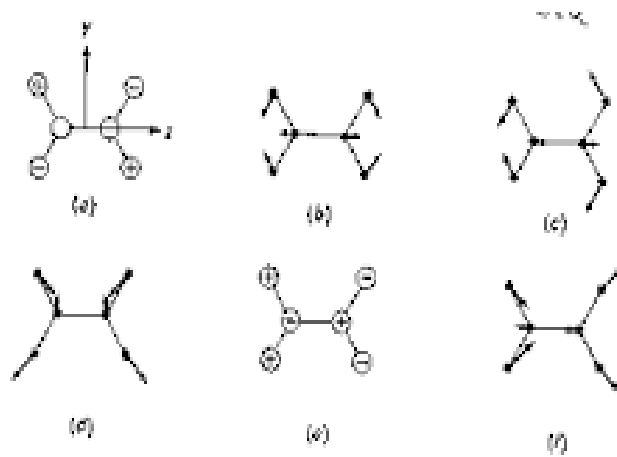
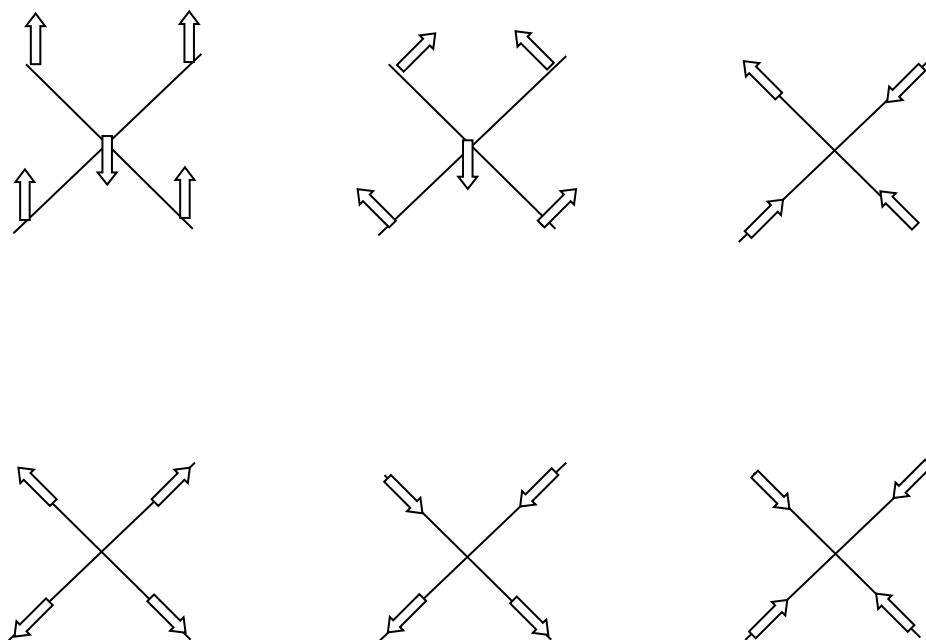
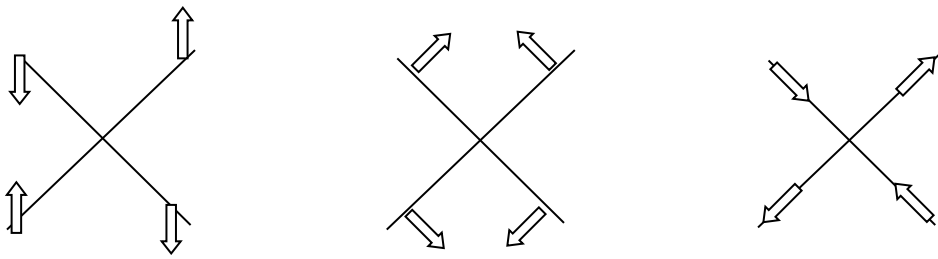


Fig. 6.12 Seis de los doce modos normales del C_2H_2 . El eje x es perpendicular al plano molecular.

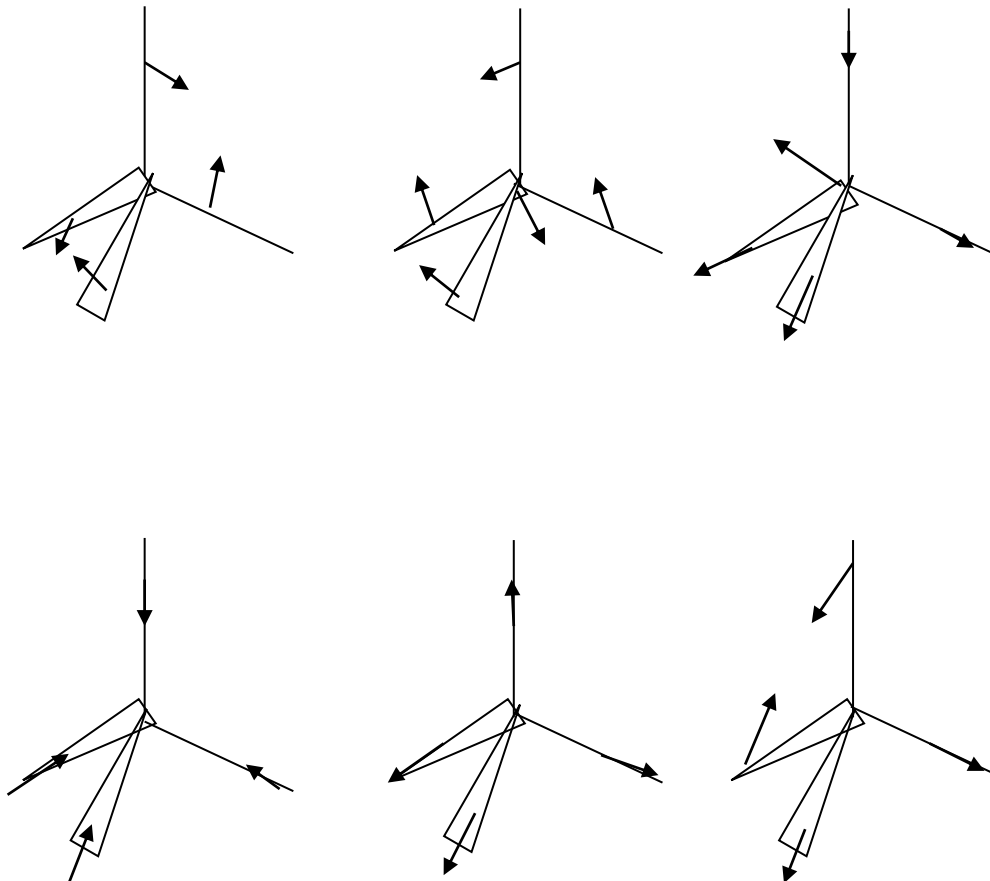
Les trans. i rot. són com sempre, però ara, per tal que la suma total de modus sigui $3R$, les vibr. són $9/5R$:

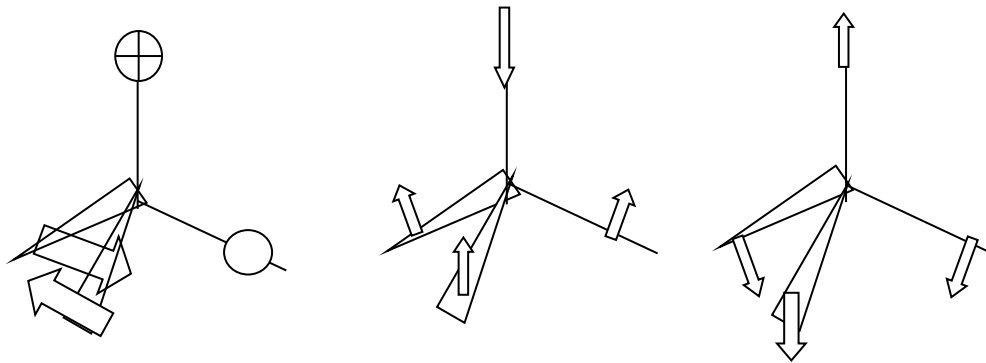




Diverses vegades he pensat en el vertigen: hi ha unes FORCES OCULTES? O una inèrcia amb o sense moviment previ? Només compta la posició.

Tornant als graus de llibertat, ara analitzarem T_d : com que també consta de 5 àtoms i el nre. de modus vibracionals són, igual que en D_{4h} , 9/5R:





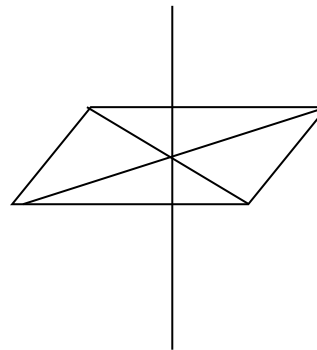
On \oplus vol dir que la fletxa va cap a nosaltres i \circ cap endins.

Si filem prim, es pot complicar més encara:

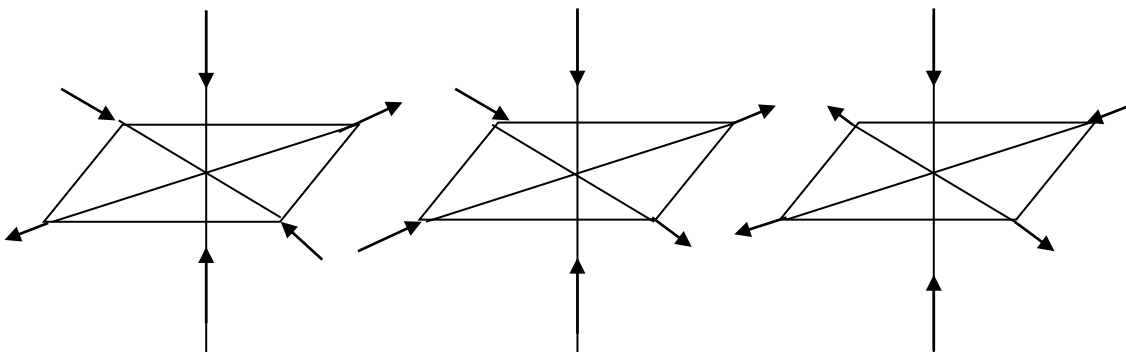
La molècula octaèdrica:

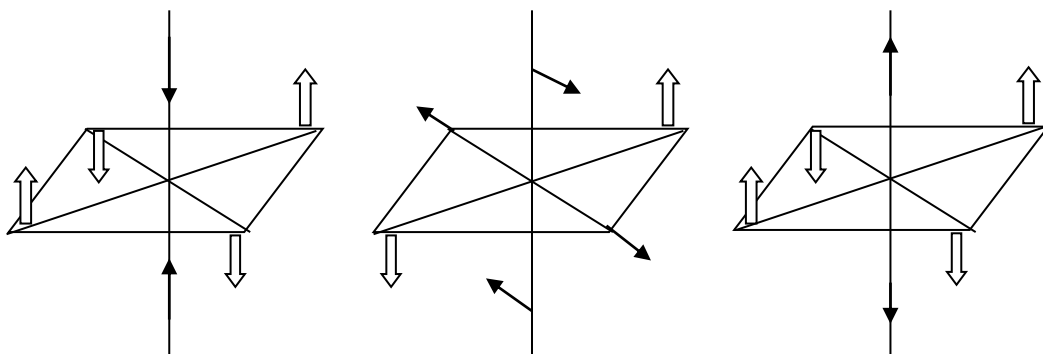
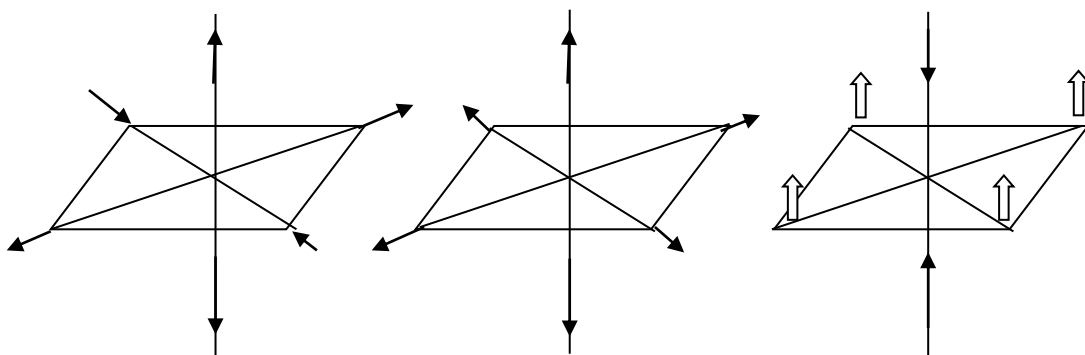
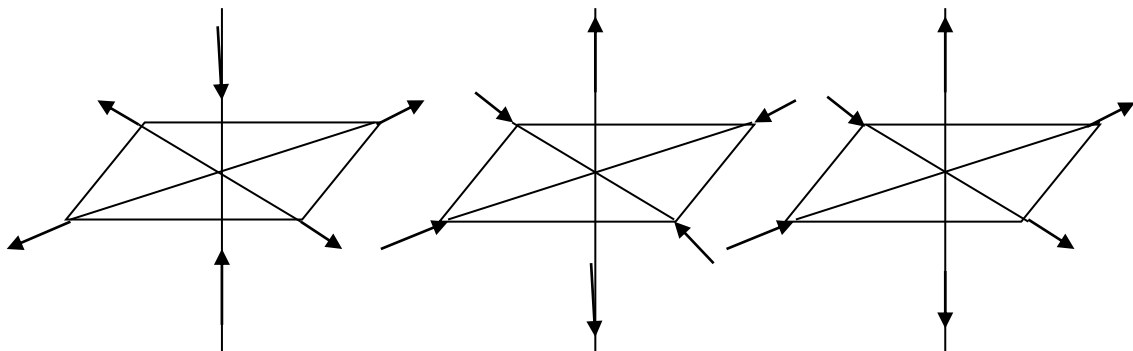
Conté 7 àtoms!

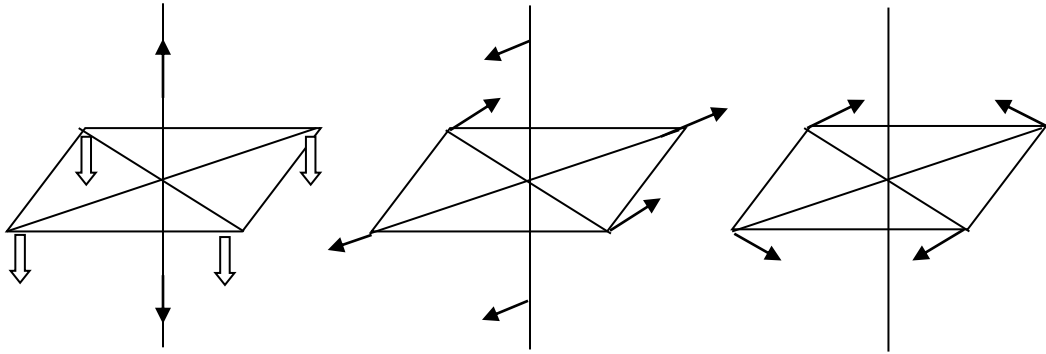
Conté 15 modus vibracionals!



Poden ser els següents:







En l'etilè:

$$n=6, \text{ per tant } (3/6)R+(3/6)R+(12/6)R= 3R$$

aleshores són 12 modus vibracionals:

