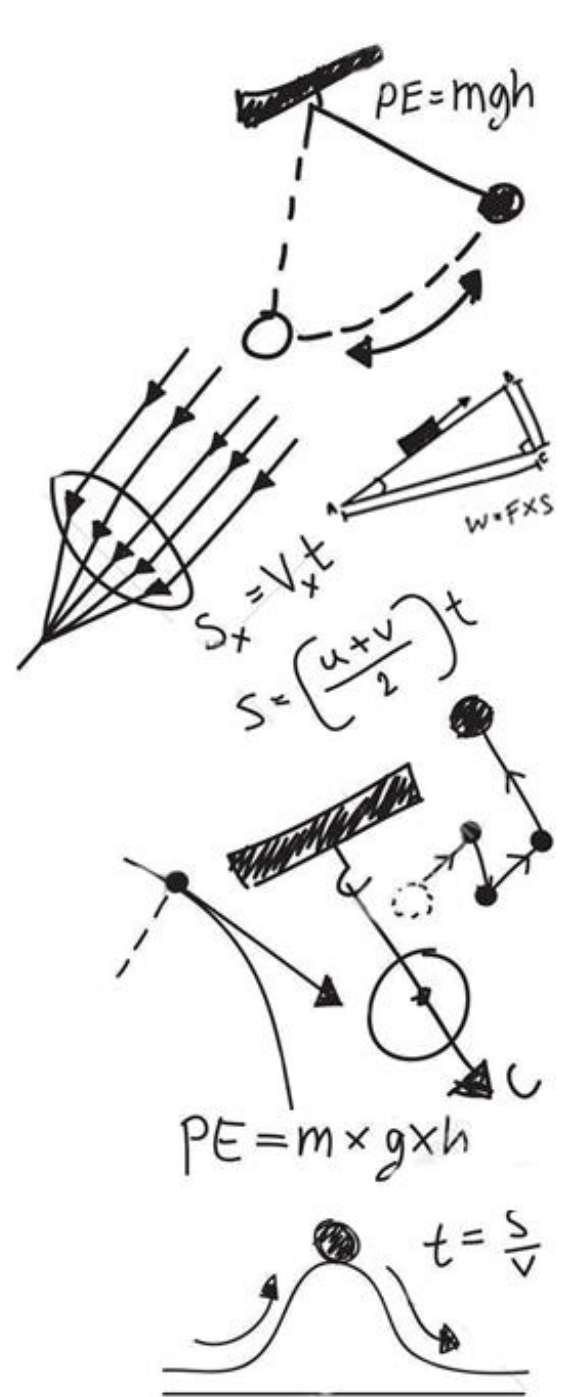


# 分子的自由度





# 自由度

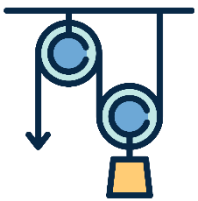
**定义：**决定物体空间位置所需**独立坐标的数目**  
( **最少坐标个数** )。

◆ 对于**质点**来说：

自由质点：3个自由度

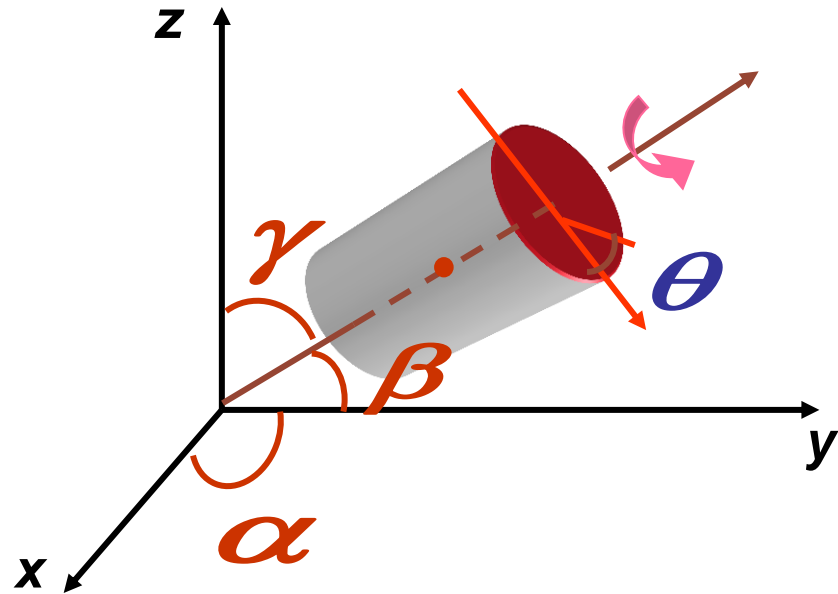
限制在直线或曲线上的质点：1个自由度

限制在平面或曲面上的质点：2个自由度



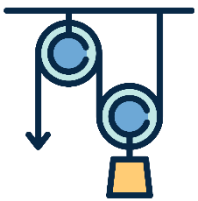
## 对于刚体来说

1. 用三个独立坐标（如  $x, y, z$ ）来表示其上某一点的位置。
2. 用  $(\alpha, \beta, \gamma)$  中的任意两个来表示其转轴的方位。



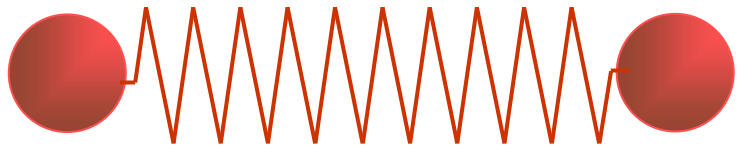
3. 刚体绕轴转动时，需用一个角度  $\theta$  来表示其转过的位置。

故对自由刚体而言，有六个自由度， $(x, y, z, \alpha, \beta, \theta)$   
前三个描述平动，后三个描述转动。



## 对于分子来说

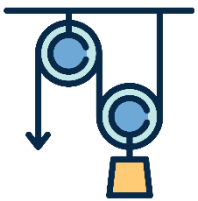
- ◆ 根据分子内包含的原子个数，把分子分为：  
**单原子分子，双原子分子，多原子分子**三种。
- ◆ 常对实际分子作**刚性化假设**。



实际分子模型



刚性分子模型



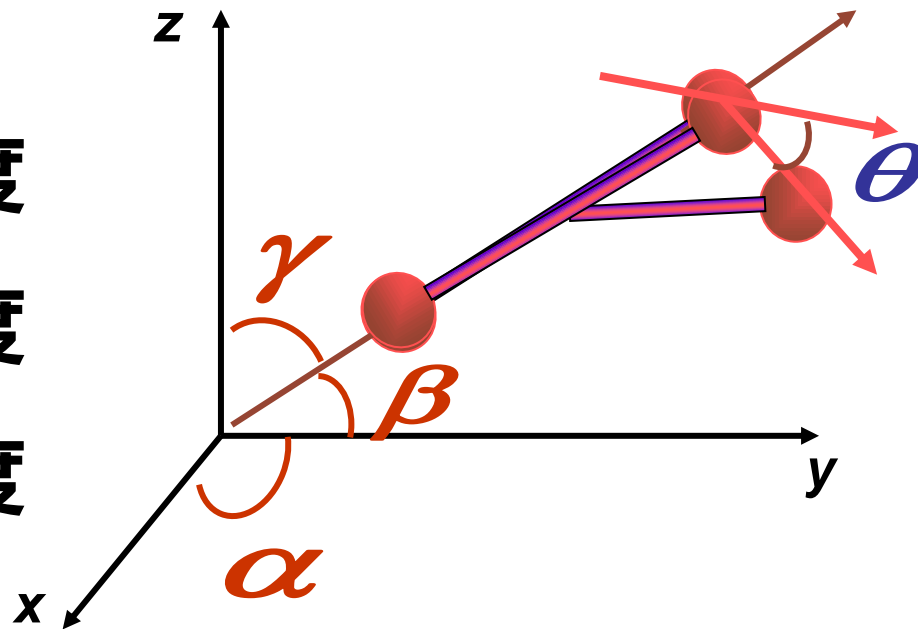
## 对于分子来说

刚性分子

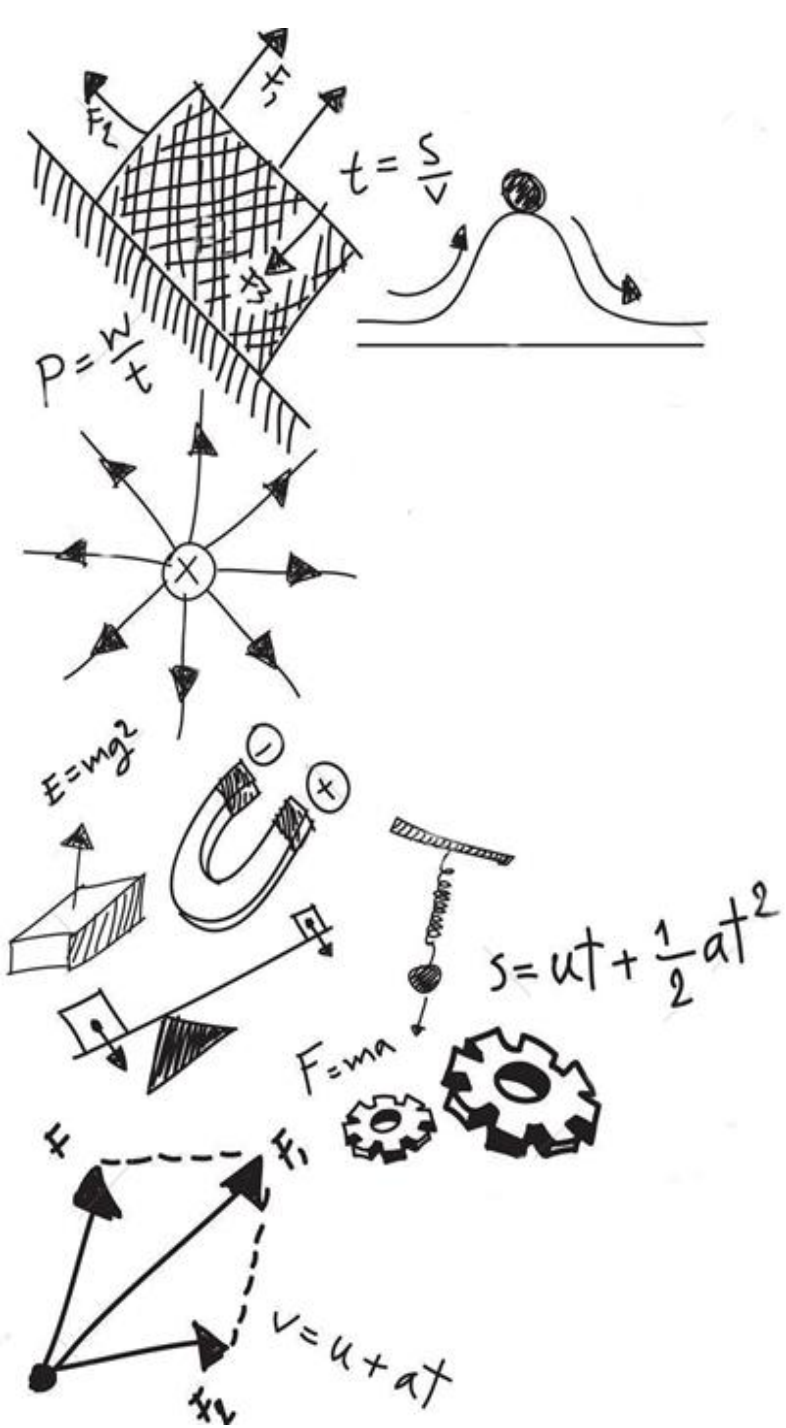
单原子分子：三个自由度

双原子分子：五个自由度

多原子分子：六个自由度



对于非刚性分子，还要考虑振动自由度。



# Thanks!

