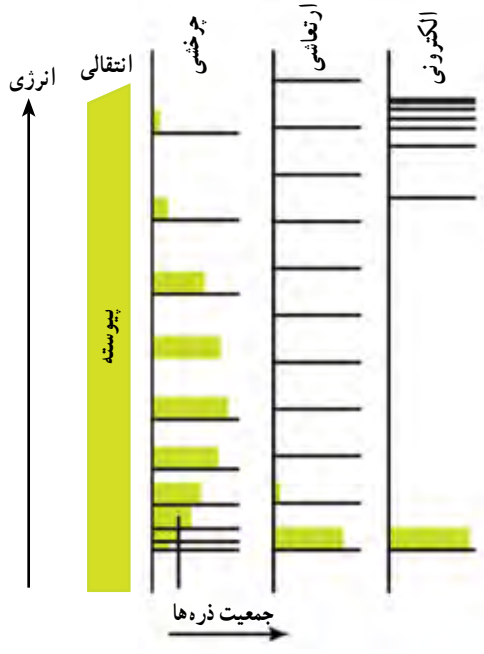
مولکول‌های H_2O در یخ، تنها جنبش‌های ارتعاشی دارند. نکتهٔ شایان توجه این است که در این حالت جنبش‌های ارتعاشی تنها با کم و زیاد شدن طول پیوند هیدروژنی رخ می‌دهد. به دیگر سخن فاصله میان مولکول‌ها کم و زیاد می‌شود و ارتعاش‌های مولکولی نسبت به ارتعاش‌های اتمی (حاصل از کم و زیاد شدن طول پیوند کووالانسی O–H در هر مولکول آب) بیشتر است. زیرا پیوندهای کووالانسی در دمای اتاق و پایین‌تر از آن، ارتعاش‌های قابل توجهی ندارند و تنها در دماهای بالاست که سهم چشمگیری از انرژی‌های ارتعاشی پیوندهای کووالانسی در انرژی گرمایی ماده آشکار می‌شود.

مولکول‌های H_2O در حالت مایع افزون بر جنبش‌های انتقالی و چرخشی درگیرانه (جنبش‌های ارتعاشی پیوندهای کووالانسی سهم چندانی در انرژی گرمایی آب مایع ندارند)، جنبش‌های ارتعاشی مولکولی نیز دارند. این ویژگی‌ها نشان می‌دهد که تنوع شیوه‌های حرکتی در آب مایع بیشتر از یخ است.

مولکول‌های H_2O در حالت بخار، به‌طور عمده دارای جنبش‌های انتقالی و نیز چرخشی‌اند. در حالت بخار نیز جنبش‌های ارتعاشی پیوندهای کووالانسی چندان فعال نیستند. بیشتر بودن تنوع شیوه‌های حرکتی برای مولکول‌های H_2O در حالت مایع، نشان‌دهندهٔ بیشتر بودن ظرفیت گرمایی مولی آن است.

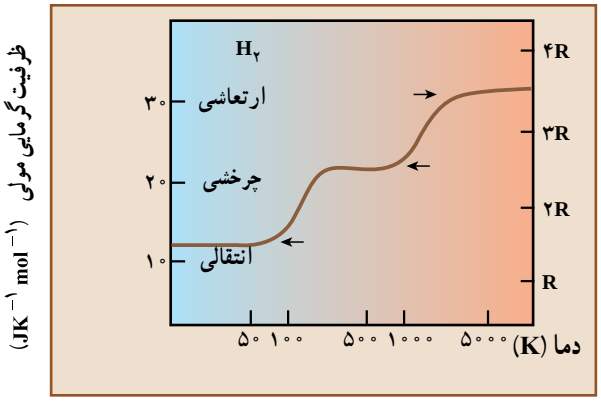
حالت آب	حرکت ارتعاشی	حرکت انتقالی	حرکت چرخشی	حرکت ارتعاشی پیوندهای هیدروژنی
جامد	✓	–	–	✓
بخار	✓	✓	✓	–
مایع	✓	✓	✓	✓

نمودار ۳ میانگین انرژی گرمایی در دسترس ذره‌های سازنده یک ماده را در دمای $300K$ ($27^\circ C$) نشان می‌دهد. در $300K$ پایین‌ترین حالت ارتعاشی (پیوند کووالانسی) و برخی از سطوح چرخشی فعال می‌باشد. بیشترین سهم انرژی گرمایی مربوط به سطوح انتقالی با فاصله واحد ($10^{-17}J$) می‌باشد که در این دما به‌طور کامل اشغال شده است و به صورت یک نوار پیوسته دیده می‌شود.



نمودار ۳ــ فاصلهٔ بین سطوح گوناگون انرژی و سهم هر یک در انرژی گرمایی (توجه کنید فاصله میان سطوح انرژی الکترونی آنقدر زیاد است که می‌توان گفت همه جمعیت آن در حالت پایه است، از این رو سهم ناچیزی در انرژی گرمایی ماده دارد).

در دمای پایین‌تر سهم حرکت‌های انتقالی در حرکت‌های گرمایی بسیار زیاد است و با افزایش دما، سهم حرکت‌های چرخشی و ارتعاشی افزایش می‌یابد. نمودار ۴ این موضوع را به خوبی نشان می‌دهد.



نمودار ۴ــ سهم جنبش گرمایی در ظرفیت گرمایی مولی هیدروژن

می‌دانید یکی از ویژگی‌های غیر عادی آب، بالا بودن ظرفیت گرمایی ویژه و آنتالپی تبخیر آن است. با بررسی نمودار ۵، می‌توان این موضوع را بهتر درک کرد.

نمودار ۵ــ بالا بودن ظرفیت گرمایی ویژه و آنتالپی تبخیر آب

همان‌طور که می‌بینید ۳۳۳J گرما می‌تواند دمای یک گرم آهن را از صفر درجهٔ سلسیوس به ۷۳۸°C افزایش دهد؛ درحالی‌که این مقدار گرما فقط می‌تواند یک گرم یخ صفر درجهٔ سلسیوس را به یک گرم آب صفر درجهٔ سلسیوس تبدیل کند.