

Calculateurs importants de spectroscopie vibrationnelle Formules PDF



**Formules
Exemples
avec unités**

Liste de 21 Calculateurs importants de spectroscopie vibrationnelle Formules

1) Constante d'anharmonicité donnée Deuxième fréquence harmonique Formule ↻

Formule

$$x_e = \frac{1}{4} \cdot \left(1 - \left(\frac{v_{0->3}}{3 \cdot v_{vib}} \right) \right)$$

Exemple avec Unités

$$0.2179 = \frac{1}{4} \cdot \left(1 - \left(\frac{0.50 \text{ Hz}}{3 \cdot 1.3 \text{ Hz}} \right) \right)$$

Évaluer la formule ↻

2) Constante d'anharmonicité donnée Fréquence fondamentale Formule ↻

Formule

$$x_e = \frac{v_0 - v_{0->1}}{2 \cdot v_0}$$

Exemple avec Unités

$$0.4973 = \frac{130 \text{ Hz} - 0.7 \text{ Hz}}{2 \cdot 130 \text{ Hz}}$$

Évaluer la formule ↻

3) Constante d'anharmonicité donnée Première fréquence harmonique Formule ↻

Formule

$$x_e = \frac{1}{3} \cdot \left(1 - \left(\frac{v_{0->2}}{2 \cdot v_{vib}} \right) \right)$$

Exemple avec Unités

$$0.2372 = \frac{1}{3} \cdot \left(1 - \left(\frac{0.75 \text{ Hz}}{2 \cdot 1.3 \text{ Hz}} \right) \right)$$

Évaluer la formule ↻

4) Constante de potentiel anharmonique Formule ↻

Formule

$$\alpha_e = \frac{B_v - B_e}{v + \frac{1}{2}}$$

Exemple avec Unités

$$6 = \frac{35 \text{ 1/m} - 20 \text{ m}^{-1}}{2 + \frac{1}{2}}$$

Évaluer la formule ↻

5) Constante de rotation liée à l'équilibre Formule ↻

Formule

$$B_e = B_v - \left(\alpha_e \cdot \left(v + \frac{1}{2} \right) \right)$$

Exemple avec Unités

$$20 \text{ m}^{-1} = 35 \text{ 1/m} - \left(6 \cdot \left(2 + \frac{1}{2} \right) \right)$$

Évaluer la formule ↻



6) Constante de rotation pour l'état vibratoire Formule ↻

Formule

$$B_v = B_e + \left(\alpha_e \cdot \left(v + \frac{1}{2} \right) \right)$$

Exemple avec Unités

$$35 \text{ 1/m} = 20 \text{ m}^{-1} + \left(6 \cdot \left(2 + \frac{1}{2} \right) \right)$$

Évaluer la formule ↻

7) Degré de liberté total pour les molécules linéaires Formule ↻

Formule

$$Fl = 3 \cdot z$$

Exemple

$$105 = 3 \cdot 35$$

Évaluer la formule ↻

8) Degré de liberté total pour les molécules non linéaires Formule ↻

Formule

$$Fn = 3 \cdot z$$

Exemple

$$105 = 3 \cdot 35$$

Évaluer la formule ↻

9) Degré de liberté vibrationnel pour les molécules linéaires Formule ↻

Formule

$$vibd_l = (3 \cdot z) - 5$$

Exemple

$$100 = (3 \cdot 35) - 5$$

Évaluer la formule ↻

10) Degré de liberté vibrationnel pour les molécules non linéaires Formule ↻

Formule

$$vibd_{nl} = (3 \cdot z) - 6$$

Exemple

$$99 = (3 \cdot 35) - 6$$

Évaluer la formule ↻

11) Deuxième fréquence harmonique Formule ↻

Formule

$$v_{0>3} = (3 \cdot v_{vib}) \cdot (1 - 4 \cdot x_e)$$

Exemple avec Unités

$$0.156 \text{ Hz} = (3 \cdot 1.3 \text{ Hz}) \cdot (1 - 4 \cdot 0.24)$$

Évaluer la formule ↻

12) Fréquence fondamentale des transitions vibratoires Formule ↻

Formule

$$v_{0>1} = v_{vib} \cdot (1 - 2 \cdot x_e)$$

Exemple avec Unités

$$0.676 \text{ Hz} = 1.3 \text{ Hz} \cdot (1 - 2 \cdot 0.24)$$

Évaluer la formule ↻

13) Fréquence vibratoire donnée Deuxième fréquence harmonique Formule ↻

Formule

$$v_{vib} = \frac{v_{0>3}}{3} \cdot (1 - (4 \cdot x_e))$$

Exemple avec Unités

$$0.0067 \text{ Hz} = \frac{0.50 \text{ Hz}}{3} \cdot (1 - (4 \cdot 0.24))$$

Évaluer la formule ↻

14) Fréquence vibratoire donnée Fréquence fondamentale Formule ↻

Formule

$$v_{vib} = \frac{v_{0>1}}{1 - 2 \cdot x_e}$$

Exemple avec Unités

$$1.3462 \text{ Hz} = \frac{0.7 \text{ Hz}}{1 - 2 \cdot 0.24}$$

Évaluer la formule ↻



15) Fréquence vibratoire donnée Première fréquence harmonique Formule ↻

Formule

$$v_{\text{vib}} = \frac{v_{0 \rightarrow 2}}{2} \cdot (1 - 3 \cdot x_e)$$

Exemple avec Unités

$$0.105 \text{ Hz} = \frac{0.75 \text{ Hz}}{2} \cdot (1 - 3 \cdot 0.24)$$

Évaluer la formule ↻

16) Nombre quantique vibrationnel utilisant la constante de rotation Formule ↻

Formule

$$v = \left(\frac{B_v - B_e}{\alpha_e} \right) - \frac{1}{2}$$

Exemple avec Unités

$$2 = \left(\frac{35 \text{ 1/m} - 20 \text{ m}^{-1}}{6} \right) - \frac{1}{2}$$

Évaluer la formule ↻

17) Nombre quantique vibrationnel utilisant la fréquence vibratoire Formule ↻

Formule

$$v = \left(\frac{E_{\text{vf}}}{[\text{hP}] \cdot v_{\text{vib}}} \right) - \frac{1}{2}$$

Exemple avec Unités

$$1.2\text{E}+35 = \left(\frac{100 \text{ J}}{6.6\text{E}-34 \cdot 1.3 \text{ Hz}} \right) - \frac{1}{2}$$

Évaluer la formule ↻

18) Nombre quantique vibrationnel utilisant le nombre d'onde vibratoire Formule ↻

Formule

$$v = \left(\frac{E_{\text{vf}}}{[\text{hP}]} \cdot \omega' \right) - \frac{1}{2}$$

Exemple avec Unités

$$2.3\text{E}+36 = \left(\frac{100 \text{ J}}{6.6\text{E}-34} \cdot 15 \text{ 1/m} \right) - \frac{1}{2}$$

Évaluer la formule ↻

19) Nombre quantique vibratoire maximal Formule ↻

Formule

$$v_{\text{max}} = \left(\frac{\omega'}{2 \cdot x_e \cdot \omega'} \right) - \frac{1}{2}$$

Exemple avec Unités

$$1.5833 = \left(\frac{15 \text{ 1/m}}{2 \cdot 0.24 \cdot 15 \text{ 1/m}} \right) - \frac{1}{2}$$

Évaluer la formule ↻

20) Nombre vibratoire maximal en utilisant la constante d'anharmonicité Formule ↻

Formule

$$v_{\text{max}} = \frac{(\omega')^2}{4 \cdot \omega' \cdot E_{\text{vf}} \cdot x_e}$$

Exemple avec Unités

$$0.1562 = \frac{(15 \text{ 1/m})^2}{4 \cdot 15 \text{ 1/m} \cdot 100 \text{ J} \cdot 0.24}$$

Évaluer la formule ↻

21) Première fréquence harmonique Formule ↻

Formule

$$v_{0 \rightarrow 2} = (2 \cdot v_{\text{vib}}) \cdot (1 - 3 \cdot x_e)$$

Exemple avec Unités

$$0.728 \text{ Hz} = (2 \cdot 1.3 \text{ Hz}) \cdot (1 - 3 \cdot 0.24)$$

Évaluer la formule ↻



Variables utilisées dans la liste de Calculateurs importants de spectroscopie vibrationnelle Formules ci-dessus

- B_e Équilibre constant de rotation (Par mètre)
- B_v Vibration constante de rotation (1 par mètre)
- E_{vf} Énergie vibratoire (Joule)
- Fl Degré de liberté linéaire
- Fn Degré de liberté non linéaire
- v Nombre quantique vibrationnel
- v_0 Fréquence des vibrations (Hertz)
- $v_{0 \rightarrow 1}$ La fréquence fondamentale (Hertz)
- $v_{0 \rightarrow 2}$ Première fréquence harmonique (Hertz)
- $v_{0 \rightarrow 3}$ Deuxième fréquence harmonique (Hertz)
- v_{max} Nombre vibratoire maximum
- v_{vib} Fréquence vibratoire (Hertz)
- $vibd_l$ Degré vibratoire linéaire
- $vibd_{nl}$ Degré vibratoire non linéaire
- x_e Constante d'anharmonicité
- z Nombre d'atomes
- α_e Constante de potentiel anharmonique
- ω' Numéro d'onde vibratoire (1 par mètre)

Constantes, fonctions, mesures utilisées dans la liste des Calculateurs importants de spectroscopie vibrationnelle Formules ci-dessus

- **constante(s):** [hP], 6.626070040E-34
constante de Planck
- **La mesure: Énergie** in Joule (J)
Énergie Conversion d'unité ↻
- **La mesure: Fréquence** in Hertz (Hz)
Fréquence Conversion d'unité ↻
- **La mesure: Numéro de vague** in 1 par mètre
(1/m)
Numéro de vague Conversion d'unité ↻
- **La mesure: Densité atomique linéaire** in Par
mètre (m^{-1})
Densité atomique linéaire Conversion d'unité ↻



- **Important Niveaux d'énergie vibratoire**
Formules 

Essayez nos calculatrices visuelles uniques

-  **Changement en pourcentage** 
-  **PPCM de deux nombres** 
-  **Fraction propre** 

Veuillez PARTAGER ce PDF avec quelqu'un qui en a besoin !

Ce PDF peut être téléchargé dans ces langues

[English](#) [Spanish](#) [French](#) [German](#) [Russian](#) [Italian](#) [Portuguese](#) [Polish](#) [Dutch](#)

7/10/2024 | 3:39:21 AM UTC

