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 🕝

Évaluer la formule (

Évaluer la formule

Évaluer la formule (

Évaluer la formule 🕝

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

Exemple avec Unités

$$x_{e} = \frac{1}{4} \cdot \left(1 \cdot \left(\frac{v_{0->3}}{3 \cdot v_{vib}} \right) \right) \qquad 0.2179 = \frac{1}{4} \cdot \left(1 \cdot \left(\frac{0.50 \, \text{Hz}}{3 \cdot 1.3 \, \text{Hz}} \right) \right)$$

2) Constante d'anharmonicité donnée Fréquence fondamentale Formule 🕝

$$x_{e} = \frac{v_{0} - v_{0->1}}{2 \cdot v_{0}}$$

$$x_{e} = \frac{v_{0} - v_{0\rightarrow 1}}{2 \cdot v_{0}}$$
 $0.4973 = \frac{130 \,\text{Hz} - 0.7 \,\text{Hz}}{2 \cdot 130 \,\text{Hz}}$

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

Formule

$$\mathbf{x}_{e} = \frac{1}{3} \cdot \left(1 - \left(\frac{\mathbf{v}_{0 \text{-}>2}}{2 \cdot \mathbf{v}_{vib}} \right) \right)$$

Exemple avec Unités

$$x_{e} = \frac{1}{3} \cdot \left(1 - \left(\frac{v_{0 \to 2}}{2 \cdot v_{vib}} \right) \right)$$

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

4) Constante de potentiel anharmonique Formule 🕝

$$\alpha_{e} = \frac{B_{v} - B_{e}}{v + \frac{1}{2}}$$

$$\alpha_{e} = \frac{B_{V} - B_{e}}{v + \frac{1}{2}}$$

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

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

Formule

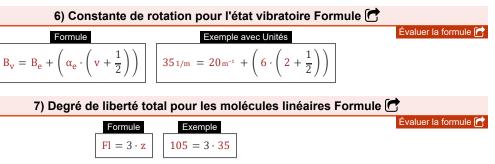
$$= B_{v} - \left(\alpha_{e} \cdot \left(v + \frac{1}{2}\right)\right)$$

Exemple avec Unités

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

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

Évaluer la formule



Évaluer la formule (

Évaluer la formule (

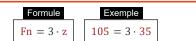
Évaluer la formule (

Évaluer la formule (

Évaluer la formule 🕝

Évaluer la formule 🕝











11) Deuxième fréquence harmonique Formule 🕝

Formule Exemple avec Unités
$$v_{0\text{-}>3} = \left(3 \cdot v_{vib}\right) \cdot \left(1 \cdot 4 \cdot x_e\right) \qquad \boxed{0.156\,\text{Hz} = \left(3 \cdot 1.3\,\text{Hz}\right) \cdot \left(1 \cdot 4 \cdot 0.24\right)}$$

12) Fréquence fondamentale des transitions vibratoires Formule C

Formule Exemple avec Unités
$$v_{0\text{-}>1} = v_{vib} \cdot \left(1 \cdot 2 \cdot x_{e} \right) \quad \boxed{ 0.676 \, \text{Hz} \, = \, 1.3 \, \text{Hz} \, \cdot \left(1 \cdot 2 \cdot 0.24 \, \right) }$$

13) Fréquence vibratoire donnée Deuxième fréquence harmonique Formule 🕝

Formule Exemple avec Unités
$$v_{vib} = \frac{v_{0 -> 3}}{3} \cdot \left(1 - \left(4 \cdot x_e\right)\right) \qquad 0.0067 \, \text{Hz} \, = \frac{0.50 \, \text{Hz}}{3} \cdot \left(1 - \left(4 \cdot 0.24\right)\right)$$



15) Fréquence vibratoire donnée Première fréquence harmonique Formule 🕝

Exemple avec Unités

Évaluer la formule (

Évaluer la formule (

$$v_{vib} = \frac{v_{0\rightarrow 2}}{2} \cdot \left(1 - 3 \cdot x_{e}\right)$$

 $v_{vib} = \frac{v_{0 \to 2}}{2} \cdot \left(\text{ 1 - 3 \cdot x}_e \right) \; \middle| \; \; \middle| \; \; 0.105 \, \text{Hz} \; = \frac{0.75 \, \text{Hz}}{2} \cdot \left(\text{ 1 - 3 \cdot 0.24} \right)$

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

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

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

17) Nombre quantique vibrationnel utilisant la fréquence vibratoire Formule 🕝

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

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

Exemple avec Unités
$$1.2E+35 = \begin{pmatrix} 100 \text{ J} \\ 1.2E+35 \\$$

Évaluer la formule (

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



$$v = \left(\frac{E_{vf}}{[hP]} \cdot \omega'\right) - \frac{1}{2}$$
 2.3E+36 = $\left(\frac{100 \text{ J}}{6.6E-34} \cdot 15 \text{ J/m}\right) - \frac{1}{2}$

19) Nombre quantique vibratoire maximal Formule 🕝

$$\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$v_{\text{max}} = \left(\frac{\omega'}{2 \cdot \mathbf{x} \cdot \omega'}\right) - \frac{1}{2} \qquad 1.5833 = \left(\frac{15 \text{ 1/m}}{2 \cdot 0.24 \cdot 15 \text{ 1/m}}\right) - \frac{1}{2}$$

Évaluer la formule (

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

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

$$v_{max} = \frac{\left(\omega' \right)^2}{4 \cdot \omega' \cdot E_{vf} \cdot x_e} \qquad 0.1562 = \frac{\left(15_{1/m} \right)^2}{4 \cdot 15_{1/m} \cdot 100_{J} \cdot 0.24}$$



21) Première fréquence harmonique Formule 🕝

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

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

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)
- FI Degré de liberté linéaire
- Fn Degré de liberté non linéaire
- V Nombre quantique vibrationnel
- V₀ Fréquence des vibrations (Hertz)
- V_{0->1} La fréquence fondamentale (Hertz)
- V_{0->2} Première fréquence harmonique (Hertz)
- V_{0->3} Deuxième fréquence harmonique (Hertz)
- V_{max} Nombre vibratoire maximum
- V_{vib} Fréquence vibratoire (Hertz)
- vibd | Degré vibratoire linéaire
- vibd_{nl} Degré vibratoire non linéaire
- X 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)



Téléchargez d'autres PDF Important Spectroscopie vibrationnelle

Important Niveaux d'énergie vibratoire
 Formules (†)

Essayez nos calculatrices visuelles uniques

- Management en pourcentage 🕝 🎆 PPCM de deux nombres 🗗
- **37** Fraction propre **C**

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