

Важные калькуляторы колебательной спектроскопии Формулы PDF



Формулы

Примеры

с единицами

Список 21

Важные калькуляторы колебательной спектроскопии Формулы

1) Анггармоническая потенциальная постоянная Формула ↻

Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу ↻

2) Вращательная постоянная для вибрационного состояния Формула ↻

Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу ↻

3) Колебательная степень свободы для линейных молекул Формула ↻

Формула

$$\text{vibd}_l = (3 \cdot z) - 5$$

Пример

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

Оценить формулу ↻

4) Колебательная степень свободы для нелинейных молекул Формула ↻

Формула

$$\text{vibd}_{nl} = (3 \cdot z) - 6$$

Пример

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

Оценить формулу ↻

5) Колебательное квантовое число с использованием вибрационного волнового числа Формула ↻

Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу ↻



6) Колебательное квантовое число с использованием вибрационной частоты Формула



Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу

7) Колебательное квантовое число с использованием постоянной вращения Формула



Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу

8) Константа ангармонизма при заданной основной частоте Формула



Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу

9) Константа ангармонизма с учетом частоты второго обертона Формула



Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу

10) Константа ангармонизма с учетом частоты первого обертона Формула



Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу

11) Максимальное вибрационное квантовое число Формула



Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу

12) Максимальное вибрационное число с использованием константы ангармонизма Формула



Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу



13) Основная частота вибрационных переходов Формула ↻

Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу ↻

14) Полная степень свободы для линейных молекул Формула ↻

Формула

$$F_l = 3 \cdot z$$

Пример

$$105 = 3 \cdot 35$$

Оценить формулу ↻

15) Полная степень свободы для нелинейных молекул Формула ↻

Формула

$$F_n = 3 \cdot z$$

Пример

$$105 = 3 \cdot 35$$

Оценить формулу ↻

16) Постоянная вращения, связанная с равновесием Формула ↻

Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу ↻

17) Частота вибрации при заданной основной частоте Формула ↻

Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу ↻

18) Частота вибрации с учетом частоты второго обертона Формула ↻

Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу ↻

19) Частота вибрации с учетом частоты первого обертона Формула ↻

Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу ↻

20) Частота второго обертона Формула ↻

Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу ↻



Формула

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

Пример с Единицы

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

Оценить формулу 



Переменные, используемые в списке Важные калькуляторы колебательной спектроскопии

Формулы выше

- B_e Вращательное постоянное равновесие (за метр)
- B_v Вращательная постоянная вибрация (1 на метр)
- E_{vf} Вибрационная энергия (Джоуль)
- F_l Линейная степень свободы
- F_n Степень свободы Нелинейная
- v Колебательное квантовое число
- v_0 Частота вибрации (Герц)
- $v_{0 \rightarrow 1}$ Основная частота (Герц)
- $v_{0 \rightarrow 2}$ Частота первого обертона (Герц)
- $v_{0 \rightarrow 3}$ Частота второго обертона (Герц)
- v_{max} Максимальное вибрационное число
- v_{vib} Частота вибрации (Герц)
- vib_d Линейная степень вибрации
- vib_{nl} Степень вибрации Нелинейная
- x_e Константа ангармонизма
- z Количество атомов
- α_e Ангармоническая потенциальная постоянная
- ω' Колебательное волновое число (1 на метр)

Константы, функции и измерения, используемые в списке Важные калькуляторы колебательной спектроскопии

Формулы выше

- константа(ы): $[hP]$, 6.626070040E-34
Постоянная Планка
- Измерение: Энергия in Джоуль (J)
Энергия Преобразование единиц измерения 
- Измерение: Частота in Герц (Hz)
Частота Преобразование единиц измерения 
- Измерение: Волновое число in 1 на метр (1/m)
Волновое число Преобразование единиц измерения 
- Измерение: Линейная атомная плотность in за метр (m^{-1})
Линейная атомная плотность Преобразование единиц измерения 



- Важный Уровни вибрационной энергии Формулы 

Попробуйте наши уникальные визуальные калькуляторы

-  Процентное изменение 
-  НОК двух чисел 
-  Правильная дробь 

Пожалуйста, ПОДЕЛИТЕСЬ этим PDF-файлом с теми, кому он нужен!

Этот PDF-файл можно скачать на этих языках

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

7/10/2024 | 3:39:33 AM UTC

