

# Ważne kalkulatory spektroskopii wibracyjnej Formuły PDF



**Formuły**  
**Przykłady**  
**z Jednostkami**

## Lista 21

Ważne kalkulatory spektroskopii wibracyjnej Formuły

### 1) Anharmoniczna Stała Potencjału Formuła ↻

Formuła

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

Przykład z Jednostki

$$6 = \frac{351/m - 20m^{-1}}{2 + \frac{1}{2}}$$

Oceń formułę ↻

### 2) Całkowity stopień swobody dla cząsteczek liniowych Formuła ↻

Formuła

$$F_l = 3 \cdot z$$

Przykład

$$105 = 3 \cdot 35$$

Oceń formułę ↻

### 3) Całkowity stopień swobody dla cząsteczek nieliniowych Formuła ↻

Formuła

$$F_n = 3 \cdot z$$

Przykład

$$105 = 3 \cdot 35$$

Oceń formułę ↻

### 4) Częstotliwość wibracji przy danej częstotliwości podstawowej Formuła ↻

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę ↻

### 5) Częstotliwość wibracji przy podanej drugiej częstotliwości nadtonowej Formuła ↻

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę ↻

### 6) Częstotliwość wibracji przy podanej pierwszej częstotliwości nadtonowej Formuła ↻

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę ↻



## 7) Druga częstotliwość nadtonów Formuła

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę 

## 8) Maksymalna liczba drgań przy użyciu stałej anharmoniczności Formuła

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę 

## 9) Maksymalna wibracyjna liczba kwantowa Formuła

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę 

## 10) Pierwsza częstotliwość nadtonowa Formuła

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę 

## 11) Podstawowa częstotliwość przejść wibracyjnych Formuła

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę 

## 12) Stała anharmoniczności dla drugiej częstotliwości nadtonowej Formuła

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę 

## 13) Stała anharmoniczności dla pierwszej częstotliwości nadtonowej Formuła

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę 

## 14) Stała anharmoniczności przy danej częstotliwości podstawowej Formuła

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę 



## 15) Stała obrotowa dla stanu wibracyjnego Formuła ↻

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę ↻

## 16) Stała obrotowa związana z równowagą Formuła ↻

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę ↻

## 17) Wibracyjna liczba kwantowa przy użyciu stałej obrotowej Formuła ↻

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę ↻

## 18) Wibracyjna liczba kwantowa przy użyciu wibracyjnej liczby falowej Formuła ↻

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę ↻

## 19) Wibracyjna liczba kwantowa z wykorzystaniem częstotliwości drgań Formuła ↻

Formuła

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

Przykład z Jednostki

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

Oceń formułę ↻

## 20) Wibracyjny stopień swobody cząsteczek liniowych Formuła ↻

Formuła

$$\text{vib}_{d_l} = (3 \cdot z) - 5$$

Przykład

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

Oceń formułę ↻

## 21) Wibracyjny stopień swobody cząsteczek nieliniowych Formuła ↻

Formuła

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

Przykład

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

Oceń formułę ↻




## Zmienne użyte na liście Ważne kalkulatory spektroskopii wibracyjnej Formuły powyżej

- $B_e$  Stała równowaga rotacyjna (Na metr)
- $B_v$  Stała wibracja rotacyjna (1 na metr)
- $E_{vf}$  Energia wibracyjna (Dżul)
- $F_l$  Liniowy stopień swobody
- $F_n$  Stopień swobody nieliniowy
- $v$  Wibracyjna liczba kwantowa
- $\nu_0$  Częstotliwość wibracji (Herc)
- $\nu_{0 \rightarrow 1}$  Podstawowa częstotliwość (Herc)
- $\nu_{0 \rightarrow 2}$  Pierwsza częstotliwość alikwotu (Herc)
- $\nu_{0 \rightarrow 3}$  Druga częstotliwość alikwotu (Herc)
- $\nu_{max}$  Maksymalna liczba wibracji
- $\nu_{vib}$  Częstotliwość wibracji (Herc)
- $\nu_{bd_l}$  Liniowy stopień wibracyjny
- $\nu_{bd_{nl}}$  Nieliniowy stopień wibracji
- $x_e$  Stała anharmonii
- $Z$  Liczba atomów
- $\alpha_e$  Stała potencjału anharmonicznego
- $\omega'$  Liczba fal wibracyjnych (1 na metr)



## Stałe, funkcje, miary użyte na liście Ważne kalkulatory spektroskopii wibracyjnej Formuły powyżej

- stała(e): [hP], 6.626070040E-34  
Stała Plancka
- Pomiar: Energia in Dżul (J)  
Energia Konwersja jednostek ↻
- Pomiar: Częstotliwość in Herc (Hz)  
Częstotliwość Konwersja jednostek ↻
- Pomiar: Numer fali in 1 na metr (1/m)  
Numer fali Konwersja jednostek ↻
- Pomiar: Liniowa gęstość atomowa in Na metr (m<sup>-1</sup>)  
Liniowa gęstość atomowa Konwersja jednostek ↻



- **Ważny Poziomy energii wibracyjnej**  
Formuły 

Wypróbuj nasze unikalne kalkulatory wizualne

-  Procentowej zmiany 
-  NWW dwóch liczb 
-  Ułamek właściwy 

UDOSTĘPNIJ ten plik PDF komuś, kto go potrzebuje!

Ten plik PDF można pobrać w tych językach

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

7/10/2024 | 3:39:52 AM UTC

