

Importanti calcolatori della spettroscopia vibrazionale

Formule PDF



Formule
Esempi
con unità

Lista di 21
Importanti calcolatori della spettroscopia
vibrazionale Formule

1) Costante di anarmonicità data la frequenza del primo armonico Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula

2) Costante di anarmonicità data la frequenza del secondo armonico Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula

3) Costante di anarmonicità data la frequenza fondamentale Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula

4) Costante di rotazione correlata all'equilibrio Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula

5) Costante di rotazione per lo stato vibrazionale Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula



6) Costante potenziale anarmonica Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula 

7) Frequenza di vibrazione data la prima frequenza di intonazione Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula 

8) Frequenza di vibrazione data la seconda frequenza di armonico Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula 

9) Frequenza fondamentale delle transizioni vibrazionali Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula 

10) Frequenza vibrazionale data Frequenza fondamentale Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula 

11) Grado di libertà totale per molecole lineari Formula

Formula

$$Fl = 3 \cdot z$$

Esempio

$$105 = 3 \cdot 35$$

Valutare la formula 

12) Grado di libertà totale per molecole non lineari Formula

Formula

$$Fn = 3 \cdot z$$

Esempio

$$105 = 3 \cdot 35$$

Valutare la formula 

13) Grado di libertà vibrazionale per molecole lineari Formula

Formula

$$\text{vibd}_1 = (3 \cdot z) - 5$$

Esempio

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

Valutare la formula 



14) Grado di libertà vibrazionale per molecole non lineari Formula

Formula

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

Esempio

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

Valutare la formula 

15) Numero massimo di vibrazioni utilizzando la costante di anarmonicità Formula

Formula

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

Esempio con Unità

$$0.1562 = \frac{(151/m)^2}{4 \cdot 151/m \cdot 100J \cdot 0.24}$$

Valutare la formula 

16) Numero Quantico Vibrazionale Massimo Formula

Formula

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

Esempio con Unità

$$1.5833 = \left(\frac{151/m}{2 \cdot 0.24 \cdot 151/m} \right) - \frac{1}{2}$$

Valutare la formula 

17) Numero quantico vibrazionale usando il numero d'onda vibrazionale Formula

Formula

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

Esempio con Unità

$$2.3E+36 = \left(\frac{100J}{6.6E-34} \cdot 151/m \right) - \frac{1}{2}$$

Valutare la formula 

18) Numero quantico vibrazionale usando la costante di rotazione Formula

Formula

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

Esempio con Unità

$$2 = \left(\frac{351/m - 20m^{-1}}{6} \right) - \frac{1}{2}$$

Valutare la formula 

19) Numero quantico vibrazionale usando la frequenza vibrazionale Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula 

20) Prima frequenza di intonazione Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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

Valutare la formula 



21) Seconda frequenza di armonico Formula

Formula

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

Esempio con Unità

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





Valutare la formula 



Variabili utilizzate nell'elenco di Importanti calcolatori della spettroscopia vibrazionale Formule sopra

- B_e Equilibrio costante rotazionale (Al metro)
- B_v Costante di rotazione vib (1 al metro)
- E_{vf} Energia vibrazionale (Joule)
- Fl Grado di libertà lineare
- F_n Grado di libertà non lineare
- v Numero quantico vibrazionale
- v_0 Frequenza di vibrazione (Hertz)
- $v_{0 \rightarrow 1}$ Frequenza fondamentale (Hertz)
- $v_{0 \rightarrow 2}$ Prima frequenza armonica (Hertz)
- $v_{0 \rightarrow 3}$ Seconda frequenza armonica (Hertz)
- v_{max} Numero vibrazionale massimo
- v_{vib} Frequenza vibrazionale (Hertz)
- vib_d_l Grado vibrazionale lineare
- $vib_{d_{nl}}$ Grado vibrazionale non lineare
- x_e Costante di anarmonicità
- Z Numero di atomi
- α_e Costante di potenziale anarmonico
- ω' Numero d'onda vibrazionale (1 al metro)

Costanti, funzioni, misure utilizzate nell'elenco di Importanti calcolatori della spettroscopia vibrazionale Formule sopra

- **costante(i):** [hP], 6.626070040E-34
Costante di Planck
- **Misurazione: Energia** in Joule (J)
Energia Conversione di unità 
- **Misurazione: Frequenza** in Hertz (Hz)
Frequenza Conversione di unità 
- **Misurazione: Numero d'onda** in 1 al metro (1/m)
Numero d'onda Conversione di unità 
- **Misurazione: Densità Atomica Lineare** in Al
metro (m^{-1})
Densità Atomica Lineare Conversione di unità 



- **Importante Livelli di energia vibrazionale Formule** 

Prova i nostri calcolatori visivi unici

-  **Variazione percentuale** 
-  **MCM di due numeri** 
-  **Frazione propria** 

Per favore **CONDIVIDI** questo PDF con qualcuno che ne ha bisogno!

Questo PDF può essere scaricato in queste lingue

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

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

