



calculatoratoz.com



unitsconverters.com

Calculateurs importants de spectroscopie vibrationnelle

Formules

calculatrices !

Exemples!

conversions !

Signet calculatoratoz.com, unitsconverters.com

Couverture la plus large des calculatrices et croissantes - **30 000+ calculatrices !**

Calculer avec une unité différente pour chaque variable - **Dans la conversion d'unité intégrée !**

La plus large collection de mesures et d'unités - **250+ Mesures !**



N'hésitez pas à PARTAGER ce document avec vos amis
!

[Veuillez laisser vos commentaires ici...](#)



Liste de 21 Calculateurs importants de spectroscopie vibrationnelle Formules

Calculateurs importants de spectroscopie vibrationnelle

1) Constante d'anharmonicité donnée Deuxième fréquence harmonique

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

Ouvrir la calculatrice 

$$ex \quad 0.217949 = \frac{1}{4} \cdot \left(1 - \left(\frac{0.50Hz}{3 \cdot 1.3Hz} \right) \right)$$

2) Constante d'anharmonicité donnée Fréquence fondamentale

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

Ouvrir la calculatrice 

$$ex \quad 0.497308 = \frac{130Hz - 0.7Hz}{2 \cdot 130Hz}$$

3) Constante d'anharmonicité donnée Première fréquence harmonique

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

Ouvrir la calculatrice 

$$ex \quad 0.237179 = \frac{1}{3} \cdot \left(1 - \left(\frac{0.75Hz}{2 \cdot 1.3Hz} \right) \right)$$



4) Constante de potentiel anharmonique 

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

Ouvrir la calculatrice 


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

5) Constante de rotation liée à l'équilibre 


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

Ouvrir la calculatrice 


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

6) Constante de rotation pour l'état vibratoire 

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

Ouvrir la calculatrice 

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

7) Degré de liberté total pour les molécules linéaires 

$$fx \quad Fl = 3 \cdot z$$

Ouvrir la calculatrice 

$$ex \quad 105 = 3 \cdot 35$$



8) Degré de liberté total pour les molécules non linéaires 

$$fx \quad F_n = 3 \cdot z$$

[Ouvrir la calculatrice !\[\]\(e2376d476d06eb31946dc01a69a4403a_img.jpg\)](#)

$$ex \quad 105 = 3 \cdot 35$$

9) Degré de liberté vibrationnel pour les molécules linéaires 

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

[Ouvrir la calculatrice !\[\]\(0b5e7e25e8775f7e7e80906ada4f0021_img.jpg\)](#)


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

10) Degré de liberté vibrationnel pour les molécules non linéaires 

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

[Ouvrir la calculatrice !\[\]\(bd3b31712ad9bab5a241210fa6925cdd_img.jpg\)](#)

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

11) Deuxième fréquence harmonique 

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

[Ouvrir la calculatrice !\[\]\(7bc43b319a082987e20f7bf78f4bab80_img.jpg\)](#)

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

12) Fréquence fondamentale des transitions vibratoires 

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

[Ouvrir la calculatrice !\[\]\(4a7b4ce770af8456e11a71f9565c8c2b_img.jpg\)](#)

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



13) Fréquence vibratoire donnée Deuxième fréquence harmonique 

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

Ouvrir la calculatrice 

$$ex \quad 0.006667\text{Hz} = \frac{0.50\text{Hz}}{3} \cdot (1 - (4 \cdot 0.24))$$

14) Fréquence vibratoire donnée Fréquence fondamentale 

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

Ouvrir la calculatrice 

$$ex \quad 1.346154\text{Hz} = \frac{0.7\text{Hz}}{1 - 2 \cdot 0.24}$$

15) Fréquence vibratoire donnée Première fréquence harmonique 

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

Ouvrir la calculatrice 

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

16) Nombre quantique vibrationnel utilisant la constante de rotation 

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

Ouvrir la calculatrice 

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



17) Nombre quantique vibrationnel utilisant la fréquence vibratoire 

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

Ouvrir la calculatrice 


$$ex \quad 1.2E^{35} = \left(\frac{100J}{[hP] \cdot 1.3Hz} \right) - \frac{1}{2}$$

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

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

Ouvrir la calculatrice 

$$ex \quad 2.3E^{36} = \left(\frac{100J}{[hP]} \cdot 15/m \right) - \frac{1}{2}$$

19) Nombre quantique vibratoire maximal 

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

Ouvrir la calculatrice 

$$ex \quad 1.583333 = \left(\frac{15/m}{2 \cdot 0.24 \cdot 15/m} \right) - \frac{1}{2}$$



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



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

Ouvrir la calculatrice

$$ex \quad 0.15625 = \frac{(15/m)^2}{4 \cdot 15/m \cdot 100J \cdot 0.24}$$

21) Première fréquence harmonique

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

Ouvrir la calculatrice

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







Variables utilisées

- 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
- ν_0 Fréquence des vibrations (*Hertz*)
- $\nu_{0 \rightarrow 1}$ La fréquence fondamentale (*Hertz*)
- $\nu_{0 \rightarrow 2}$ Première fréquence harmonique (*Hertz*)
- $\nu_{0 \rightarrow 3}$ Deuxième fréquence harmonique (*Hertz*)
- ν_{max} Nombre vibratoire maximum
- ν_{vib} Fréquence vibratoire (*Hertz*)
- $\nu_{vib,l}$ Degré vibratoire linéaire
- $\nu_{vib,nl}$ 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

- **Constante:** [**hP**], 6.626070040E-34 Kilogram Meter² / Second
Planck constant
- **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 



Vérifier d'autres listes de formules

- [Calculeurs importants de spectroscopie vibrationnelle Formules](#) 
- [Niveaux d'énergie vibratoire Formules](#) 

N'hésitez pas à PARTAGER ce document avec vos amis !

PDF Disponible en

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

9/24/2023 | 4:45:13 AM UTC

[Veuillez laisser vos commentaires ici...](#)

