



calculatoratoz.com



unitsconverters.com

Важные калькуляторы колебательной спектроскопии Формулы

Калькуляторы!

Примеры!

Преобразования!

Закладка calculatoratoz.com, unitsconverters.com

Самый широкий охват калькуляторов и рост - **30 000+ калькуляторов!**

Расчет с разными единицами измерения для каждой переменной -

Встроенное преобразование единиц измерения!

Самая широкая коллекция измерений и единиц измерения - **250+**

измерений!



Не стесняйтесь **ПОДЕЛИТЬСЯ** этим документом с друзьями!

[Пожалуйста, оставьте свой отзыв здесь...](#)



Список 21 Важные калькуляторы колебательной спектроскопии Формулы

Важные калькуляторы колебательной спектроскопии

1) Ангармоническая потенциальная постоянная

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

Открыть калькулятор 

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

2) Вращательная постоянная для вибрационного состояния

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

Открыть калькулятор 

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


3) Колебательная степень свободы для линейных молекул

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

Открыть калькулятор 

$$\text{ex } 100 = (3 \cdot 35) - 5$$




4) Колебательная степень свободы для нелинейных молекул 

$$fx \quad vibd_{nl} = (3 \cdot z) - 6$$

Открыть калькулятор 


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

5) Колебательное квантовое число с использованием вибрационного волнового числа 

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

Открыть калькулятор 

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

6) Колебательное квантовое число с использованием вибрационной частоты 

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

Открыть калькулятор 

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



7) Колебательное квантовое число с использованием постоянной вращения

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

[Открыть калькулятор !\[\]\(e2376d476d06eb31946dc01a69a4403a_img.jpg\)](#)

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

8) Константа ангармонизма при заданной основной частоте

$$\text{fx } x_e = \frac{\nu_0 - \nu_{0 \rightarrow 1}}{2 \cdot \nu_0}$$

[Открыть калькулятор !\[\]\(0b5e7e25e8775f7e7e80906ada4f0021_img.jpg\)](#)

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

9) Константа ангармонизма с учетом частоты второго обертона

$$\text{fx } x_e = \frac{1}{4} \cdot \left(1 - \left(\frac{\nu_{0 \rightarrow 3}}{3 \cdot \nu_{\text{vib}}} \right) \right)$$

[Открыть калькулятор !\[\]\(bd3b31712ad9bab5a241210fa6925cdd_img.jpg\)](#)

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



10) Константа ангармонизма с учетом частоты первого обертона

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

[Открыть калькулятор !\[\]\(d3fb9f94af8b26d1c844efa9a98805b0_img.jpg\)](#)

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

11) Максимальное вибрационное квантовое число

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

[Открыть калькулятор !\[\]\(e1d6102fe77919492c04879c8450f1f5_img.jpg\)](#)

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

12) Максимальное вибрационное число с использованием константы ангармонизма

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

[Открыть калькулятор !\[\]\(ab4e2b3fc7e7887b7a72f548aa6f5e60_img.jpg\)](#)

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


13) Основная частота вибрационных переходов

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

[Открыть калькулятор !\[\]\(5abce1a84a655b073239ab33e1199487_img.jpg\)](#)

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



14) Полная степень свободы для линейных молекул 

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

Открыть калькулятор 

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

15) Полная степень свободы для нелинейных молекул 

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

Открыть калькулятор 


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

16) Постоянная вращения, связанная с равновесием 

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

Открыть калькулятор 

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

17) Частота вибрации при заданной основной частоте 

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

Открыть калькулятор 

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



18) Частота вибрации с учетом частоты второго обертона 

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

Открыть калькулятор 

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

19) Частота вибрации с учетом частоты первого обертона 

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

Открыть калькулятор 


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

20) Частота второго обертона 

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

Открыть калькулятор 

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

21) Частота первого обертона 

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

Открыть калькулятор 

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







Используемые переменные

- 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
- ν_0 Частота вибрации (Герц)
- $\nu_{0 \rightarrow 1}$ Основная частота (Герц)
- $\nu_{0 \rightarrow 2}$ Частота первого обертона (Герц)
- $\nu_{0 \rightarrow 3}$ Частота второго обертона (Герц)
- ν_{max} Максимальное вибрационное число
- ν_{vib} Частота вибрации (Герц)
- vib_d_l Линейная степень вибрации
- vib_d_{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, используемые измерения

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



Проверьте другие списки формул

- [Важные калькуляторы колебательной спектроскопии](#)
[Формулы](#) 
- [Уровни вибрационной энергии](#)
[Формулы](#) 

Не стесняйтесь **ПОДЕЛИТЬСЯ** этим документом с друзьями!

PDF Доступен в

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

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

[Пожалуйста, оставьте свой отзыв здесь...](#)

