



[calculatoratoz.com](http://calculatoratoz.com)



[unitsconverters.com](http://unitsconverters.com)

# Ważne kalkulatory spektroskopii wibracyjnej Formuły

Kalkulatory!

Przykłady!

konwersje!

Zakładka [calculatoratoz.com](http://calculatoratoz.com), [unitsconverters.com](http://unitsconverters.com)

Najszerzy zasięg kalkulatorów i rosniecie - **30 000+ kalkulatorów!**

Oblicz z inną jednostką dla każdej zmiennej - **W wbudowanej konwersji jednostek!**

Najszerzy zbiór miar i jednostek - **250+ pomiarów!**



Nie krępuj się UDOSTĘPNIJ ten dokument swoim  
znajomym!

[Zostaw swoją opinię tutaj...](#)



## Lista 21 Ważne kalkulatory spektroskopii wibracyjnej Formuły

### Ważne kalkulatory spektroskopii wibracyjnej



#### 1) Anharmoniczna Stała Potencjału

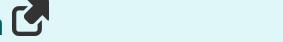


**fx**  $\alpha_e = \frac{B_v - B_e}{v + \frac{1}{2}}$

Otwórz kalkulator

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

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

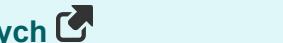


**fx**  $F_l = 3 \cdot z$

Otwórz kalkulator

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

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



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

Otwórz kalkulator

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



## 4) Częstotliwość wibracji przy danej częstotliwości podstawowej ↗

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

Otwórz kalkulator ↗

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

## 5) Częstotliwość wibracji przy podanej drugiej częstotliwości nadtonowej ↗

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

Otwórz kalkulator ↗

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

## 6) Częstotliwość wibracji przy podanej pierwszej częstotliwości nadtonowej ↗

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

Otwórz kalkulator ↗

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

## 7) Druga częstotliwość nadtonów ↗

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

Otwórz kalkulator ↗

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



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

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

Otwórz kalkulator ↗

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

## 9) Maksymalna wibracyjna liczba kwantowa ↗

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

Otwórz kalkulator ↗

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

## 10) Pierwsza częstotliwość nadtonowa ↗

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

Otwórz kalkulator ↗

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

## 11) Podstawowa częstotliwość przejść wibracyjnych ↗

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

Otwórz kalkulator ↗

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



## 12) Stała anharmoniczności dla drugiej częstotliwości nadtonowej ↗

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

[Otwórz kalkulator ↗](#)

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

## 13) Stała anharmoniczności dla pierwszej częstotliwości nadtonowej ↗

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

[Otwórz kalkulator ↗](#)

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

## 14) Stała anharmoniczności przy danej częstotliwości podstawowej ↗

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

[Otwórz kalkulator ↗](#)

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

## 15) Stała obrotowa dla stanu wibracyjnego ↗

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

[Otwórz kalkulator ↗](#)

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



## 16) Stała obrotowa związana z równowagą ↗

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

Otwórz kalkulator ↗

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

## 17) Wibracyjna liczba kwantowa przy użyciu stałej obrotowej ↗

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

Otwórz kalkulator ↗

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

## 18) Wibracyjna liczba kwantowa przy użyciu wibracyjnej liczby falowej ↗

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

Otwórz kalkulator ↗

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



**19) Wibracyjna liczba kwantowa z wykorzystaniem częstotliwości drgań****Otwórz kalkulator**

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

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

**20) Wibracyjny stopień swobody cząsteczek liniowych**

**fx** 
$$vibd_l = (3 \cdot z) - 5$$

**Otwórz kalkulator**

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

**21) Wibracyjny stopień swobody cząsteczek nieliniowych**

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

**Otwórz kalkulator**

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



## Używane zmienne

- **B<sub>e</sub>** Stała równowaga rotacyjna (*Na metr*)
- **B<sub>v</sub>** Stała wibracji rotacyjnej (*1 na metr*)
- **E<sub>vf</sub>** Energia wibracyjna (*Dżul*)
- **F<sub>l</sub>** Liniowy stopień swobody
- **F<sub>n</sub>** Stopień swobody nieliniowy
- **v** Wibracyjna liczba kwantowa
- **v<sub>0</sub>** Częstotliwość wibracji (*Herc*)
- **v<sub>0->1</sub>** Podstawowa częstotliwość (*Herc*)
- **v<sub>0->2</sub>** Pierwsza częstotliwość alikwotu (*Herc*)
- **v<sub>0->3</sub>** Druga częstotliwość alikwotu (*Herc*)
- **v<sub>max</sub>** Maksymalna liczba wibracji
- **v<sub>vib</sub>** Częstotliwość wibracji (*Herc*)
- **vibd<sub>l</sub>** Liniowy stopień wibracyjny
- **vibd<sub>nl</sub>** Nieliniowy stopień wibracji
- **x<sub>e</sub>** Stała anharmonii
- **z** Liczba atomów
- **α<sub>e</sub>** Stała potencjału anharmonicznego
- **ω'** Liczba fal wibracyjnych (*1 na metr*)



# Stałe, funkcje, stosowane pomiary

- **Stały:** [hP], 6.626070040E-34 Kilogram Meter<sup>2</sup> / Second  
*Planck constant*
- **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* 



## Sprawdź inne listy formuł

- Ważne kalkulatory spektroskopii wibracyjnej Formuły 
- Poziomy energii wibracyjnej Formuły 

Nie krępuj się UDOSTĘPNIJ ten dokument swoim znajomym!

### PDF Dostępne w

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

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

[Zostaw swoją opinię tutaj...](#)

