



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



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

# Calculadoras importantes de espectroscopia vibratoria Fórmulas

¡Calculadoras!

¡Ejemplos!

¡Conversiones!

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

Cobertura más amplia de calculadoras y creciente - ¡30.000+ calculadoras!

Calcular con una unidad diferente para cada variable - ¡Conversión de unidades integrada!

La colección más amplia de medidas y unidades - ¡250+ Medidas!



¡Siéntete libre de COMPARTIR este documento con tus amigos!

[Por favor, deje sus comentarios aquí...](#)



# Lista de 21 Calculadoras importantes de espectroscopia vibratoria Fórmulas

## Calculadoras importantes de espectroscopia vibratoria

### 1) Constante de anarmónica dada la frecuencia del primer sobretono

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

Calculadora abierta 

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

### 2) Constante de anarmónica dada la frecuencia fundamental

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

Calculadora abierta 

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



## 3) Constante de anarmonicidad dada la frecuencia del segundo sobretono



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

Calculadora abierta

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

## 4) Constante de potencial anarmónico

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

Calculadora abierta

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

## 5) Constante de rotación relacionada con el equilibrio

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

Calculadora abierta

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




6) Constante rotacional para el estado vibracional 

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

Calculadora abierta 

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

7) Frecuencia de segundo sobretono 

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

Calculadora abierta 


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

8) Frecuencia fundamental de las transiciones vibratorias 

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

Calculadora abierta 

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


9) Frecuencia vibratoria dada Frecuencia de segundo sobretono 

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

Calculadora abierta 

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



10) Frecuencia vibratoria dada la frecuencia fundamental 

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

Calculadora abierta 


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

11) Frecuencia vibratoria dada Primera frecuencia armónica 

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

Calculadora abierta 


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

12) Grado de libertad vibracional para moléculas lineales 

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

Calculadora abierta 


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

13) Grado de libertad vibracional para moléculas no lineales 

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

Calculadora abierta 

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

14) Grado total de libertad para moléculas lineales 

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

Calculadora abierta 

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



15) Grado total de libertad para moléculas no lineales 

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

Calculadora abierta 

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

16) Número cuántico vibracional usando la constante de rotación 

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

Calculadora abierta 

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

17) Número cuántico vibratorio máximo 

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

Calculadora abierta 

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

18) Número cuántico vibratorio usando frecuencia vibratoria 

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

Calculadora abierta 

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



## 19) Número cuántico vibratorio utilizando el número de onda vibracional



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

Calculadora abierta

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

## 20) Número vibracional máximo usando la constante de anarmónica

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

Calculadora abierta

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

## 21) Primera frecuencia armónica

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

Calculadora abierta

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









## Variables utilizadas

- $B_e$  Equilibrio constante de rotación (*Por metro*)
- $B_v$  Vibración constante rotacional (*1 por metro*)
- $E_{vf}$  Energía vibratoria (*Joule*)
- $Fl$  Grado de libertad lineal
- $Fn$  Grado de libertad no lineal
- $v$  Número cuántico vibratorio
- $\nu_0$  Frecuencia de vibración (*hercios*)
- $\nu_{0 \rightarrow 1}$  Frecuencia fundamental (*hercios*)
- $\nu_{0 \rightarrow 2}$  Primera frecuencia armónica (*hercios*)
- $\nu_{0 \rightarrow 3}$  Frecuencia de segundo sobretono (*hercios*)
- $\nu_{max}$  Número vibratorio máximo
- $\nu_{vib}$  Frecuencia vibratoria (*hercios*)
- $\nu_{vib,l}$  Grado vibracional lineal
- $\nu_{vib,nl}$  Grado vibratorio no lineal
- $x_e$  Constante de anarmonicidad
- $Z$  Número de átomos
- $\alpha_e$  Constante de potencial anarmónico
- $\omega'$  Número de onda vibracional (*1 por metro*)



## Constantes, funciones, medidas utilizadas

- **Constante:** [hP], 6.626070040E-34 Kilogram Meter<sup>2</sup> / Second  
*Planck constant*
- **Medición: Energía** in Joule (J)  
*Energía Conversión de unidades* 
- **Medición: Frecuencia** in hercios (Hz)  
*Frecuencia Conversión de unidades* 
- **Medición: Número de onda** in 1 por metro (1/m)  
*Número de onda Conversión de unidades* 
- **Medición: Densidad Atómica Lineal** in Por metro (m<sup>-1</sup>)  
*Densidad Atómica Lineal Conversión de unidades* 



## Consulte otras listas de fórmulas

- [Calculadoras importantes de espectroscopia vibratoria Fórmulas](#) 
- [Niveles de energía vibratoria Fórmulas](#) 

¡Siéntete libre de COMPARTIR este documento con tus amigos!

### PDF Disponible en

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

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

[Por favor, deje sus comentarios aquí...](#)

