



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



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

# Importanti calcolatori della spettroscopia vibrazionale

## Formule

Calcolatrici!

Esempi!

Conversioni!

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

La più ampia copertura di calcolatrici e in crescita - **30.000+ calcolatrici!**  
Calcola con un'unità diversa per ogni variabile - **Nella conversione di unità costruita!**

La più ampia raccolta di misure e unità - **250+ misurazioni!**



Sentiti libero di **CONDIVIDERE** questo documento con i tuoi amici!

[Si prega di lasciare il tuo feedback qui...](#)



# Lista di 21 Importanti calcolatori della spettroscopia vibrazionale Formule

## Importanti calcolatori della spettroscopia vibrazionale ↗

### 1) Costante di anarmonicità data la frequenza del primo armonico ↗

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

Apri Calcolatrice ↗

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

### 2) Costante di anarmonicità data la frequenza del secondo armonico ↗

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

Apri Calcolatrice ↗

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


### 3) Costante di anarmonicità data la frequenza fondamentale ↗

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

Apri Calcolatrice ↗

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




4) Costante di rotazione correlata all'equilibrio 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(e78f798d4ea5c530c9db49e7d26e6b95\_img.jpg\)](#)

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

5) Costante di rotazione per lo stato vibrazionale 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(05be7c7a8995decd503647c99211f7c2\_img.jpg\)](#)

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

6) Costante potenziale anarmonica 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(fe3aebe81acea8d45108cd2768939da7\_img.jpg\)](#)

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


7) Frequenza di vibrazione data la prima frequenza di intonazione 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(899d8b7697d64725bf017d3296cfcf1b\_img.jpg\)](#)

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



8) Frequenza di vibrazione data la seconda frequenza di armonico 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(e2376d476d06eb31946dc01a69a4403a\_img.jpg\)](#)

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

9) Frequenza fondamentale delle transizioni vibrazionali 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(0b5e7e25e8775f7e7e80906ada4f0021\_img.jpg\)](#)

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

10) Frequenza vibrazionale data Frequenza fondamentale 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(bd3b31712ad9bab5a241210fa6925cdd\_img.jpg\)](#)


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

11) Grado di libertà totale per molecole lineari 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(7bc43b319a082987e20f7bf78f4bab80\_img.jpg\)](#)

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

12) Grado di libertà totale per molecole non lineari 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(4a7b4ce770af8456e11a71f9565c8c2b\_img.jpg\)](#)

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




13) Grado di libertà vibrazionale per molecole lineari 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(d3fb9f94af8b26d1c844efa9a98805b0\_img.jpg\)](#)

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

14) Grado di libertà vibrazionale per molecole non lineari 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(e1d6102fe77919492c04879c8450f1f5\_img.jpg\)](#)

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

15) Numero massimo di vibrazioni utilizzando la costante di anarmonicità 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(ab4e2b3fc7e7887b7a72f548aa6f5e60\_img.jpg\)](#)

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

16) Numero Quantico Vibrazionale Massimo 

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

[Apri Calcolatrice !\[\]\(5abce1a84a655b073239ab33e1199487\_img.jpg\)](#)

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



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



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

Apri Calcolatrice

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

## 18) Numero quantico vibrazionale usando la costante di rotazione

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

Apri Calcolatrice

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

## 19) Numero quantico vibrazionale usando la frequenza vibrazionale

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

Apri Calcolatrice

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

## 20) Prima frequenza di intonazione

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

Apri Calcolatrice

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



## 21) Seconda frequenza di armonico

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

Apri Calcolatrice 

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









## Variabili utilizzate

- $B_e$  Equilibrio costante rotazionale (Al metro)
- $B_v$  Costante di rotazione vib (1 al metro)
- $E_{vf}$  Energia vibrazionale (Joule)
- $l$  Grado di libertà lineare
- $n$  Grado di libertà non lineare
- $v$  Numero quantico vibrazionale
- $\nu_0$  Frequenza di vibrazione (Hertz)
- $\nu_{0 \rightarrow 1}$  Frequenza fondamentale (Hertz)
- $\nu_{0 \rightarrow 2}$  Prima frequenza armonica (Hertz)
- $\nu_{0 \rightarrow 3}$  Seconda frequenza armonica (Hertz)
- $v_{max}$  Numero vibrazionale massimo
- $\nu_{vib}$  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
- $\alpha_e$  Costante di potenziale anarmonico
- $\omega'$  Numero d'onda vibrazionale (1 al metro)





## Costanti, Funzioni, Misure utilizzate

- **Costante:** [hP], 6.626070040E-34 Kilogram Meter<sup>2</sup> / Second  
*Planck constant*
- **Misurazione: Energia** in Joule (J)  
*Energia Conversione unità* 
- **Misurazione: Frequenza** in Hertz (Hz)  
*Frequenza Conversione unità* 
- **Misurazione: Numero d'onda** in 1 al metro (1/m)  
*Numero d'onda Conversione unità* 
- **Misurazione: Densità Atomica Lineare** in Al metro (m<sup>-1</sup>)  
*Densità Atomica Lineare Conversione unità* 



## Controlla altri elenchi di formule

- **Importanti calcolatori della spettroscopia vibrazionale Formule** 
- **Livelli di energia vibrazionale Formule** 

Sentiti libero di **CONDIVIDERE** questo documento con i tuoi amici!

### PDF Disponibile in

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

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

[\*Si prega di lasciare il tuo feedback qui...\*](#)

