



calculatoratoz.com



unitsconverters.com

Calculadoras Importantes de Espectroscopia Vibracional Fórmulas

Calculadoras!

Exemplos!

Conversões!

marca páginas calculatoratoz.com, unitsconverters.com

Maior cobertura de calculadoras e crescente - **30.000+ calculadoras!**
Calcular com uma unidade diferente para cada variável - **Conversão de unidade embutida!**

Coleção mais ampla de medidas e unidades - **250+ medições!**



Sinta-se à vontade para COMPARTILHAR este documento com seus amigos!

[Por favor, deixe seu feedback aqui...](#)



Lista de 21 Calculadoras Importantes de Espectroscopia Vibracional Fórmulas

Calculadoras Importantes de Espectroscopia Vibracional

1) Constante de anarmonicidade dada a frequência fundamental

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

[Abrir Calculadora !\[\]\(cbe2492b119e39e02a1dab2af4a4b296_img.jpg\)](#)

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

2) Constante de anarmonicidade dada a primeira frequência harmônica

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

[Abrir Calculadora !\[\]\(870f5d5e9c0d57485634be3ecf52f3ca_img.jpg\)](#)

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

3) Constante de anarmonicidade dada a segunda frequência harmônica

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

[Abrir Calculadora !\[\]\(7d1d6890825e83a6a4a51febe2dcc7f3_img.jpg\)](#)

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



4) Constante Potencial Anarmônica 

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

Abrir Calculadora 

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

5) Constante rotacional para estado vibracional 

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

Abrir Calculadora 

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

6) Constante Rotacional Relacionada ao Equilíbrio 

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

Abrir Calculadora 

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

7) Frequência do segundo sobretom 

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

Abrir Calculadora 

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



8) Frequência Fundamental das Transições Vibracionais 

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

Abrir Calculadora 

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

9) Frequência Vibracional dada a Frequência de Segundo Tom 

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

Abrir Calculadora 

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

10) Frequência Vibracional dada a Frequência Fundamental 

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

Abrir Calculadora 

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

11) Frequência Vibracional dada a Primeira Frequência Harmônica 

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

Abrir Calculadora 

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




12) Grau de liberdade vibracional para moléculas lineares 

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

[Abrir Calculadora !\[\]\(d3fb9f94af8b26d1c844efa9a98805b0_img.jpg\)](#)

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

13) Grau de liberdade vibracional para moléculas não lineares 

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

[Abrir Calculadora !\[\]\(e1d6102fe77919492c04879c8450f1f5_img.jpg\)](#)

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

14) Grau Total de Liberdade para Moléculas Lineares 

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

[Abrir Calculadora !\[\]\(ab4e2b3fc7e7887b7a72f548aa6f5e60_img.jpg\)](#)

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

15) Grau total de liberdade para moléculas não lineares 

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

[Abrir Calculadora !\[\]\(5abce1a84a655b073239ab33e1199487_img.jpg\)](#)

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


16) Número Quântico Vibracional Máximo 

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

[Abrir Calculadora !\[\]\(111c5272ee3f91361f0d2e3665dd6ad0_img.jpg\)](#)

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



17) Número Quântico Vibracional usando Constante Rotacional 

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

Abrir Calculadora 

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

18) Número Quântico Vibracional usando Frequência Vibracional 

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

Abrir Calculadora 

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

19) Número quântico vibracional usando número de onda vibracional 

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

Abrir Calculadora 

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



20) Número Vibracional Máximo usando Constante de Anarmonicidade

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

[Abrir Calculadora !\[\]\(6605b201d6f14d9b3bcb8ab5f274d107_img.jpg\)](#)

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

21) Primeira Frequência Harmônica

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

[Abrir Calculadora !\[\]\(e8fb589d58dad1692debababa5e928b6_img.jpg\)](#)

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







Variáveis Usadas

- B_e Equilíbrio Constante Rotacional (*Por Metro*)
- B_v vibração constante rotacional (*1 por metro*)
- E_{vf} Energia Vibracional (*Joule*)
- FI Grau de Liberdade Linear
- F_n Grau de liberdade não linear
- v Número Quântico Vibracional
- ν_0 Frequência de Vibração (*Hertz*)
- $\nu_{0 \rightarrow 1}$ Frequência fundamental (*Hertz*)
- $\nu_{0 \rightarrow 2}$ Primeira Frequência Harmônica (*Hertz*)
- $\nu_{0 \rightarrow 3}$ Frequência do segundo harmônico (*Hertz*)
- ν_{max} Número Vibracional Máximo
- ν_{vib} frequência vibracional (*Hertz*)
- $\nu_{vib,l}$ Grau Vibracional Linear
- $\nu_{vib,nl}$ Grau Vibracional Não Linear
- x_e Constante de Anarmonicidade
- Z Número de átomos
- α_e Constante de Potencial Anarmônico
- ω' Número de onda vibracional (*1 por metro*)



Constantes, Funções, Medidas usadas

- **Constante:** [hP], 6.626070040E-34 Kilogram Meter² / Second
Planck constant
- **Medição: Energia** in Joule (J)
Energia Conversão de unidades 
- **Medição: Frequência** in Hertz (Hz)
Frequência Conversão de unidades 
- **Medição: Número da onda** in 1 por metro (1/m)
Número da onda Conversão de unidades 
- **Medição: Densidade Atômica Linear** in Por Metro (m⁻¹)
Densidade Atômica Linear Conversão de unidades 



Verifique outras listas de fórmulas

- [Calculadoras Importantes de Espectroscopia Vibracional Fórmulas](#) 
- [Níveis de Energia Vibracional Fórmulas](#) 

Sinta-se à vontade para **COMPARTILHAR** este documento com seus amigos!

PDF Disponível em

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

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

[Por favor, deixe seu feedback aqui...](#)

