

# Calculadoras Importantes de Espectroscopia Vibracional Fórmulas PDF



**Fórmulas**  
**Exemplos**  
**com unidades**

**Lista de 21**  
**Calculadoras Importantes de Espectroscopia**  
**Vibracional Fórmulas**

## 1) Constante de anarmonicidade dada a frequência fundamental Fórmula

Fórmula

$$x_e = \frac{\nu_0 - \nu_{0>1}}{2 \cdot \nu_0}$$

Exemplo com Unidades

$$0.4973 = \frac{130 \text{ Hz} - 0.7 \text{ Hz}}{2 \cdot 130 \text{ Hz}}$$

Avaliar Fórmula

## 2) Constante de anarmonicidade dada a primeira frequência harmônica Fórmula

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

$$0.2372 = \frac{1}{3} \cdot \left( 1 - \left( \frac{0.75 \text{ Hz}}{2 \cdot 1.3 \text{ Hz}} \right) \right)$$

Avaliar Fórmula

## 3) Constante de anarmonicidade dada a segunda frequência harmônica Fórmula

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

$$0.2179 = \frac{1}{4} \cdot \left( 1 - \left( \frac{0.50 \text{ Hz}}{3 \cdot 1.3 \text{ Hz}} \right) \right)$$

Avaliar Fórmula

## 4) Constante Potencial Anarmônica Fórmula

Fórmula

$$\alpha_e = \frac{B_V - B_e}{\nu + \frac{1}{2}}$$

Exemplo com Unidades

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

Avaliar Fórmula

## 5) Constante rotacional para estado vibracional Fórmula

Fórmula

$$B_V = B_e + \left( \alpha_e \cdot \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \right)$$

Exemplo com Unidades

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

Avaliar Fórmula



## 6) Constante Rotacional Relacionada ao Equilíbrio Fórmula ↻

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

$$20 \text{ m}^{-1} = 351 \text{ m}^{-1} \cdot \left( 6 \cdot \left( 2 + \frac{1}{2} \right) \right)$$

Avaliar Fórmula ↻

## 7) Frequência do segundo sobretom Fórmula ↻

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

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

Avaliar Fórmula ↻

## 8) Frequência Fundamental das Transições Vibracionais Fórmula ↻

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

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

Avaliar Fórmula ↻

## 9) Frequência Vibracional dada a Frequência de Segundo Tom Fórmula ↻

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

$$0.0067 \text{ Hz} = \frac{0.50 \text{ Hz}}{3} \cdot \left( 1 - \left( 4 \cdot 0.24 \right) \right)$$

Avaliar Fórmula ↻

## 10) Frequência Vibracional dada a Frequência Fundamental Fórmula ↻

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

$$1.3462 \text{ Hz} = \frac{0.7 \text{ Hz}}{1 - 2 \cdot 0.24}$$

Avaliar Fórmula ↻

## 11) Frequência Vibracional dada a Primeira Frequência Harmônica Fórmula ↻

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

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

Avaliar Fórmula ↻

## 12) Grau de liberdade vibracional para moléculas lineares Fórmula ↻

Fórmula

$$\text{vib}_{\text{dl}} = \left( 3 \cdot z \right) - 5$$

Exemplo

$$100 = \left( 3 \cdot 35 \right) - 5$$

Avaliar Fórmula ↻

## 13) Grau de liberdade vibracional para moléculas não lineares Fórmula ↻

Fórmula

$$\text{vib}_{\text{dl}} = \left( 3 \cdot z \right) - 6$$

Exemplo

$$99 = \left( 3 \cdot 35 \right) - 6$$

Avaliar Fórmula ↻



#### 14) Grau Total de Liberdade para Moléculas Lineares Fórmula

Fórmula

$$F_l = 3 \cdot z$$

Exemplo

$$105 = 3 \cdot 35$$

Avaliar Fórmula 

#### 15) Grau total de liberdade para moléculas não lineares Fórmula

Fórmula

$$F_n = 3 \cdot z$$

Exemplo

$$105 = 3 \cdot 35$$

Avaliar Fórmula 

#### 16) Número Quântico Vibracional Máximo Fórmula

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

$$1.5833 = \left( \frac{151/m}{2 \cdot 0.24 \cdot 151/m} \right) - \frac{1}{2}$$

Avaliar Fórmula 

#### 17) Número Quântico Vibracional usando Constante Rotacional Fórmula

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

$$2 = \left( \frac{351/m - 20m^{-1}}{6} \right) - \frac{1}{2}$$

Avaliar Fórmula 

#### 18) Número Quântico Vibracional usando Frequência Vibracional Fórmula

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

$$1.2E+35 = \left( \frac{100J}{6.6E-34 \cdot 1.3Hz} \right) - \frac{1}{2}$$

Avaliar Fórmula 

#### 19) Número quântico vibracional usando número de onda vibracional Fórmula

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

$$2.3E+36 = \left( \frac{100J}{6.6E-34 \cdot 151/m} \right) - \frac{1}{2}$$

Avaliar Fórmula 

#### 20) Número Vibracional Máximo usando Constante de Anarmonicidade Fórmula

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

$$0.1562 = \frac{(151/m)^2}{4 \cdot 151/m \cdot 100J \cdot 0.24}$$

Avaliar Fórmula 

#### 21) Primeira Frequência Harmônica Fórmula

Fórmula

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

Exemplo com Unidades

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

Avaliar Fórmula 



## Variáveis usadas na lista de Calculadoras Importantes de Espectroscopia Vibracional

### Fórmulas acima

- $B_e$  Equilíbrio Constante Rotacional (*Por Metro*)
- $B_v$  vibração constante rotacional (*1 por metro*)
- $E_{vf}$  Energia Vibracional (*Joule*)
- $Fl$  Grau de Liberdade Linear
- $Fn$  Grau de liberdade não linear
- $v$  Número Quântico Vibracional
- $v_0$  Frequência de Vibração (*Hertz*)
- $v_{0 \rightarrow 1}$  Frequência fundamental (*Hertz*)
- $v_{0 \rightarrow 2}$  Primeira Frequência Harmônica (*Hertz*)
- $v_{0 \rightarrow 3}$  Frequência do segundo harmônico (*Hertz*)
- $v_{max}$  Número Vibracional Máximo
- $v_{vib}$  frequência vibracional (*Hertz*)
- $vibd_l$  Grau Vibracional Linear
- $vibd_{nl}$  Grau Vibracional Não Linear
- $x_e$  Constante de Anarmonicidade
- $z$  Número de átomos
- $\alpha_e$  Constante de Potencial Anarmônico
- $\omega'$  Número de onda vibracional (*1 por metro*)

## Constantes, funções, medidas usadas na lista de Calculadoras Importantes de Espectroscopia Vibracional

### Fórmulas acima

- constante(s): [hP], 6.626070040E-34  
*Constante de Planck*
- **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* ↻



## Baixe outros PDFs de Importante Espectroscopia vibracional

- **Importante Níveis de Energia Vibracional Fórmulas** 

## Experimente nossas calculadoras visuais exclusivas

-  **Fração própria** 
-  **MMC de dois números** 

Por favor, **COMPARTILHE** este PDF com alguém que precise dele!

## Este PDF pode ser baixado nestes idiomas

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

7/10/2024 | 3:39:46 AM UTC

