

# Calculadoras importantes de espectroscopia vibratoria Fórmulas PDF



**Fórmulas**  
**Ejemplos**  
**con unidades**

**Lista de 21**  
**Calculadoras importantes de espectroscopia vibratoria Fórmulas**

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

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula

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

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula

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

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula

## 4) Constante de potencial anarmónico Fórmula

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula

## 5) Constante de rotación relacionada con el equilibrio Fórmula

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula



## 6) Constante rotacional para el estado vibracional Fórmula

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula 

## 7) Frecuencia de segundo sobretono Fórmula

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula 

## 8) Frecuencia fundamental de las transiciones vibratorias Fórmula

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula 

## 9) Frecuencia vibratoria dada Frecuencia de segundo sobretono Fórmula

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula 

## 10) Frecuencia vibratoria dada la frecuencia fundamental Fórmula

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula 

## 11) Frecuencia vibratoria dada Primera frecuencia armónica Fórmula

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

Evaluar fórmula 

## 12) Grado de libertad vibracional para moléculas lineales Fórmula

Fórmula

$$\text{vibd}_l = \left( 3 \cdot z \right) - 5$$

Ejemplo

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

Evaluar fórmula 

## 13) Grado de libertad vibracional para moléculas no lineales Fórmula

Fórmula

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

Ejemplo

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

Evaluar fórmula 



#### 14) Grado total de libertad para moléculas lineales Fórmula

Evaluar fórmula 

Fórmula

$$F_l = 3 \cdot z$$

Ejemplo

$$105 = 3 \cdot 35$$

#### 15) Grado total de libertad para moléculas no lineales Fórmula

Evaluar fórmula 

Fórmula

$$F_n = 3 \cdot z$$

Ejemplo

$$105 = 3 \cdot 35$$

#### 16) Número cuántico vibracional usando la constante de rotación Fórmula

Evaluar fórmula 

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

#### 17) Número cuántico vibratorio máximo Fórmula

Evaluar fórmula 

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

$$1.5833 = \left( \frac{15 \text{ 1/m}}{2 \cdot 0.24 \cdot 15 \text{ 1/m}} \right) \cdot \frac{1}{2}$$

#### 18) Número cuántico vibratorio usando frecuencia vibratoria Fórmula

Evaluar fórmula 

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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

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

Evaluar fórmula 

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

$$2.3\text{E}+36 = \left( \frac{100 \text{ J}}{6.6\text{E}-34 \cdot 15 \text{ 1/m}} \right) \cdot \frac{1}{2}$$

#### 20) Número vibracional máximo usando la constante de anarmonía Fórmula

Evaluar fórmula 

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

$$0.1562 = \frac{(15 \text{ 1/m})^2}{4 \cdot 15 \text{ 1/m} \cdot 100 \text{ J} \cdot 0.24}$$

#### 21) Primera frecuencia armónica Fórmula

Evaluar fórmula 

Fórmula

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

Ejemplo con Unidades

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



## Variables utilizadas en la lista de Calculadoras importantes de espectroscopia vibratoria Fórmulas anterior

- $B_e$  Equilibrio constante de rotación (Por metro)
- $B_v$  Vibración constante rotacional (1 por metro)
- $E_{vf}$  Energía vibratoria (Joule)
- $Fl$  Grado de libertad lineal
- $F_n$  Grado de libertad no lineal
- $v$  Número cuántico vibratorio
- $v_0$  Frecuencia de vibración (hercios)
- $v_{0 \rightarrow 1}$  Frecuencia fundamental (hercios)
- $v_{0 \rightarrow 2}$  Primera frecuencia armónica (hercios)
- $v_{0 \rightarrow 3}$  Frecuencia de segundo sobretono (hercios)
- $v_{max}$  Número vibratorio máximo
- $v_{vib}$  Frecuencia vibratoria (hercios)
- $vib_d_l$  Grado vibracional lineal
- $vib_{d_{nl}}$  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 y medidas utilizadas en la lista de Calculadoras importantes de espectroscopia vibratoria Fórmulas anterior

- constante(s): [hP], 6.626070040E-34 constante de planck
- 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 ( $m^{-1}$ )  
Densidad Atómica Lineal [Conversión de unidades](#)



- **Importante Niveles de energía vibratoria Fórmulas** 

### Pruebe nuestras calculadoras visuales únicas

-  **Cambio porcentual** 
-  **MCM de dos números** 
-  **Fracción propia** 

¡COMPARTE este PDF con alguien que lo necesite!

Este PDF se puede descargar en estos idiomas.

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

7/10/2024 | 3:39:15 AM UTC

