الفصل الثامن

دوران الجسم المشدود

The Rigid Rotator

نلفت الإنتباه على دراسة المسألة الدورانية فى الفصل الأخير، ومن الأفضل إعتبار المسألة التى تساعد كنموذج للطيف الدورانى لجزىء ثنائى الذرية. مثل ذلك النموذج يكون الدوار المشدود من حيث كتلتين منفصلتين بمسافة ثابتة، يدوران حول مركزهما إضافة لذلك بعض السمات لهذه المسألة تكون مناسبة لتلك لذرة الأيدروجين والتى تعتبر فى الفصل التالى.

فلنعتبر كتلتين (m_1), (m_2) بمسافة (r_1), (r_2) على التوالى وذلك من مركزهما. يدوران حول مركز الكتلة.ومن الأنسب أخذ مركز الكتلة كأساس لإحداثى النظام عندما يدور الجسم المشدود، وربما يمكن تمثيله كما نرى فى الشكل (1) السرعة (r) لجسيم أحادى يمكن كتابته فى جزئية سرعته الإحداثية v_x, v_y, v_z متوازية للإحداثيات الكارتيزية (المحاور) مثل : -

$$V^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \qquad -1$$

أو نتذكر أن :-

$$V_x = \frac{dx}{dt} \quad , \quad V_y = \frac{dy}{dt} \quad \text{and} \quad V_z = \frac{dz}{dt}$$

وبكتابة التفاضل للإحداثيات x , y , z مع الإحتفاظ بالزمن مثلما $\bar{x}$ ، $\bar{y}$ ، $\bar{z}$

فالمعادلة (1) يمكن كتابتها كما يلى : -

$$V^2 = \bar{x}^2 + \bar{y}^2 + \bar{z}^2 \qquad -2$$

الطاقة الحركية T لجسيم أحادى يمكن إيجاده كما يلى :

$$T = \frac{1}{2} mv^2 = m\ (\bar{x}^2 + \bar{y}^2 + \bar{z}^2) \qquad -3$$

وبالنسبة لمسألة الدوران، فمن الأنسب إستخدام إحداثيات دائرة قطبية $(r, \theta$ and $\varphi)$. المعادلة (3) ربما تتحول إلى إحداثيات قطبية بخط مستقيم، لكن على الأصح مناقشة طويلة عندما يشترط الناتج

$$T = \frac{1}{2}\, m\, (\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 \sin^2\theta) \qquad -4$$

مرة أخرى أن العلامة المنقطة لتشير إلى التفاضل مع إحتفاظ الزمن.

فلو أن المسافة للجسيم مثبتة من الأصل (r) وثابتة، ومن هنا $\dot{r}=0$. فلظروف معادلة المحيط، المعادلة (4) تصبح:

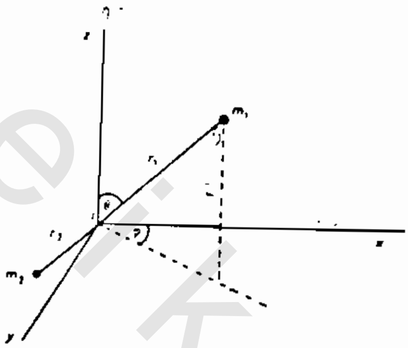

Fig. (1): The rigid rotator

$$T = \frac{1}{2}\, m\, (r^2\,\dot{\theta}^2 + r^2\,\dot{\varphi}^2 \sin^2\theta)$$

أو

$$T = \frac{1}{2}\, mr^2\, (\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2\theta) \qquad -5$$

وبالنسبة لوجود جسميين في الشكل (1). فيكون في تلك الحالة مجموع الطاقة الحركية سوف يكون مجموع الطاقة الحركية لكل جسيم على حدة ولهذا فمن المعادلة (5) نجد أن : -

$$T = \frac{1}{2}\, m_1 r_1^2\, (\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2\, \mathrm{sm}^2\theta) + \frac{1}{2}\, m_2 r_2^2\, (\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2\theta) \qquad -6$$

والرموز الموجودة (1 ,2) ما هى إلا فقط تستخدم إلى الإشارة للجسيم ناهينا عن الكتلة لكل من هما والمسافة من نقطة الأصل. وتبعية العزم للحركة لكل جسيم، على أى حال، يجب أن تكون متماثلة ولهذا فإن قيم كل من θ، φ لكل جسيم واحدة، والمعادلة (6) تعتبر بعد ذلك على هذا الشكل.

$$T^2 = \frac{1}{2}\ (m_1 r_1^{\ 2} + m_2 r_1^{\ 2})\ (\bar{\theta}^2 + \bar{\varphi}^2 \sin^2\theta) \qquad -7$$

والآن يمكن إيجاد القصور الذاتى أو العزم الذاتى (moment of inertia).

$$I = \Sigma\ m_i r_1^{\ 2}$$

ولذلك فبالنسبة بحالة الجسيم الصلب الدوار

$$I = (m_1 r_1^{\ 2} + m_2 r_2^{\ 2})$$

ومن المعادلة (7) نحصل على :-

$$T^2 = \frac{1}{2} I\ \ (\bar{\theta}^2 + \bar{\varphi}^2 \sin^2\theta) \qquad -8$$

وبمقارنة المعادلة (8) بالمعادلة (5) بالنسبة لأحادى الجسيم نرى أن الجسيم الدوار يسلك برغم ذلك هو أى الجسيم الأحادى ذات كتلة I وعند مسافة الوحدة من الأصل.

وأننا سوف نقول أن معادلة شرودنجر الثلاثية المحاور بالنسبة لجسيم أحادى:-

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\ (E - V)\ \psi = 0 \qquad -9$$

وأن طاقة الوضع للجسيم الدوار تعتبر ثابتة وهذه القيمة الثابتة ربما من الأنسب أن تتخذ بصفر. وبتطبيق المعادلة (9) على الجسيم الدوار ثم بوضع :

لتعطى : -

$$m = I \quad , \quad V = 0$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 I}{h^2}\ \ E\,\psi = 0 \qquad -10$$

علماً بأن معامل لابلاس قد أعطى سابقاً فى المحاور القطبية الدائرية بالمعادلة (1) فى الفصل السابع كما يلى :-

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2\partial}{r\partial.r} + \frac{I}{r^2 \sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial\theta}\ (\sin\theta\ \frac{\partial}{\partial\theta}) + (\frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\ \ \frac{\partial^2}{d\varphi^2}) \qquad -11$$

وكما هو معلوم أن المسافة (r) ثابتة بالنسبة للجسيم المشدود.تعتبر الوحدة إذاً (r) قيمة ثابتة، المعاملات الداخلة $(\partial/\partial r)$ أيضاً بصفر وبوضع r=1 فى الأجزاء المتبقية الأخرى، فنجد أن معامل لابلاس يختزل فى المعادلة 10 ولنأخذ الشكل :-

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{d\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{d\varphi^2}+\frac{8\pi^2 I}{h^2}E\,\psi=0 \qquad -12$$

ومن هذه المعادلة (12) نجد أنها تحتوى على متغيرين وهى θ، φ، ولكى نصل إلى حلها سيكون بالمثل مثلما إستخدم التقريب بالنسبة للصندوق الثلاث محاور فى الفصل الثالث. حيث حدثت محاولة لفصل المتغيرات.

ولقد نفترض أن ψ ما هى إلا حاصل ضرب دالتين، كل واحد من الدالتين تكون ما هى إلا دالة لواحد فقط من المتغيرات، ومن المفترض أن : -

$$\psi_{(\theta,\varphi)} = T(\theta)\,.\,F(\varphi) \qquad -13$$

حيث يعنى أن ψ (أنها دالة لكل θ، φ) تكون مساوية لناتج للدالتين (T)، (F) حيث T دالة فقط للدالة (θ) ، (F) دالة فقط للدالة (φ). والمعادلة (13) ربما يمكن كتابتها أكثر بساطة كما يلى :-

$$\psi = T\,.\,F \qquad -14$$

بعد ذلك الدالة (F) تكون مستقلة للزاوية θ، بتفاضل المعادلة (14) وبالإحتفاظ للزاوية (θ) لتنتج : -

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} = F\frac{dT}{d\theta} \qquad -15$$

بالمثل بالتفاضل مع الإحتفاظ للزاوية (φ)

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = T\,.\,\frac{dF}{d\varphi}$$

وبالتفاضل علاوة على ذلك بالإحتفاظ للزاوية (φ) تنتج: -

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2} = T\,.\,\frac{d^2F}{d\varphi^2} \qquad -16$$

بالإستبدال من المعادلات (14) ، (15) ، (16) إلى المعادلة (12) تعطى :-

$$\frac{F}{\sin\theta}\,.\,\frac{d}{d\theta}\left(\sin\frac{dT}{d\theta}\right)+\frac{T}{\sin^2\theta}\frac{d^2F}{d\varphi^2}+\frac{8\pi^2 I}{h^2}ETF = 0$$

بالضرب بواسطة $Sin^2\theta / TF$

$$\frac{\sin\theta}{T} \cdot \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{dT}{d\theta}\right) + \frac{1}{F}\frac{d^2F}{d\varphi^2}\frac{8\pi^2 I}{h^2} E\sin^2\theta = 0$$

أو

$$\frac{\sin\theta}{T} \cdot \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{dT}{d\theta}\right) + \frac{8\pi^2 I}{h^2} E\sin^2\theta = -\frac{1}{F}\frac{d^2F}{d\varphi^2} \qquad -17$$

كل جانب للمعادلـة (17) يحتوى فقط على متغير واحد. الجانب الأيسر للمعادلة يملك فقط على متغير واحد وهو (θ)، وأما الجانب الأيمن فيحتوى فقط على متغير واحد وهو (φ). مثلما المعادلـة يجب حفظ لكل القيم لكل من (φ,θ) وكل جانب للمعادلـة يجب أن يكون ثابت. ولنرمز لقيمة الثابت بالمقدار (m^2)، ويخصص كل جانب للمعادلة (17) لتكتب:-

$$-\frac{1}{F}\frac{d^2F}{d\varphi^2} = m^2 \qquad -18$$

and

$$\frac{\sin\theta}{T} \cdot \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{dT}{d\theta}\right) + \frac{8\pi^2 I}{h^2} E\sin^2\theta = m^2 \qquad -19$$

لأن هذا الفصل ممكن كمصوغ للإفتراض الأصلى المعبر عنه في المعادلة (13). لو المعادلتين (18)، (19) يمكن حلهما ليعطيا دوال مقبولة T ، F ، بعدئذ فإن دالة الموجه (ψ)، تعين بالمعادلـة (13) كنـاتج لتلك الدالتين. المعادلتين (18) ,(19) ربما تعرف بمعادلات T , F على التوالى. وأن حلهما يمكن سياقهما فيما بعد :-

The F Function — الدالة (F)

معادلة (F) يمكن أن تكتب على الشكل :-

$$\frac{1}{F}\frac{d^2F}{d\varphi^2} + m^2 = 0$$

او

$$\frac{d^2F}{d\varphi^2} + m^2 F = 0 \qquad -20$$

هذه المعادلـة عبارة عن معادلة تامـة نفس الشكل مثلما المعادلة للجسيم على الحلقة للمعادلة (6) في الفصل السابع ما عدا أن (m^2) تظهر بدلاً F , M^2 تظهر بدلاً من ψ.

ودالـة إيجـن للمعادلـة (F) أيضـا تمامـا نفس الشكل للمعادلـة (6) فـي الفصـل السـابع ويمكن التعبير عنها كما يلى :-

$$F_S = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin m\varphi \qquad -21$$

$$F_C = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos m\varphi \qquad -22$$

أو في جزئية الأس المعقد : -

$$F_+ = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} e^{im\varphi} \qquad -23$$

$$F_- = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} e^{-im\varphi} \qquad -24$$

حيث (m)

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \qquad -25$$

The T Equation — المعادلة T

الحل للمعادلـة (F) السـابقة أحدثت عدد كم (m)، والحل للمعادلة T ستحدث أعداد كم أخرى والتى لها علاقة مع (m). ولكى نوضح هذه العلاقة ربما تساعدنا لتشارك الناتج للحل في المعادلـة T. الحل للمعادلـة T تكون دالة وتعرف بمتعدد الحدود المرافق، ولكن قبل إعتبار هذه الدالة فمن المستحسن إيجاد متعدد الحدود للجيندر (Legendre).

ومـتعدد الحـدود للجيندر للدرجـة L فـي المتغير (q) تكـون حـادة ممثلة مـثل $P_L(q)$، ويمكن إيجادهـا بواسـطة التفاضل للتعبير $(q^2 - 1)$ عدة مرات ثم بعد ذلك بقسمة الـناتج بالعدد $2^l!$. إذا :

$$P_l(q) = \frac{1}{2^{\ell}\ell!} \frac{d^{\ell}(q^2-1)^{\ell}}{dq^{\ell}} \qquad -26$$

ونحصـل علـى المصـاحب لمـتعدد الحـدود للجيـندر، Legendre polynomial بتفاضل المقابل لمتعدد الحدود عدة مرات (m) ثم بضرب الـناتج $(1-q^2)^{m/2}$. مشيراً لمتعدد الحدود المصاحب للجيندر بواسطة $P^m(q)$ ثم بعد ذلك :-

$$P^m(q) = (1-q^2)^{m/2} \cdot \frac{d^m P_{\ell}(q)}{dq^m} \qquad -27$$

ومن الواجب أن نلاحظ أن كلاً من (m , ℓ) يجب أن تكون صحيحة حيث أنهما يمثلان عدد التفاضلات. علاوة على ذلك (m) لا تكون أكبر من (ℓ). هذا التعقيب من المعادلة (26) ترينا أن أعلى أس للحد (q) في متعدد الحدود $P_\ell(q)$ هو q^1. مثال. نفترض أن $\ell = 2$ إذا المعادلة 26 تصبح :

$$P_2(q) = \frac{1}{2^2\, 2.!} \; \frac{d^2 (q^2 - 1)^2}{dq^2}$$

$$= \frac{1}{8} \; \frac{d^2}{dq^2} (q^4 - 2q^2 + 1)$$

$$= \frac{1}{8} \; \frac{d}{dq} (4q^3 - 4q)$$

$$= \frac{1}{8} (12q^2 - 4)$$

$$= \frac{3}{2} q^2 - \frac{1}{2}$$

إذا فلـو أن أعلـى أس للحد q هو q^ℓ. التفاضل للحد $P_\ell(q)m$ عدة مرات يختزل أعلـى أس للمقدار q إلى q^{l-m}. ولهذا فلو أن $m>1$. فيكون مصاحب متعدد الحدود للجيندر وهو $P_\ell^m(q)$. يتلاشــى.

فمع العلامات المتقدمة سابقاً التى تنخذ في الحسبان، الحل لمعادلة T يمكن إعتبار أن :

وذلك بوضع : -

$$\frac{8\pi^2 I}{h^2} E = \beta \qquad - 28$$

فى المعادلة 19، المعادلة T تصبح كما يلى : -

$$\frac{\sin\theta}{T} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{dT}{d\theta}\right) + \beta \sin^2\theta - m^2 = 0$$

بالضرب بواسطة $T/\sin^2\theta$ نحصل على :

$$\frac{T}{\sin\theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{dT}{d\theta}\right) + \left(\beta - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right) T = 0$$

بالنظر إلى التفاضل في الشق الأول ونتذكر $(dT/d\theta)$ ، $(\sin\ \theta)$ يجب أن تتفاضل مثل الناتج:

$$\frac{1}{\sin\theta}\left(\sin\theta\frac{d^2T}{d\theta^2}+\cos\theta\frac{dT}{d\theta}\right)+\left(\beta-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)T=0 \qquad -29$$

والتغير في المعادلة يجب أن يتغير وذلك بوضع

$$q=\cos\theta \qquad -30$$

الآن .

$$\frac{dT}{d\theta}=\frac{dT}{dq}\cdot\frac{dq}{d\theta}=\frac{dT}{dq}(-\sin\theta) \qquad -31$$

علاوة على ذلك : -

$$\frac{d^2T}{d\theta^2}=\frac{d}{d\theta}\left(\frac{dT}{d\theta}\right)$$

بالإستبدال من المعادلة (31) : -

$$\frac{d^2T}{d\theta^2}=\frac{1}{d\theta}\left(-\sin\theta\ \frac{dT}{dq}\right)$$

ثم بتفاضل (dT/d_q) ، $(\sin\theta)$ كما هو ناتج : -

$$\frac{d^2T}{d\theta^2}=-\sin\theta\ \frac{d}{d\theta}\left(\frac{dT}{d\theta}\right)\quad\frac{dT}{dq}(-\cos\theta) \qquad -32$$

متذكرين أن :

$$\frac{d}{d\theta}=\frac{d}{dq}\cdot\frac{dq}{d\theta}$$

وبالنسبة للشق الأول للمعادلة (32)، فالمعادلة يمكن كتابتها كما يلى :-

$$\frac{d^2T}{d\theta^2}=-\sin\theta\left(\frac{d^2T}{dq^2}\cdot\frac{dq}{d\theta}\right)+\frac{dT}{dq}(-\cos\theta) \qquad -33$$

حيث (q) تعين بالمعادلة (30) $(dq/d\theta)$ تعطى بالمعادلة :

$$\frac{dq}{d\theta}=-\sin\theta$$

وبالإستبدال في المعادلة (33)

$$\frac{d^2T}{d\theta^2}=\sin^2\theta\cdot\frac{d^2T}{dq^2}-\cos\theta\frac{dT}{dq} \qquad -34$$

والتعبير بالنسبة $(dT/d\theta)$، $(d^2T/d\theta^2)$، تعطى بواسطة المعادلة (31) والمعادلة (34) ربما تستبدل في المعادلة (29) لتعطى :-

$$\frac{1}{\sin\theta}\ [\sin\theta\ (\sin^2\theta\ .\ \frac{d^2T}{dq^2} - \cos\theta\ (\frac{dT}{dq}) - \sin\theta\cos\theta\ \frac{dT}{dq}] +$$

$$(\beta - \frac{m^2}{\sin^2\theta})\ T=0$$

$$\mathrm{Sin}^2\theta\ \frac{dT}{dq^2} - 2\cos\theta\ \frac{dT}{dq} + (\beta - \frac{m^2}{\sin^2\theta})\ T = 0 \qquad -35$$

أخيراً. متذكراً أن $q=\cos\theta$ ، ثم $\sin^2\theta = 1-q^2$، إذاً : -

$$(1-q^2)\ \frac{d^2T}{dq^2} - 2q\ .\ \frac{dT}{dq} + (\beta - \frac{m^2}{1-q^2})\ T = 0 \qquad -36$$

لو الآن الكمية β تكون ممثلة بواسطة وضع

$$\beta = \ell\ (\ell + 1) \qquad -37$$

فالمعادلة (36) تأخذ الشكل :

$$(1-q^2)\ \frac{d^2T}{dq^2} - 2q\ .\ \frac{dT}{dq} + [\ell\ (\ell + 1) - \frac{m^2}{1-q^2}]\ T = 0 \qquad -38$$

حيث هذه المعادلة تعرف بمعادلة لجيندر المصاحبة (المرافقة). والحل لتلك المعادلة تعتبر معادلة لجيندر لمتعدد الحدود المصاحبة $P_\ell^m\ (q)$ للدرجة (ℓ) والأس (m) والتى تعين بواسطة المعادلة (27).

ولنا أن نعيد من المناقشة لمتعدد الحدود المصاحب أن (m) ليست أكبر من ℓ. علاوة على ذلك العدد المقابل لـ (m) المقابلة للعدد لمعاملات التفاضلات. والحل للمعادلة (F) ترى أن (m) يمكن أن تكون سالبة مثلما أن تكون موجبة، ولكن الدالة لا يمكن تفاضل قيمة السالب لعدة مرات ولهذا فإن الدالة $T(\theta)$ والتى تكون الحل للمعادلة T وربما يمكن تمثيلها كما يلى : -

$$T\ (\theta) = P_\ell^m\ (q) \qquad -39$$

حيث (m)، المعامل لـ m (بمعنى قيمتها أن تهمل الإشارة)، تكتب بدلاً لـ (m). عدد الكم (ℓ) الناتجة فقط من متعدد الحدود المصاحب، وتأخذ لذلك قيمة موجبة.

وعندما ان نعتبر الطيف الدورانى للجزئيات ثنائية الذرية، عادة عدد الكم يكتب مثل (J) مفضلا عن (l). اضافة θ ، $q = \cos$ ولهذا بالنسبة لهدف الطيف الدورانى. المعادلة (39) تكتب كما يلى :-

$$T(\theta) = PJ^{|m|}(\cos\theta) \qquad -40$$

حيث $J = 0, 1, 2, 3, \ldots\ldots\ldots\ldots$

و $m = J, -(J-1) \ldots\ldots -1, 0, +1, + \ldots\ldots + J$

والمعادلة (40) يمكن تعادلها لنحصل على :

$$T(\theta) = \sqrt{\left[\frac{(2J+1)(J-|m|)!}{2(J+^{|m|})!}\right]}\; P_J^{|m|}(\cos\theta) \qquad -41$$

مستويات الطاقة: The energy levels

الثابت β تعتبر متعلقة لعدد الكم (J) بواسطة المعادلة (37)، حيث ℓ أساسا تكتب في المكان (J).

$$\beta = J(J+1) \qquad -42$$

لاول لحظة. على اى حال β متعلقة لطاقة النظام بواسطة المعادلة 28.

$$\beta = \frac{8\pi^2 I}{h^2} E \qquad -28$$

منذ ذلك. من المعادلة (28)، (42)

$$E = \frac{h^2}{8\pi^2 I} . J(J+1) \qquad -43$$

هذه العلاقة يعطى قيمة إيجن (قيمة ذاتية) لطاقة الدوران، و J تعرف عدد الكم الدورانى.

حالة النظام. على أى حال، تتطلب الخصائص لعدد الكم لكل من (J)، (m). وسوف نتذكر ان العلاقة بين هذين لأعداد الكم $J \geq |m|$. فعندما J=2. كمثال $m = +2, +1, 0, -1, -2$. إذا في تلك الحالة يوجد خمس حالات ممكنة للنظام، بالنسبة J=2. مثلما الطاقة تعين ببطء بواسطة القيمة للثابت (J) في المعادلة (45) حيث

يوجد إذاً خمس حالات مختلفة للنظام لهم نفس الطاقة فبالنسبة (J=2) بعدئذ، حيث يوجد إنحلال خماسى للنظام. عموماً، أى قيمة لـ (J) يوجد (2J+1) حالات منحلة (متلاشية). ولربما ننتبه هنا أن هذا التلاشى يزال لو الجزىء يوضع في مكان مغناطيسى، ومن هنا. في وجود المجال المغناطيسى خطوط إضافية تظهر في الطيف الدورانى. ومن الواجب أن نلاحظ أن J يمكن أن تأخذ قيمة صفر، ولهذا مرة أخرى ترى أن نظام الدوران يمكن أن يكون صفر.

والدوران المشدود ربما يساعد مثلما كنموذج متقارب وذلك للطيف الدورانى للجزىء ثنائى الذرية. لوستوبين من الطاقة قد عينا بواسطة عدد الكم الدورانى J ، j إذاً الفرق فى الطاقة (ΔE) ولهذه الحالة من الضرورى وضع J = J+1 فى المعادلة (44) عندما:-

$$\Delta E = \frac{h^2}{8\pi^2 I}\,[(J+1)(J+2) - J(J+1)] \qquad -44$$

أو

$$\Delta E = \frac{h^2}{8\pi^2 I}\,2\,(J+1) \qquad -45$$

التردد (γ) لخطوط الطيف التى تقابل لهذا الإنتقال سيعطى بالمعادلة (2) فى الفصل الأول مثل :-

$$\gamma = \Delta E / h$$

أو بالإستبدال للطاقة ΔE من المعادلة (45) :

$$\gamma = \frac{h}{8\pi^2 I}\,2(J+1) \qquad -46$$

والترددات لخطوط الطيف للقيم (J=1, 2,3, ... etc) ستعطى فى الوحدة $h/8\pi^2I$ بالمعادلة 46 مثل (2, 4, 6, 8, etc)، حيث يوجد فرق ثابت للمقدار $2h/8\pi^2I$ بين الترددات المتعاقبة،ولهذا الخطوط فى الطيف الدورانى يجب أن يحيز بالتساوى (مدى).

فى الحقيقة أن الجزىء ثنائى الذرية ليس بالجسيم الصلب الدوار المشدود.فالرباط بين الذرتين يمكن أن يضغط أو يمتد، ولهذا فإن الجزىء الثنائى الذرية يمكن الإشارة إليه بأنه دوار غير مشدود. فالدوران للجزىء يميل لشد الرباط بين الذرات وتوجد طاقة كبيرة للدوران. هذا له تأثير على مستويات الطاقة، مثلما يعطى بواسطة المعادلة (45)، التى تأخذ التعديل التالى :-

$$E = \frac{h}{8\pi^2 I}\,.\,J(J+1) - \frac{h^4}{32\pi^4 I^2 K r^2}\,.\,J^2(J+1)^2 \qquad -47$$