

## الفصل الثامن

### محاور الجسيم المشدود

## The Rigid Rotator

نلفت الإنتباه على دراسة المسألة الدورانية في الفصل الأخير، ومن الأفضل إعتبار المسألة التي تساعد كنموذج للطيف الدوراني لجزء ثنائي 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 لفرة الأيدروجين والتي تعتبر في الفصل التالي.

فلنعبر كتلتين  $(m_1)$ ،  $(m_2)$  بمسافة  $(r_1)$ ،  $(r_2)$  على التوالي وذلك من مركزهما. يدوران حول مركز الكتلة. ومن الأنسب أخذ مركز الكتلة كأساس لإحداثي النظام عندما يدور الجسم المشدود، وربما يمكن تمثيله كما نرى في الشكل (1) السرعة  $(v)$  لجسيم أحادي يمكن كتابته في جزئية سرعته الإحداثية  $v_x$ ،  $v_y$ ،  $v_z$  متوازية للإحداثيات الكارتيذية (المحاور) مثل :-

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

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 يلي :-

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

الطاقة الحركية  $T$ . لجسيم أحادي يمكن إيجاده كما يلي :

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

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

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

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:

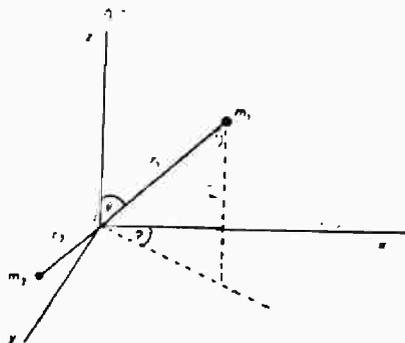


Fig. (1): The rigid rotator

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

$$\text{أو} \quad T = \frac{1}{2} m r^2 (\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2 \theta) \quad - 5$$

وبالنسبة لوجود جسمين 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 :-

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

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

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

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

$$I = \Sigma m_i r_i^2$$

ولذلك فبالنسبة بحالة الجسم الصلب الدوار

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

ومن المعادلة (7) نحصل على :-

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

وبمقارنة المعادلة (8) بالمعادلة (5) بالنسبة لأحادي الجسم نرى أن الجسم الدوار يسلك برغم ذلك هو أى الجسم الأحادي ذات كتلة I وعند مسافة الوحدة من الأصل. وأتينا سوف نقول ان معادلة شرودنجر الثلاثية المحاور بالنسبة لجسيم أحادي :-

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

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

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

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

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

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2\partial}{r \partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \left( \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad - 11$$

وكما هو معلوم أن المسافة (r) ثابتة بالنسبة للجسيم المشدود. تعتبر الوحدة إذا (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 ولناخذ الشكل :-

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

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

ولقد نفترض أن  $\Psi$  ما هى إلا حاصل ضرب دالتين، كل واحد من الدالتين تكون ما هى الإ دالة لو احد فقط من المتغيرات، ومن المفترض أن :-

$$\Psi_{(\theta, \varphi)} = T(\theta) \cdot F(\varphi) \quad - 13$$

حيث يعنى أن  $\Psi$  (أنها دالة لكل  $\theta$ ،  $\varphi$ ) تكون مساوية لنتائج للدالتين (T)، (F) حيث T دالة فقط للدالة ( $\theta$ )، (F) دالة فقط للدالة ( $\varphi$ ). والمعادلة (13) ربما يمكن كتابتها أكثر بساطة كما يلى :-

$$\Psi = T \cdot F \quad - 14$$

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

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

بالمثل بالتفاضل مع الإحتفاظ للزاوية ( $\varphi$ )

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

وبالتفاضل علاوة على ذلك بالإحتفاظ للزاوية ( $\varphi$ ) تنتج :-

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} = T \cdot \frac{d^2 F}{d\varphi^2} \quad - 16$$

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

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

بالضرب بواسطة  $\sin^2 \theta / TF$

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

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

كل جانب للمعادلة (17) يحتوى فقط على متغير واحد. الجانب الأيسر للمعادلة يملك فقط على متغير واحد وهو  $(\theta)$ ، وأما الجانب الأيمن فيحتوى فقط على متغير واحد وهو  $(\varphi)$ . مثلما المعادلة يجب حفظ لكل القيم لكل من  $(\varphi, \theta)$  وكل جانب للمعادلة يجب أن يكون ثابت. ولنرمز لقيمة الثابت بالمقدار  $(m^2)$ ، ويخصص كل جانب للمعادلة (17) لنكتب:-

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

and

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

لأن هذا الفصل ممكن كمصوغ للإفتراض الأصلي المعبر عنه في المعادلة (13). لو المعادلتين (18)، (19) يمكن حلها ليعطيا دوال مقبولة  $F, T$ ، بعدئذ فإن دالة الموجه  $(\psi)$ ، تعين بالمعادلة (13) كنتاج لتلك الدالتين. المعادلتين (18)، (19) ربما تعرف بمعادلات  $T, F$  على التوالي. وأن حلها يمكن سياقها فيما بعد :-

### The F Function

### الدالة (F)

معادلة (F) يمكن أن تكتب على الشكل :-

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

أو

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

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

ودالة إيجن للمعادلة (F) أيضاً تماماً نفس الشكل للمعادلة (6) في الفصل السابع ويمكن التعبير عنها كما يلي :-

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

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

أو في جزئية الأس المعقد :-

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

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

حيث (m)

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

### The T Equation

### T المعادلة

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

ومتعدد الحدود للجيندر للدرجة L في المتغير (q) تكون حادة ممثلة مثل  $P_L(q)$ ، ويمكن إيجادها بواسطة التفاضل للتعبير  $(q^2 - 1)$  عدة مرات ثم بعد ذلك بقسمة الناتج بالعدد  $2^L$ . إذا :

$$P_L(q) = \frac{1}{2^L L!} \frac{d^L (q^2 - 1)^L}{dq^L} \quad - 26$$

ونحصل على المصاحب لمتعدد الحدود للجيندر، Legendre polynomial بتفاضل المقابل لمتعدد الحدود عدة مرات (m) ثم بضرب الناتج  $(1-q^2)^{m/2}$ . مشيراً لمتعدد الحدود المصاحب للجيندر بواسطة  $P^m(q)$  ثم بعد ذلك :-

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

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

$$\begin{aligned} P_2(q) &= \frac{1}{2^2 2!} \frac{d^2(q^2 - 1)^2}{dq^2} \\ &= \frac{1}{8} \frac{d^2}{dq^2} (q^4 - 2q^2 + 1) \\ &= \frac{1}{8} \frac{d}{dq} (4q^3 - 4q) \\ &= \frac{1}{8} (12q^2 - 4) \\ &= \frac{3}{2} q^2 - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

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

فمع العلامات المتقدمة سابقاً التي نأخذ في الحسبان، الحل لمعادلة  $T$  يمكن إعتبار أن :  
وذلك بوضع :-

$$\frac{8\pi^2 l}{h^2} E = \beta \quad - 28$$

في المعادلة 19، المعادلة  $T$  تصبح كما يلي :-

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

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  $(dT/d\theta) \cdot (\sin \theta)$  يجب أن تتفاضل مثل الناتج:

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

والتغير في المعادلة يجب أن يتغير وذلك بوضع

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

الآن  $\frac{dT}{d\theta} = \frac{dT}{dq} \cdot \frac{dq}{d\theta} = \frac{dT}{dq} (-\sin \theta)$  - 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  $(dT/dq) \cdot (\sin \theta)$  كما هو ناتج :-

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

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d}{dq} \cdot \frac{dq}{d\theta} \quad \text{متكرين أن :}$$

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

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

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

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

وبالإستبدال في المعادلة (33)

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

والتعبير بالنسبة  $(dT/d\theta)$ ،  $(d^2T/d\theta^2)$ ، تعطى بواسطة المعادلة (31) والمعادلة

(34) ربما تستبدل في المعادلة (29) لتعطي :-

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

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

$$\sin^2 \theta \frac{dT}{dq^2} - 2 \cos \theta \frac{dT}{dq} + \left( \beta - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) T = 0 \quad - 35$$

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

$$(1 - q^2) \frac{d^2T}{dq^2} - 2q \cdot \frac{dT}{dq} + \left( \beta - \frac{m^2}{1 - q^2} \right) T = 0 \quad - 36$$

لو الآن الكمية  $\beta$  تكون ممثلة بواسطة وضع

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

فالمعادلة (36) تأخذ الشكل :

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

حيث هذه المعادلة تعرف بمعادلة لجيندر المصاحبة (المرافقة)، والحل لتلك المعادلة

تعتبر معادلة لجيندر لمتعدد الحدود المصاحبة  $P_\ell^m(q)$  للدرجة  $(\ell)$  والأس  $(m)$  والتي تعين بواسطة المعادلة (27).

ولنا أن نعيد من المناقشة لمتعدد الحدود المصاحب أن  $(m)$  ليست أكبر من  $\ell$ . 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  $T(\theta)$  والتي تكون الحل للمعادلة  $T$  وربما يمكن تمثيلها

كما يلي :-

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

حيث  $(m)$ ، المعامل لـ  $m$  (بمعنى قيمتها أن تهمل الإشارة)، تكتب بدلاً لـ  $(m)$ . عدد

الكم  $(\ell)$  الناتجة فقط من متعدد الحدود المصاحب، وتأخذ لذلك قيمة موجبة.

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

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

حيث  $J = 0, 1, 2, 3, \dots$

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

والمعادلة (40) يمكن تعادلها لنحصل على :

$$T(\theta) = \sqrt{\frac{(2J+1)(J-|m|)!}{2(J+|m|)!}} P_J^{|m|} (\cos \theta) \quad - 41$$

### The energy levels

### مستويات الطاقة:

الثابت  $\beta$  تعتبر متعلقة لعدد الكم (J) بواسطة المعادلة (37)، حيث  $\beta$  أساسا تكتب في المكان (J).

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

لاول لحظة. على اى حال  $\beta$  متعلقة لطاقة النظام بواسطة المعادلة 28.

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

منذ ذلك. من المعادلة (28)، (42)

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

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

حالة النظام. على اى حال، تتطلب الخصائص لعدد الكم لكل من (J)، (m). وسوف نتذكر ان العلاقة بين هذين لأعداد الكم  $J \geq |m|$ . فعندما  $J=2$ . كمثال -2, -1, 0, +1, +2. m. 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 إذا خمس حالات مختلفة للنظام لهم نفس الطاقة فبالنسبة (J=2) بعدئذ، حيث يوجد إنحلال خماسي للنظام. عموماً، أى قيمة لـ (J) يوجد (2J+1) حالات منحلّة (متلاشياً). ولربما ننتبه هنا أن هذا التلاشي يزال لو الجزيء يوضع في مكان مقناطيسي، ومن هنا. في وجود المجال المغناطيسي خطوط إضافية تظهر في الطيف الدوراني. 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 الدوراني للجزيء ثنائي الذرية. لوستوبين من الطاقة قد عينا بواسطة عدد الكم الدوراني J ، إذا الفرق في الطاقة (ΔE) ولهذه الحالة من الضروري وضع J = J+1 في المعادلة (44) عندما:-

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

أو

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

التردد (γ) لخطوط الطيف التي تقابل لهذا الإنتقال سيعطى بالمعادلة (2) في الفصل

الأول مثل :-

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

أو بالإستبدال للطاقة ΔE من المعادلة (45) :

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

والترددات لخطوط الطيف للقيم (J=1, 2,3, ... etc) ستعطي في الوحدة h/8π<sup>2</sup>I

بالمعادلة 46 مثل (2, 4, 6, 8, etc)، حيث يوجد فرق ثابت للمقدار 2h/8π<sup>2</sup>I بين الترددات المتعاقبة، ولهذا الخطوط في الطيف الدوراني يجب أن يحيز بالتساوي (مدى).

في الحقيقة أن الجزيء ثنائي الذرية ليس بالجسيم الصلب الدوار المشدود. فالرباط

بين الذرتين يمكن أن يضغط أو يمتد، ولهذا فإن الجزيء الثنائي الذرية يمكن الإشارة إليه بأنه دوار غير مشدود. فالدوران للجزيء يميل لشد الرباط بين الذرات وتوجد طاقة كبيرة للدوران. هذا له تأثير على مستويات الطاقة، مثلما يعطى بواسطة المعادلة (45)، التي تأخذ التعديل التالي :-

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