

الفيزياء Physics

لطلاب السنة الأولى صيدلة

الدكتور : محمود الغفري

أستاذ مساعد

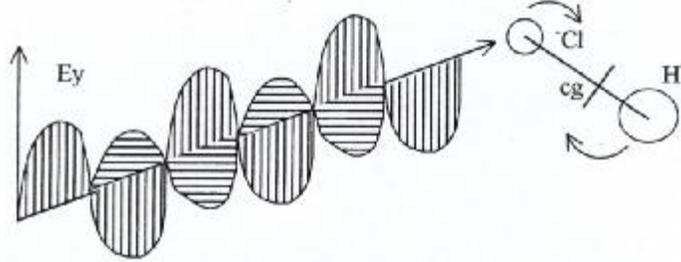
الفصل الثاني

2. الأطياف الجزيئية

1.2. مقدمة

تحدثنا سابقاً عن الأمواج الكهرطيسية التي تنشأ عن الأيونات الكهربية المتحركة. وكي تؤثر موجة كهرطيسية في جزيئة كيميائية يجب أن يكون هناك تناسب بين طول الرابطة الكيميائية وبين طول موجة المركبة الكهربية للموجة الكهرطيسية، أي أن تأثير الموجه الكهرطيسية يأتي من مركبته الكهربية كما يجب أن تكون في مجال ما تحت الأحمر أي أن موجه كهرطيسية في مجال الأشعة فوق البنفسجية لا يمكنها أن تثير دوران جزيئة كيميائية أما الأشعة تحت الحمراء فيمكنها إثارة الدوران في جزيئة كيميائية ثنائية أو اهتزازها. إذا افترضنا أن الموجة الكهرطيسية طول موجتها في المجال تحت الأحمر (أكبر من 700 nm) تتقدم باتجاه جزيئة كيميائية ثنائية الذرة، فما هي الشروط الواجب توافرها في الجزيئة.

يجب أن تمتلك تلك الجزيئة شحنتين كهربائيتين متعاكستين ومتساويتين، والمسافة بينهما صغيرة جداً، وبذلك يمكنها أن تتأثر بالشحنة الكهربية التي تحملها الموجه الكهرطيسية فتجاذب أو تتنافر معها حسب الشكل (1-2)



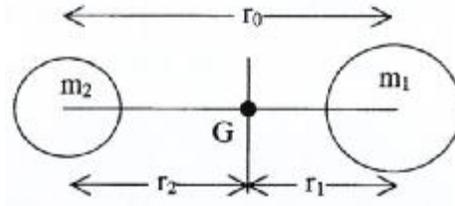
الشكل (1-2). يبين التأثير المتبادل بين موجة كهرطيسية وجزيئة حمض كلور الماء

إن التجاذب بين النوبة الموجبة للمركبة الكهربائية مع ذرة (CI) التي تحمل الشحنة السالبة وتنافرها مع الذرة (H^+) يثير الدوران في الجزيئة، لذلك فإنها ستدور حول مركز ثقلها وبازدياد الدوران تزداد المسافة بين الذرتين. نستطيع القول أن الجزيئة تتلقى أفضل طاقة من المركبة الكهربائية للشعاع الكهرطيسي عندما يكون هناك تعامد بينهما - أي عندما تكون الزاوية قائمة بين المركبة الكهربائية والرابطة الكيميائية بين الكلور والهيدروجين. هناك شيء آخر يجب الإشارة إليه، وهو أن الجزيئة ذات الاستقطاب الدائم أو الاستقطاب المتحرض يمكن أن تتمتع بطيف جزيئي في مجال تحت الأحمر أما الجزيئات المتماثلة الذرة كحالة O_2 ، N_2 أو H_2 فلا يمكن أن يكون لها طيف في مجال ما تحت الأحمر، لأنها لا تثار بأي شحنة كهربائية كانت، وإذا اضطررنا إلى دوامة هذه الجزيئات علينا استخدام طريقة "رامان" الطيفية التي تعتمد على تشتيت الضوء أو تبعثره عند سطح الذرة المدروسة، لكننا لن نتطرق إلى هذا النوع من الدراسة في هذا المؤلف.

نبدأ بدراسة الجزيئات ثنائية الذرة باستخدام نموذج الدوار الصلب أي أن الرابطة صلبة لا تتمدد مع زيادة سرعة الدوران.

2.2. عزم العطالة لجزيئة ثنائية الذرة

نفترض أنه لدينا كتلتين m_1 و m_2 المسافة بين مركزيهما r_0



إن مركز العطالة للكتلتين m_1 و m_2 يقع في النقطة G فإذا افترضنا أن

الجزئية موازية فيمكن أن نكتب:

$$m_1 r_1 = m_2 r_2 \quad (1-2)$$

أيضاً لدينا:

$$r_1 = r - r_2 \quad \leftarrow \quad r_1 + r_2 = r_0 \quad (2-2)$$

بتعويض قيمة r_1 في العلاقة (1-2) نجد:

$$m_1 (r_0 - r_2) = m_2 r_2$$

$$m_1 r_0 - m_1 r_2 = m_2 r_2 \Rightarrow r_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} r_0 \quad (3-2)$$

وبالتناظر نجد:

$$r_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} r_0 \quad (4-2)$$

نعود إلى تعريف عزم العطالة لمجموعة كتلتين تدوران حول محور

يمر من مركز ثقل m_1 و m_2 وعمودي على الرابطة الواصلة بينهما (r_0).

عزم العطالة يساوي:

$$I = m_1 r_1^2 \quad (5-2)$$

وبتعويض قيمتي r_1 و r_2 من العلاقتين (3-2) و (4-2) نجد:

$$I = m_1 \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 r_0^2 + m_2 \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 r_0^2$$

$$I = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} r_0^2 [m_2 + m_1]$$

$$I = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} r_0^2$$

وباستخدام مفهوم الكتلة المختزلة:

$$M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$
$$I = r_0^2 . m \quad (6-2)$$

تلك النتيجة تبين أن قيمة عزم العطالة لمجموعة كتلتين حول محور يمر من مركز ثقلهما يساوي إلى الكتلة المختزنة لهما مضروباً بمربع المسافة الواصلة بينهما.

الطاقة الدورانية: وجدنا سابقاً أن الطاقة الدورانية لنقطة مادية تساوي:

$$E = 1/2.Iw^2 \quad (7-2)$$

حيث أن I : تمثل عزم عطالة الجزيئة المدروسة حول محور دوران معين.

w^2 : تمثل السرعة الزاوية للكتلة المدروس حول محور دوران.

يمكن إعادة كتابة العلاقة (7-2) على الشكل:

$$E = \frac{1}{2I}(Iw)^2 \quad (8-2)$$

تبقى العلاقة (8-2) صحيحة بالنسبة لكتلتين m_1 و m_2 أي عندما نعوض

(I) بقيمتها من العلاقة (6-2) وذلك من أجل كتلة مجهرية كبيرة نوعاً ما.

إذا أردنا أن نطبق العلاقة (8-2) على جسيمات مجهرية كالجزيئات

الكيميائية الدقيقة الأبعاد والسرعة الحركة فإنه يجب أن نكم العلاقة السابقة

(8-2) أي أن نكبح المقدار (Iw) احسب الشرط التالي:

$$(Iw)^2 = J(J+1)\hbar^2$$

$$Iw = \sqrt{J(J+1)}\hbar \quad (9-2)$$

بتعويض (9-2) في العلاقة (8-2) نجد:

$$E_j = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1) \quad (10-2)$$

تمثل الثابتة J سويات التكميم الدورانية، وهي تأخذ قيماً صحيحة:

$$J = 0, 1, 2, 3, \dots$$

يتبين من العلاقة (10-2) أن الطاقة الدورانية لجزيئة ثنائية الذرة تكون مكممة، وهي

تتبع لعزم العطالة (I) للجزيئة، كما تتبع أيضاً قيم الثابتة J (العدد الكمومي

الدوراني)، إذ أن هناك سوية طاقة دورانية لكل قيمة للثابتة (J) حسب الشكل (2-2)

$$\begin{array}{l}
 J=5 \rightarrow E_5 = 15 \frac{\hbar^2}{I} \text{ —————} \\
 J=4 \rightarrow E_4 = 10 \frac{\hbar^2}{I} \text{ —————} \\
 J=3 \rightarrow E_3 = 6 \frac{\hbar^2}{I} \text{ —————} \\
 J=2 \rightarrow E_2 = 3 \frac{\hbar^2}{I} \text{ —————} \\
 J=1 \rightarrow E_1 = 2 \frac{\hbar^2}{I} \text{ —————} \\
 J=0 \rightarrow E_0 = 0 = 0 \text{ —————}
 \end{array}$$

الشكل (2-2). حسابات الطاقات الدورانية لمختلف J

يُحسب فرق الطاقة الدورانية بين سويتين متتاليتين كما يلي:

$$E_j = \frac{\mathbf{h}^2}{2I} J(J+1) \Rightarrow E_1 = \frac{\mathbf{h}^2}{2I} 2$$

$$E_{j+1} = \frac{\mathbf{h}^2}{2I} (J+1)(J+1+1) = \frac{\mathbf{h}^2}{2I} (J+1)(J+2)$$

حساب الفرق:

$$\begin{aligned}
 E_{j+1} - E_j &= \frac{\mathbf{h}^2}{2I} (J+1)(J+2) - \frac{\mathbf{h}^2}{2I} J(J+1) \\
 &= \frac{\mathbf{h}^2}{2I} (J+1)[J+2-j] = \frac{\mathbf{h}^2}{I} (J+1)
 \end{aligned}$$

$$E_{j+2} = \frac{\mathbf{h}^2}{2I} (J+2)(J+3) \Rightarrow E_3 = \frac{\mathbf{h}^2}{2I} 3 \times 4 = \frac{\mathbf{h}^2}{I} 6$$

$$\begin{aligned}
 E_{j+2} - E_{j+1} &= \frac{\mathbf{h}^2}{2I} (J+2)(J+3) - \frac{\mathbf{h}^2}{2I} (J+1)(J+2) \\
 &= \frac{\mathbf{h}^2}{2I} (J+2)[(J+3-j-2)] = \frac{\mathbf{h}^2}{I} (J+2)
 \end{aligned}$$

وهكذا كلما صعدنا في السوية الدورانية نضيف (1) أي يكون الفرق في الطاقة:

$J, (J+1), (J+2), (J+3)$ وهكذا.

يتبين لنا من الشكل أن الصعود أو الهبوط في السويات الدورانية يتم وفق قاعدة الاختيار:

$$\Delta J = \pm 1$$

تطبيق (1):

يحصل الانتقال في السوية الدورانية $J=0 \leftarrow J=1$ بالنسبة لجزيئة CO وفق التواتر $1.15 \times 10^{11} Hz$ ، احسب عزم عطالة الجزيئة وكذلك طول الرابطة CO .

$$E_1 = \frac{h^2}{I} \text{ ومن أجل } J=1 \text{ تساوي}$$

$$E_1 - E_0 = \frac{h^2}{I} = \frac{h^2}{4p^2 I} = hu = \frac{6.626 \times 10^{-34}}{4p^2 \cdot 1.15 \times 10^{11} s^{-1}}$$

$$I = 1.46 \times 10^{-46} Kg \cdot m^2$$

حساب طول الرابطة CO :

- حساب الكتلة المختزلة:

$$= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{(12)(10)}{(12) + (10)} = 5.45$$

$$5.45 \times 1.66 \times 10^{-27} = 9.05 \times 10^{-27} Kg$$

حيث مقلوب عدد أفوكادرو 1.66×10^{-27}

ومن العلاقة $I = Mr^2$ نجد:

$$r = \sqrt{I / m} = \sqrt{\frac{1.46 \times 10^{-46} Kg \cdot m^2}{9.05 \times 10^{-27} Kg}} = 2.02 \times 10^{-10} m$$

تطبيق (2):

يعطى التواتر الفاصل بين خطين متتاليين من طيف دوراني يخص العنصرين ^{35}Cl ،

^{19}F بالقيمة $11.2 GHz$ وهي حدود المسافة الفاصلة بين هاتين الذرتين بالهرتز.

$$\begin{aligned} \text{الحل: يعطى عزم العطالة بالعلاقة} \quad I &= \frac{h}{4p^2u} \\ &= \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}}{4p^2 (11.2 \times 10^9 \text{ S}^{-1})} = 1.5 \times 10^{-45} \text{ kg.m}^2 \end{aligned}$$

أما قيمة المسافة r_0 فهي تساوي:

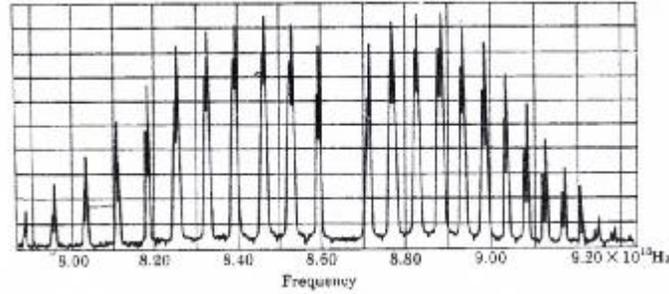
$$r_0 = \sqrt{\frac{(m_1 + m_2)I}{m_1 m_2}} = \sqrt{\frac{(35+19) \times 1.5 \times 10^{-45} \text{ kg.w}^2}{35 \times 19 \times 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}}} = 2.71 \times 10^{-10} \text{ m}$$

ملاحظة 1:

يمكن استخدام جهاز الأطياف ما تحت الحمراء للفصل بين النظائر المختلفة وهذا ما يظهره طيف جزيئية HCl لأنه من المعروف أن ذرة الكلور هي خليط من نظيرين ^{35}Cl و ^{37}Cl ، وحسب الشكل (3-2) نلاحظ أن كل خط طيف مؤلف من ثنائية، خط صغير على يمينه خط أطول وحسب علاقة الطاقة تبين لنا أن الخط الصغير وعلى يمينه خط أطول وحسب علاقة الطاقة تبين لنا أن الخط الصغير اليساري يمثل النظير 37 أما الخط الطويل فيمثل ذرة الكلور 35.

$$E_J(^{35}Cl) = \frac{h^2}{2mr_0^2} J(J+1) \quad , \quad E_J(^{37}Cl) = \frac{h^2}{2mr_0^2} J(J+1)$$

$$E_J(^{35}Cl) > E_J(^{37}Cl)$$



الشكل (3-2). يمثل طيف من الأحمر لجزيئة HCl من خليط طبيعي يحتوي على نظيري الكلور 35 و 37

2.3. فرضية الهزاز التوافقي

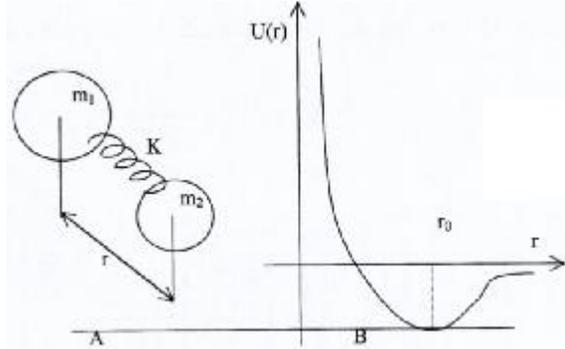
يمكن تعريف الهزاز التوافقي على أنه نابض خطي يستطيل استطالات متساوية تحت تأثير قوى متساوية. فإذا تحدثنا عن ثمة تشابه بين الرابطة الكيميائية والنابض الخطي فإنه يمكننا استخدام قوانين النوابض في المرحلة الخطية من استطالتها وذلك فيما يخص تواتر اهتزازها وثابتة مرونتها.

الشكل (B4-2) تمثل جزيئة ثنائية الذرة m_1 و m_2 يربط بينهما رابطة كيميائية ممثلة بنابض ثابت مرونته هو الثابتة (K). أما المسافة بينهما فهي تتغير مع ازدياد طاقة المرونة حسب المنحني في الشكل (4-2) يعطى تواتر اهتزاز النابض أو الرابطة الكيميائية بالعلاقة:

$$u = \frac{1}{2p} \sqrt{K / m} \quad (11-2)$$

حيث μ الكتلة المختزلة للجزيئة ثنائية الذرة وتمثل بالعلاقة:

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (12-2)$$



الشكل (4-2). طاقة اقتراب ذرة من أخرى

أما الطاقة الاهتزازية المكممة فتعطى بالعلاقة:

$$E_v = (v + 1/2). h u \quad (13-2)$$

حيث (ν) العدد الكمي الاهتزازي:

ويأخذ قيماً صحيحة $\nu=0, 1, 2, 3, \dots$

- نلاحظ من العلاقة (2-13) أن الطاقة الاهتزازية للجزيئية لا يمكن أن تتعدم حتى لو أصبحت $\nu=0$ ، فإنه يتبقى لنا الحد:

$$E_\nu = \frac{h.u}{2}$$

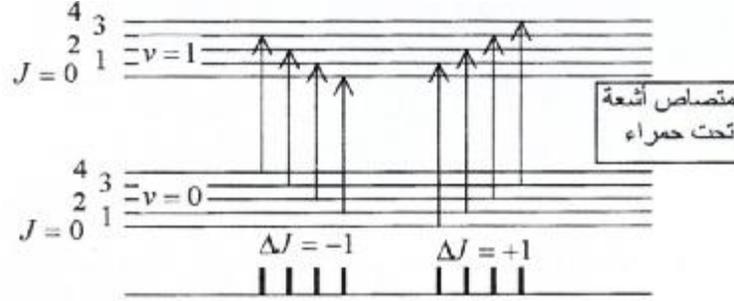
وذلك على العكس من الطاقة الدورانية التي تتعدم بانعدام العدد الكمي الدوراني. هذا يعني أنه عندما تبدأ جزيئية كيميائية ثنائية الذرة بالدوران فإن الرابطة تبدأ بالاستطالة وتزداد قيمتها هذه عندما يصبح دور الدوران مساوياً لدور الموجه الكهرطيسية المغذية له، فإذا تغير الدوران السابقان عن بعضهما لأي سبب فإن الجزيئية تبدأ بالاهتزاز.

- **ملاحظة هامة:** إن ازدياد قيمة العدد الكوانتي الاهتزازي يؤدي إلى ازدياد اهتزاز الجزيئية الكيميائية إلى سوية تنقسم فيها هذه الرابطة، وهذا الشيء لا يحدث مع الدوران مهما ازدادت قيمته.

- شيء آخر يجب معرفته وهو أن الجزيئية الكيميائية ثنائية الذرة يمكن أن تدور حول ثثة محاور Z, Y, X ويكون امتصاصها في هذه الحالة متساوياً أي أن الدورانات متكافئة طاقياً، وثمة للطاقة دوران رابع قليل الامتصاص للطاقة وهو دوران الجزيئية حول ذاتها وهذا الدوران يعتبر مهملاً الطاقة _ أما الاهتزاز في الجزيئات ثنائية الذرة فهو واحد وله قيمة طاقة واحدة من أجل قيمة ثابتة للعدد الكوانتي (ν) أما قاعدة الاختيار الاهتزازية فهي أيضاً القاعدة الاختيار الدورانية وتساوي:

$$\Delta\nu = \pm 1$$

في الشكل (5-2) مثلنا السويات الدورانية ثم الاهتزازية ثم التداخل بينهما ويظهر لنا من الشكل (5-2) أن الفرق بين السويات الاهتزازية أكبر من الفرق في السويات الدورانية.



الشكل (5-2). السويات الدورانية والاهتزازية لجزيئة

2.4. السويات الاهتزازية الدورانية

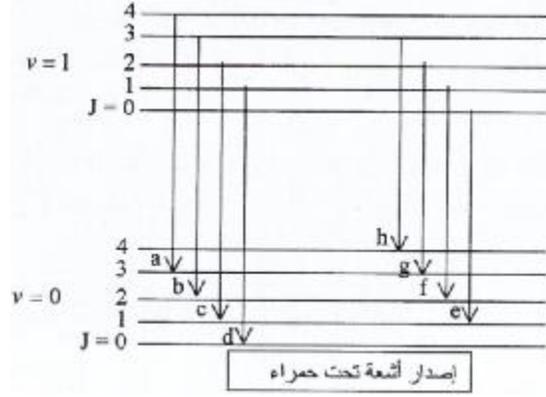
تحدثنا سابقاً أن بداية التهييج للجزيئات الكيميائية بأموج ما تحت الأحمر تثير الدوران ثم يتحول الدوران إلى اهتزاز (كما بينا سابقاً) وهكذا ترتفع الجزيئة في تهيجها دورانياً واهتزازاً وفق قاعدتي الاختيار:

$$\Delta J = \pm 1 \quad \Delta v = \pm 1$$

أما صيغة الطاقة الاهتزازية الدورانية فهي من الشكل

$$E_{v,J} = \frac{h^2}{2I} J(J+1) + (v + 1/2).h.u$$

نستخدم قواعد الاختيار $\Delta J = \pm 1, \Delta v = \pm 1$ عندما نهيج في جزيئة سوية اهتزازية واحدة، فالذي يحدث عند الدوران هو إمكانية زيادة قيمة السوية أو نقصانها، أي قد تزداد سويات دوران الجزيئة سوية واحدة، أو أن ينقص أيضاً سوية واحدة، وذلك حسب الشكل (6-2).



الشكل (6-2). تغير مستويات الاهتزاز والدوران

أي أننا نرفع التهييج اهتزازياً سوية واحدة والدوران أيضاً تزداد قيمته أو تنقص بمقدار سوية واحدة.

يبين الشكل (4-2) إمكانية تهيج جزيئة كيميائية وفق قاعدتي الاختيار:

$$\Delta J = \pm 1 \quad \Delta v = \pm 1$$

تطبيق: اهتزاز جزيئة CO:

تمتص جزيئة CO التواتر $6.42 \times 10^{13} \text{ Hz}$ من أجل اهتزازها الأساسي.

احسب ثابتة مرونة هذه الرابطة CO.

الحل: يمكن الاهتزاز الأساس بين السويتين $v = 1 \leftarrow v = 0$

$$\Delta E = \frac{3}{2} hu - \frac{1}{2} hu = hu \quad \text{أما الفرق فيساوي:}$$

$$m = \frac{m_c \cdot m_o}{(m_c + m_o) N} \cdot \text{أما الكتلة المختزلة فتساوي}$$

حيث N عدد أفوغادرو.

وبذلك تكون الكتلة المختزلة مساوية:

$$m = \frac{12 \times 6}{(12 + 6) 6.022 \times 10^{26}} = 1.14 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

الطلب الثاني: ما هي السعة الاهتزازية العظمى.

الحل: تعطى طاقة الاهتزاز مساوية:

$$E_{el} = \frac{1}{2} K . A^2$$

حيث A تمثل سعة الاهتزاز وبذلك نحصل على المساواة التالية:

$$\frac{1}{2} K . A^2 = \frac{h}{4p} \sqrt{K / m}$$

$$A^2 = \frac{h}{2p} \sqrt{\frac{1}{K . m}} = \frac{6.626 \times 10^{-34}}{2p} \sqrt{\frac{1}{1.85 \times 10^3 \times 1.14 \times 10^{-26}}}$$

$$A = 4.97 \times 10^{-12} m$$

تطبيق (2): تمتص جزيئة HCl الغازية بشدة طول الموجة $3.465 \mu m$ ما هي قيمة ثابتة القوة لهذه الجزيئة.

الحل: إذا اعتبرنا رابطة HCl توافقية فنكون طاقة الاهتزاز مساوية:

$$E_v = (v + 1/2) h.u$$

أما الطاقة الاهتزازية التي تمتصها الجزيئة بين سويتين متتاليتين فتساوي:

$$\Delta E_v = (v + 1 + 1/2) h.u - (v + 1/2) h.u = h.u = \frac{h}{2p} . w$$

إذا كانت تلك الطاقة تساوي طاقة الإشعاع الفوتونية فيكون:

$$h\nu = h \frac{c}{l} = \frac{h}{2p} . w \Rightarrow w = 2p \frac{c}{l} = \frac{2p (3 \times 10^8)}{3.456 \times 10^{-6} m}$$

أما الكتلة المختزلة لهذه الجزيئة HCl فتساوي:

$$m_{HCl} = \frac{m_H . m_{Cl}}{m_H + m_{Cl}}$$

وبما أن التواتر الزاوي (نبض الحركة) يساوي:

$$w = \sqrt{K / m}$$

أما إذا أخذنا بقاعدة الاختيار $\Delta J = -1$ فيصبح الانتقال من J إلى $J-1$ وهكذا

يكون شكل علاقة الطاقة:

$$\Delta E = \mathbf{h.w} + \frac{\mathbf{h}^2}{2I}[-2J] \quad J = 1, 2, 3 \dots$$

تعطى طاقات الانتقالات الاهتزازية الدورانية بالقيم:

$$\begin{aligned} a &= 0.29 + 2 \times 10^{-3} \text{ ev} & e &= 0.29 - 0.5 \times 10^{-3} \text{ ev} \\ b &= 0.29 + 1.5 \times 10^{-3} \text{ ev} & f &= 0.29 - 1 \times 10^{-3} \text{ ev} \\ c &= 0.29 + 1 \times 10^{-3} \text{ ev} & g &= 0.29 - 1.5 \times 10^{-3} \text{ ev} \\ d &= 0.29 + 0.5 \times 10^{-3} \text{ ev} & h &= 0.29 - 2 \times 10^{-3} \text{ ev} \end{aligned}$$

فستطيع إيجاد ثابتة مرونة الرابطة.

$$K = \mathbf{mw}^2 = (1.61 \times 10^{-27} \text{ kg})(5.44 \times 10^{14} \text{ s}^{-1})^2 = 476 \text{ N / m}$$

تطبيق (3): بالاستفادة من التطبيق السابق أوجد الطاقة الاهتزازية لمول واحد

من جزيئات HCl الحقيقية في درجة حرارة الصفر المطلقة.

الحل: في درجة الحرارة الصفر المطلق تكون الطاقة الاهتزازية في أدنى قيمة

لها لأن $(v=0)$ وبالاستفادة من عدد أفوغادرو نكتب:

$$\begin{aligned} E_v &= N_0 (v + 1/2) \mathbf{h.w} \\ &= N_0 (1/2 \mathbf{h.w}) \\ &= (6.023 \times 10^{23}) 1/2 (1.055 \times 10^{-34}) 5.44 \times 10^{14} \text{ J.s} \\ E_v &= 5.44 \times 10^{11} \text{ J} \end{aligned}$$

تطبيق (4):

جزيئية N_2 مثارة إلى السوية الاهتزازية $v=1$ تعود إلى السوية $v=0$ ما هي طاقة الإصدار الفوتونية المرافقة لعملية الإصدار (اعتبر أن لكل سوية اهتزازية أربع

سويات دورانية ومن أجل N_2 تكون الطاقة الدورانية $2.5 \times 10^{-4} \text{ ev} = E_r = \frac{\mathbf{h}^2}{2I}$

كذلك:

$$h.w = 0.29ev$$

الحل: تعطى سوية الطاقة الاهتزازية الدورانية بالعلاقة:

$$E_{v,T} = h.w(v + 1/2) + \frac{h^2}{2I} J(J + 1)$$

فإذا أخذنا قاعدة الاختيار $\Delta v = -1$ أي حالة الإصدار فإننا نحصل على العلاقة:

$$\Delta E = h.w + \frac{h^2}{2I} [J'(J' + 1) - J(J + 1)]$$

حيث J هي سويات دورانية توافق السوية الاهتزازية $v=0$

أما J' فهي سويات دورانية توافق السوية الاهتزازية $v=1$

إذا أخذنا بقاعدة الاختيار $\Delta v = +1$ سيكون لدينا $J'(J + 1)$ عند الانتقال من J إلى $J+1$ وهذا يعطينا:

$$\Delta E = h.w + \frac{h^2}{2I} [2(J + 1)] \quad J = 0, 1, 2, 3, \dots$$

سوف نكتفي في دراستنا الحالية بالجزيئات ثنائية الذرة لأن الجزيئات عديدة الذرة يدخل فيها اعتبارات أخرى ودراسات رياضية خاصة بنظرية الزمرة، وهذا المؤلف لا يتناول الموضوع بتلك السوية الرياضية والفيزيائية، ويمكن ذكر أهم آثار الأشعة تحت الحمراء في المجال الحيوي.

2.5. التأثير الحيوي للأشعة تحت الحمراء

كل جسم يشع أمواجاً حرارية نسميه بأنه مشع للأمواج ما تحت الحمراء مثال ذلك أشعة الشمس عند الغروب وكذلك السخانات الحرارية وتعتبر مادة الأجر أهم مادة منتجة للأشعة ما تحت الحمراء بعد أن تتلقى تسخيناً.

يتأثر جلد الإنسان وخاصة الأوعية الدموية بالأشعة ما تحت الحمراء ويكون تأثيرها بطفح جلدي آني سببه انتفاخ الأوعية الدموية نتيجة دوران جزيئات الماء وغيرها في الدم واهتزازها مما يؤدي إلى جريان بشكل أسرع وبذلك يكون العلاج لحالات التشنج العضلي والاحتقان. كما تقوم الأشعة ما تحت الحمراء بدور هام في اندمال الجروح وتسكين آلام المفاصل ولكن يجب أن لا ننسى أن لها تأثيراً سيئاً في حالات العصاب الوجهي وحالات أخرى.

2.6. الأشعة فوق البنفسجية

يمكن أن نسمى الأمواج التي أطوالها بين $100-400\text{ nm}$ أنها أمواج فوق البنفسجية تلك الأمواج تحمل طاقة أكبر من طاقة الضوء المرئي، وتلك الطاقة كافية لإثارة الإلكترونات π غير المتوضعة لذلك نقول إن أجهزة الطيف التي تعمل بهذه الأشعة تفيد في كشف الحلقات العطرية وكذلك مركبات الزيوت التي تحمل روابط مضاعفة مترافقة تعتبر أشعة الشمس الصباحية غنية بالإشعاعات فوق البنفسجية ويقوم الأوكسجين في أعالي الجو بامتصاص أشعة UV ذات الطول الموجي (190 nm) معطياً الاصطناع الضوئي للأوزون O_3 .

2.7. الآثار القاتلة للجراثيم

للأمواج UV ذات الطول (265 nm) فعالية شديدة ضد البكتريا لذلك نجد أن المصابيح الغنية بهذا الطول الموجي تفيد في قتل الجراثيم، أما الأمواج ذات الطول الموجي (300 nm) فلها تأثير مرضي في الأنسجة الحية كما تسبب الأشعة UV في تآلق الأسنان وبياضها.