

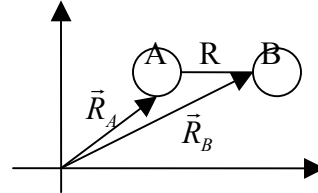
ספקטרום רוטציה:

נבחן תחילה מערכת של שני אטומים, מולקולה דו אטומית:

נסתכל תחילה על ההמילטוניאן הגרעיני של

מולקולה דו אטומית:

$$H_{nuc} = -\frac{\hbar^2}{2m_A} \nabla_A^2 - \frac{\hbar^2}{2m_B} \nabla_B^2 + E(R)$$



כאשר  $E(R)$  נקבע ע"י המשוואה האלקטרונית.

אם כך משוואת שרדינגר הגרעינית היא:

$$\hat{H}_{nuc} \Psi_{nuc}(\vec{R}_A, \vec{R}_B) = E \Psi_{nuc}(\vec{R}_A, \vec{R}_B)$$

האנרגיה, שהיא הערך העצמי של ההמילטוניאן הגרעיני, כוללת בתוכה תרומה גרעינית ואלקטרונית. משוואה שרדינגר הגרעינית מתארת תנועה בשישה ממדים ולכן לשם פישוט, נעבור לקואורדינטות של תנועה יחסית, ומרכז מסה:

$$\vec{R} = \vec{R}_B - \vec{R}_A ; \vec{S} = \frac{\vec{R}_B m_B + \vec{R}_A m_A}{m_B + m_A} ; M = m_B + m_A ; \mu = \frac{m_B m_A}{m_B + m_A}$$

$$H_{tr} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_S^2 ; H_{int} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_R^2 + E(R)$$

$$\hat{H}_{nuc} = H_{tr} + H_{int}$$

כפי שכבר למדנו כאשר יש לנו המילטוניאן שניתן לפרוק לסכום המילטוניאנים בלתי תלויים,

פונקצית הגל שלנו היא מכפלה של פונקציות, ומכאן שפונקצית הגל שלנו היא:

$$\Psi_{nuc} = \Psi_{tr}(\vec{S}) \Psi_{int}(\vec{R})$$

אם כך אנו מקבלים שתי משוואות בלתי תלויות:

$$H_{tr} \Psi_{tr} = E_{tr} \Psi_{tr}$$

$$H_{int} \Psi_{int} = E_{int} \Psi_{int}$$

ומכאן שהאנרגיה הכללית של המערכת היא סכום האנרגיות של כל אחת מהמשוואות הנ"ל:

$$E = E_{tr} + E_{int}$$

ההמילטוניאן  $H_{tr}$  מאפיין בעיה של תנועת המולקולה במרחב, ולכן המשוואה הטרנסלציונית כלל לא מעניינת אותנו. זה משאיר אותנו עם המשוואה של דרגות החופש הפנימיות, המלמדת אותנו על מבנה המולקולה:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_R^2 + E(R) \right) \Psi_{\text{int}}(\vec{R}) = E_{\text{int}} \Psi_{\text{int}}(\vec{R})$$

קיבלנו משוואה עם 3 מימדים, שלוש דרגות חופש. לשם פישוט הבעיה נעבור לקואורדינטות ספריות:

$$\left. \begin{aligned} R_x &= R \sin \theta \cos \varphi \\ R_y &= R \sin \theta \sin \varphi \\ R_z &= R \cos \theta \end{aligned} \right\} \Rightarrow \Psi_{\text{int}} = \Psi_{\text{vib}}(R) \Psi_{\text{rot}}(\theta, \varphi)$$

$$\rightarrow H_{\text{int}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{R^2} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + E(R)$$

על מנת לפתור את המשוואה הנ"ל נבצע קרוב גוף צפיד. בקרוב זה אנו מניחים שהמרחק R הוא מרחק ש"מ של המולקולה, כלומר נניח כי המולקולה לא מבצעת ויברציות וזה נובע משתי סיבות עיקריות- או שהמולקולה קשיחה או שהיא זזה כ"כ מהר שלא רואים את התזוזה הויברציונית. אם כך נפריד את ההמילטוניאן לשניים:

$$H_{\text{int}} = H_{\text{rot}} + H_{\text{vib}}$$

$$H_{\text{rot}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{R^2} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$H_{\text{vib}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} + E(R)$$

נציב את ההמילטוניאן במשוואת שרדינגר ואנו מקבלים שתי משוואות בלתי תלויות: המשוואה הויברציונית:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} + E(R) \right) \Psi_{\text{vib}} = E_{\text{vib}} \Psi_{\text{vib}}$$

בשביל המשוואה הרוטציות נגדיר אופרטור חדש:  $\hat{J}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$

הוא אופרטור התנע הזויתי. ומכאן שהמשוואה הרוטציונית היא:  $\frac{\hat{J}^2}{2\mu R_e^2} \Psi_{\text{rot}} = E_{\text{rot}} \Psi_{\text{rot}}$

נערוך סיכום ביניים קטן:

את משוואת שרדינגר בשישה מימדים חילקנו לשתי משוואות:

1. המשוואה הטרנסלטורית.

2. המשוואה הפנימית.

את המשוואה הפנימית, בקרוב גוף צפיד, חילקנו גם כן לשתי משוואות:

1. המשוואה הויברציונית- משוואה במימד אחד.

2. המשוואה הרוטציונית, משוואה בשני מימדים.

אם המולקולה לינארית מספר דרגות החופש הויברציוניות של המערכת הוא  $3N - 5$  ומספר דרגות החופש הרוטציוניות הוא 2 (מערכת דו מימדית).

אם המולקולה לא לינארית מספר דרגות החופש הויברציוניות של המערכת הוא  $3N - 6$  ומספר דרגות החופש הרוטציוניות הוא 3 (מערכת תלת ממדית).

נחזור למשוואה הרוטציונית. נגדיר משתנה נוסף, מומנט ההתמד:

$$I = \mu R^2$$

אם כך המשוואה הרוטציונית היא:

$$\frac{\hat{j}^2}{2I} \Psi_{rot}(\theta, \varphi) = E_{rot}(\theta, \varphi)$$

פתרנו משוואה דומה למשוואה זו, היא המשוואה הזוויתית, פרט לכך שבמשוואה שלנו חילקנו ב-  $2I$  ולכן רק הערך העצמי של המשוואה משתנה ולא הפונקציות העצמיות ומכאן:

$$\Psi_{rot}^{J,|M|} = Y_J^{|M|}(\theta, \varphi) \propto P_J^{|M|}(\cos\theta) e^{iM\varphi} \quad J = 0, 1, 2, \dots, \infty \quad M = -J, \dots, 0, \dots, J$$

והאנרגיה, הערך העצמי של המשוואה הוא:

$$E_{rot}^J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$$

ביחידות של  $cm^{-1}$  ניתן לכתוב את הביטוי לאנרגיה כך:

$$E_{rot}^J = BJ(J+1)$$

כאשר:

$$B = \frac{h}{8\pi^2 c I}$$

B נקרא קבוע הרוטציה, והוא זה שמבדיל בין המולקולות השונות. ניתן לראות כי המסה משפיעה על האנרגיה הרבה יותר מאשר המרחק בין האטומים. ולכן המסה גם תשפיע הרבה על ספקטרום הרוטציה.

$\frac{M=-2}{4B \uparrow}$	$\frac{M=-1}{4B \uparrow}$	$\frac{M=0}{4B \uparrow}$	$\frac{M=1}{4B \uparrow}$	$\frac{M=2}{4B \uparrow}$	$J=2$	$E=6B$	קיבלנו מערכת עם רמות האנרגיה, ומצבים מנוונים. למעשה מה שאותנו מעניין בספקטרוסקופיה הוא ההפרש בין הרמות
$\frac{M=1}{2B \downarrow}$	$\frac{M=0}{2B \downarrow}$	$\frac{M=-1}{2B \downarrow}$	$J=1$	$E=2B$			
$2B \downarrow$	—	$J=0$	$E=0$				

ההפרש ניתן ע"י הביטוי:

$$\Delta E_J = E_{J+1} - E_J = 2B(J+1)$$

ניתן לראות הן עפ"י המשוואה הנ"ל והן עפ"י שרטוט רמות האנרגיה כי המרווחים בין הרמות הולכים וגדלים ככל שעולים באנרגיה. נרצה כעת לראות איזה מעברים מותרים ואילו לא. כדי שיהיה מעבר ספקטרוסקופי בין רמות אנרגיה האינטגרל הבא צריך להתקיים:

$$\langle \Psi_{J',M'} | \hat{\mu} | \Psi_{J,M} \rangle \neq 0$$

נכתוב מפורשות את האינטגרל בכיוון ציר Z:

$$\hat{\mu}_x = \mu_0 \sin \theta \cos \varphi \quad \hat{\mu}_y = \mu_0 \sin \theta \sin \varphi \quad \hat{\mu}_z = \mu_0 \cos \theta$$

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi N_{J'} P_{J'}^{|M'|}(\cos \theta) e^{-iM'\varphi} \hat{\mu}_z N_J P_J^{|M|}(\cos \theta) e^{-iM\varphi} =$$

$$= \mu_0 N_{J'} N_J \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-i(M-M')\varphi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_{J'}^{|M'|}(\cos \theta) \cos \theta P_J^{|M|}(\cos \theta)$$

כללי הברירה הם :

1. ע"מ שהאינטגרל לא יתאפס, למולקולה צריך להיות מומנט דיפול קבוע, כלומר  $\mu_0 \neq 0$ .
2. נבחן את האינטגרציה התלויה ב-  $\varphi$  :

$$\int_0^{2\pi} e^{i(M-M')\varphi} d\varphi = \frac{1}{i(M-M')} e^{i(M-M')\varphi} \Big|_0^{2\pi} = \begin{cases} \frac{1}{i(M-M')} (1-1) = 0 & M \neq M' \\ \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi \neq 0 & M = M' \end{cases}$$

כלומר האינטגרל מתאפס כאשר  $M \neq M'$  ולכן, כדי שאינטגרל כולו יהיה שונה מאפס נדרוש שוויון בין שני המספרים הקוונטים הללו. למעשה זהו האינטגרל המלמד אותנו על האורטוגונליות של הפונקציה.

נסכם כלל זה ונאמר כי מעבר יכול להתרחש רק בין אותם ערכים של  $M$ , ובצורה מתמטית :

$$\Delta M = 0$$

3. נוסחת הרקורסיה של פולינומי לז'נדר :

$$\cos \theta P_J^{|M|} = C_{J-1} P_{J-1}^{|M|} + C_{J+1} P_{J+1}^{|M|}$$

נציב ביטוי זה באינטגרל הכללי :

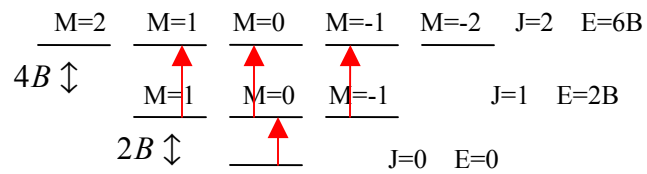
$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta P_{J'}^{|M|} (C_{J-1} P_{J-1}^{|M|} + C_{J+1} P_{J+1}^{|M|}) = C_{J-1} \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_{J'}^{|M|} P_{J-1}^{|M|} + C_{J+1} \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_{J'}^{|M|} P_{J+1}^{|M|}$$

אנו דורשים שפתרון האינטגרל יהיה שונה מאפס, כלומר ששני האינטגרלים שקיבלנו יהיו שונים זה מזה. אלו יהיו שווים זה מזה רק כאשר יתקיימו שני התנאים הבאים :  $J' = J + 1$  או  $J' = J - 1$ . במילים אחרות האינטגרלים יתאפסו כאשר הם אורתוגונליים זה לזה. ולכן

$$\Delta J = \pm 1$$

אנו נדרוש שהם לא יהיו אורתוגונליים. כלומר הכלל הוא :

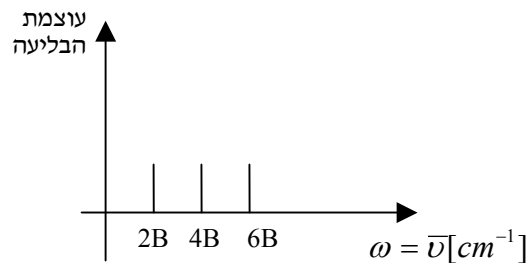
נצייר כעת את המעברים בסכמת רמות האנרגיה :



המעברים המתוארים בשרטוט הם מעברי בליעה, כאשר  $\Delta J = 1$ . בפליטה התמונה זהה אם כי הפוכה.

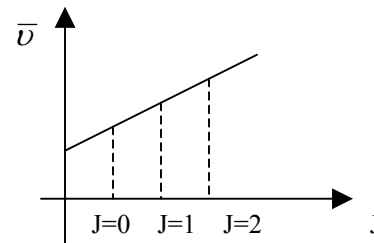
להלן תאור סכמטי של ספקטרום רוטציה:

נשאלת השאלה מה ניתן לחלץ מהספקטרום. מהספקטרום נוכל לדעת מה התדירות של כל פיק, כמו כן ניתן לחלץ את קבוע הרוטציה B מהספקטרום ע"י בניית גרף של התדירות כפונקציה של J:



$$\omega = \bar{\nu} = \Delta E = 2B(J+1)$$

עושים התאמה לינארית לנקודות שעל הגרף, והשיפוע המתקבל שווה ל-2B. החיתוך עם ציר ה-Y צריך להיות גם כן 2B. כדי לחלץ את B צריך לחלץ את השיפוע (בו יש שגיאה קטנה יותר מזו שבנקודת החיתוך).



מקבוע הרוטציה ניתן לחלץ מידע רב על המולקולה שכן:  $I = \mu R_e^2$ ;  $B = \frac{h}{8\pi^2 I c}$

ומכאן שמדיעת קבוע הרוטציה אנו יכולים לדעת את מרחק ש"מ של המולקולה.

אכלוס רמות האנרגיה של המולקולה נקבע עפ"י התפלגות בולצמן, והתפלגות זו תקבע גם את עוצמת המעברים בספקטרום. הסיכוי למצוא את כל המערכת ברמה J ניתן ע"י הביטוי:

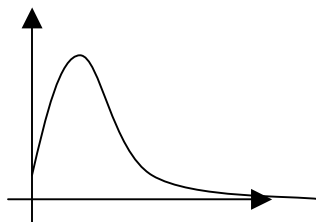
$$P_J = (2J+1)e^{-E_J/kT}$$

סיכום כל מצב כולל המצבים המנוונים.

אם כך ההתפלגות בטמפרטורה נתונה היא אקספוננציאלית:

$$P_J = \frac{e^{-\beta E_J} (2J+1)}{Q} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Q הוא קבוע הנרמול, פונקציית החלוקה.  
וזה צורת ההתפלגות:



נרצה למצוא את J שבו הפונקציה מקבלת מקסימום, כלומר את המצב האנרגטי בו האיכלוס הוא המקסימלי. במילים אחרות אנו מחפשים את המקסימום של הפונקציה.

$$\frac{\partial P_J}{\partial J} = \frac{1}{Q} 2e^{-BJ(J+1)/kT} - \frac{(2J+1)^2 B}{Q kT} e^{-BJ(J+1)/kT} = 0$$

$$\frac{1}{Q} e^{-BJ(J+1)/kT} \left( 2 - (2J+1)^2 \frac{B}{kT} \right) = 0 \rightarrow (2J+1) = \frac{2kT}{B}$$

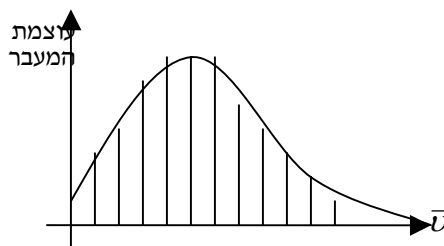
$$2J+1 = \sqrt{\frac{2kT}{B}} \rightarrow J_{\max} = \left( \frac{kT}{2B} \right)^{1/2} - \frac{1}{2}$$

ככל שהטמפרטורה יותר גבוהה  $J_{\max}$  יותר גדול, כלומר יותר קל לאכלס מצבים יותר גבוהים אנרגטית. כמו כן ככל שקבוע הרוטציה B יותר קטן, המרווח בין המצבים הרוטציוניים קטן וישנה אפשרות לקבל אכלוס גבוה יותר. ולכן הספקטרום יראה בצורה הבאה:

ואז יש שני גדלים פיזיקליים אותם ניתן להוציא מהספקטרום:

1. B- ואז גם את מרחק ש"מ.
2. את הטמפרטורה של המולקולה,

מתוך  $J_{\max}$



בשנת 1949 קבוצה של מדענים חקרו את ספקטרום הרוטציה של המולקולה O-C-S וגילו את המעברים הבאים:

$J \rightarrow J+1$	$\bar{\nu}$ [Megacycles/sec]	
$0 \rightarrow 1$		

1 → 2	24,325.92	4B
2 → 3	36,488.82	6B
3 → 4	48,651.64	8B
4 → 5	60,814.08	10B

הם עשו ממוצעים בין המעברים וקיבלו את B באופן ממוצע:

$$\tilde{B} = \frac{12162.7}{2} \frac{10^6}{3 \times 10^{10}} = 0.20285 \text{ cm}^{-*}$$

זהו איבר של מעבר יחידות.

מתוך קבוע זה חישובו הם את מומנט ההתמד של המולקולה:

$$B = \frac{h}{8\pi^2 Ic} \rightarrow I = \frac{h}{8\pi^2 Bc} = 138 \times 10^{-40} \text{ gr} \cdot \text{cm}^2$$

מומנט ההתמד של מולקולה זו יהיה תלוי בשני מרחקי הקשר שקיימים במולקולה. למעשה מדענים אלו גילו כי בכל פעם שנצפה מעבר היו למעשה שני מעברים. דבר זה נובע מכל שיש שתי מולקולות בעלות איזוטופים שונים של גופרית, ואז המסות שונות. אם המסות שונות מומנט ההתמד הוא שונה. ואכן אחרי שמדדו את עוצמות הפיקים הצמודים ראו שזה מתאים ליחס המסות. בקרוב בורן אופנהיימר המרחק בין הגרעינים אינו תלוי בגרעינים אלא תלוי באלקטרונים. לכן לאיזוטופים שונים יהיה את אותו מרחק שיווי המשקל. וכך אנו מקבלים שתי משוואות עם שני נעלמים, משוואת מומנט התמד עבור כל פיק.

$$I = \frac{m_1 m_0 R_1^2 + m_1 m_2 R_1^2 + m_2 m_0 R_2^2 + m_1 m_2 R_2^2 + 2m_1 m_2 R_1 R_2}{M}$$

$$M = m_1 + m_2 + m_0$$

ומתוך שתי משוואות שלו אנו מקבלים את שתי מרחקי שיווי המשקל, את מרחק הקשר. ואכן כאשר עובדים על מולקולות לינאריות ניתן להוציא את מרחק הקשר מנתוני הספקטרום, ע"י איזוטופים כפי שתיארנו עד כה.

אם היינו עושים את אותו התהליך עבור HCl ו-DCI היינו מקבלים:

$$\left. \begin{aligned} B_{HCl} &= \frac{h}{8\pi^2 \mu_{HCl} R_e^2} \\ B_{DCI} &= \frac{h}{8\pi^2 \mu_{DCI} R_e^2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{B_{HCl}}{B_{DCI}} = \frac{\mu_{HCl}}{\mu_{DCI}} = \frac{2 \times 35}{1 \times 35} \approx 2$$

כלומר קבועי הרוטציה הם ביחס של 1:2.

רוטור לא צפיד:

עד עכשיו הנחנו שהרוטור שלנו הוא צפיד. כעת נבחן את מה שקורה באמת- כלומר שהמולקולות לא מתנהגות כגוף צפיד. כשהמולקולה מסתובבת, הכוחות המאזנים זה את זה הם הכוח הצנטריפוגלי וכוח הקפיץ:  $k(r - r_0) = \mu\omega^2 r$ . ככל שגוף לא צפיד יסתובב מהר יותר, הקפיץ ימתח יותר. נרצה לרשום ביטוי לאנרגיה הכללית של מולקולה ולהכניס את העובדה שהמולקולה נמתחת. האנרגיה

$$E = \frac{1}{2}I\omega^2 + \frac{1}{2}k(r - r_0)^2 \quad \text{הקלאסית של רוטור:}$$

$$k(r - r_0) = \mu\omega^2 r \rightarrow (r - r_0) = \frac{\mu\omega^2 r}{k} \quad ; \quad I = \mu r^2 \quad \text{נזכיר כי}$$

$$E = \frac{1}{2}I\omega^2 + \frac{(\mu\omega^2 r)^2}{2k} = \frac{1}{2}I\omega^2 + \frac{1}{2} \frac{(I\omega^2)^2}{kr^2} \quad \text{נציב זאת חזרה באנרגיה:}$$

אם נעבור למונחים של מכניקת הקוונטים, שם אנו יודעים כי  $I\omega = \hbar\sqrt{J(J+1)}$ . דבר זה נובע מהקוונטיזציה של התנע הזוויתי,  $I\omega$ . נציב זאת חזרה באנרגיה ונקבל ביטוי לאנרגיה המקוונטט של רוטור לא צפיד:

$$E_J = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I} + \frac{\hbar^4 J^2(J+1)^2}{2kr^2 I^2} \quad \text{למעשה קיבלנו את האנרגיה של רוטור צפיד (האיבר הראשון)}$$

פלוס איבר נוסף. נארגן את התוצאה שקיבלנו:

$$E_J = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 \mu r^2} J(J+1) + \frac{\hbar^4}{32\pi^4 \mu^2 r^6 k} J^2(J+1)^2$$

$$k(r - r_0) = \mu\omega^2 r \rightarrow r = \frac{kr_0}{k - \mu\omega^2}$$

נציב חזרה באנרגיה:

$$E_J = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 \mu r_0^2} J(J+1) - \frac{\hbar^4}{32\pi^4 \mu^2 r_0^6 k} J^2(J+1)^2$$

$$E_J = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 I_0 c} J(J+1) - \frac{\hbar^4 \mu}{32\pi^4 c I_0^3 k} J^2(J+1)^2 \quad \text{נרשום את הביטוי לאנרגיה ביחידות של } cm^{-1}$$

$$B = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 I_0 c} \quad ; \quad D = \frac{\hbar^4 \mu}{32\pi^4 c I_0^3 k} = \frac{4B^3}{\tilde{\omega}^2} \quad \text{נגדיר שני משתנים (אחד חדש ואחד כבר הגדרנו):}$$

$$\tilde{\omega} = \frac{\omega}{2\pi c} \quad \text{כאשר } \tilde{\omega} \text{ זה תדירות הקפיץ ביחידות של } cm^{-1}$$

$$E_J = BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2$$

נציב אותם בביטוי לאנרגיה:



קיבלנו אנרגיה של רוטור לא צפיד המורכבת מאנרגיה של רוטור צפיד עם גורם תיקון. התיקון נובע מכך שהמולקולה מסתובבת והיא אינה צפידה ולכן נמתחת. כעת משהגדרנו את האנרגיה של רוטור לא צפיד אנו יכולים לחלץ מהספקטרום את תדירות הויברציה של המולקולה מתוך ידיעת ערכו של המקדם  $D$ . ככל שעולים יותר ברמות האנרגיה ההפרש האנרגיה בין רוטור צפיד לרוטור לא צפיד הולך וגדל, לרוטור לא צפיד אנרגיה נמוכה יותר, אם כי התיקון האנהרמוני  $D$  שברוטור לא צפיד הוא קטן ביחס לאפקט המרכזי, ולשם המחשה נביא לדוגמה את הערכים של שני הקבועים של מולקולת  $HCl$ :

$$B = 10.395 \text{ cm}^{-1} ; D = 0.0004 \text{ cm}^{-1}$$

נבחן את ההבדל בין שתי רמות אנרגיה ברוטור לא צפיד:

$$\bar{\nu} = E_{J+1} - E_J = B(J+1)(J+2) - D(J+1)^2(J+2)^2 - BJ(J+1) + DJ^2(J+1)^2$$

$$\bar{\nu} = 2B(J+1) - D(J+1)^2((J+2)^2 - J^2) = 2B(J+1) - 4D(J+1)^3$$

$$\bar{\nu} = 2B(J+1) - 4D(J+1)^3$$

ברוטור צפיד הפרמטר היחיד שעניין אותנו היה קבוע הרוטציה  $B$ , ואז עשינו גרף של תדירות המעבר  $\bar{\nu}$  כפונקציה של  $J$ , ועיי קרוב ליניארי מצאנו את ערך קבוע הרוטציה. עבור רוטור לא צפיד אנו מעוניינים למצוא שני פרמטרים, ולכן הגרף שנבנה יהיה:

$$y = 2B - 4Dx \quad \text{משוואת הגרף היא:}$$

במילים אחרות נאמר כי במקרה של רוטור לא צפיד אנו בונים גרף בעל שני משתנים המעניינים אותנו ולכן גם שיפוע הגרף וגם נקודת החיתוך עם ציר ה- $Y$  מעניינים אותנו שכן:

$$a = -4D ; b = 2B$$

