H – гамильтониан в лабораторной системе, $\mathcal{H}$ – гамильтониан в молекулярной системе.

$$H = \mathcal{H} + \frac{1}{2\mu} P_x^2 + \frac{1}{2\mu} P_y^2 + \frac{1}{2\mu} P_z^2 \tag{1}$$

Рассмотрим выражение для вклада траектории $d\omega$ в спектральную функцию:

$$d\omega = \exp\left(-\frac{H}{kT}\right) dx_{cm}\, dy_{cm}\, dz_{cm}\, dP_x\, dP_y\, dP_z\, dR\, dp_R\, d\theta\, dp_\theta \tag{2}$$

$$J(\omega) \sim \frac{1}{\mathrm{Norm}} \int \frac{d\omega}{dt} \left| \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathbf{d}\left(t \mid R, p_R, \theta, p_\theta\right) \exp\left(-i\omega t\right) dt \right|^2 \tag{3}$$

$$\frac{d\omega}{dt} = \exp\left(-\frac{H}{kT}\right) dx_{cm}\, dy_{cm}\, dz_{cm}\, dP_x\, dP_y\, dP_z \frac{dR}{dt}\, dp_R\, d\theta\, dp_\theta = \tag{4}$$

$$= \frac{p_R}{\mu} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{kT}\right) dx_{cm}\, dy_{cm}\, dz_{cm}\, dP_x\, dP_y\, dP_z\, dp_R\, d\theta\, dp_\theta \tag{5}$$

Нормировочный множитель Norm равен интегралу $d\omega$.

$$\mathrm{Norm} = \int d\omega \tag{6}$$

$$\mathrm{Norm} = \int dx_{cm} \int dy_{cm} \int dz_{cm} \int dP_x \int dP_y \int dP_z \int dR \int dp_R \int d\theta \int \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{kT}\right) dp_\theta =$$

$$= V \left(2\pi M kT\right)^{3/2} \int dR \int dp_R \int d\theta \int \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{kT}\right) dp_\theta \tag{7}$$

В выражении для спектральной функции (3) также можно проинтегрировать по переменным центра масс x_{cm}, y_{cm}, z_{cm}, P_x, P_y, P_z, что также приведет к множителям V и $(2\pi MkT)^{3/2}$. Сократив их в числителе и знаменателе, а также избавившись от эйлерова угла θ, т.к. гамильтониан $\mathcal{H}$ не зависит от него, приходим к

$$J(\omega) \sim \frac{\displaystyle\int dp_R \int \frac{p_R}{\mu} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{kT}\right) dp_\theta \left| \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}\left(t \mid R, p_R, p_\theta\right) \exp\left(-i\omega t\right) dt \right|^2}{\displaystyle\int dR \int dp_R \int \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{kT}\right) dp_\theta} \tag{8}$$

Проведем анализ размерностей в этом выражении. Заметим, что отношение размерностей преобразованных интегралов $d\omega/dt$ и Norm равно c^{-1}.

$$\mathrm{Dim}\left|\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\mathbf{d}\left(t\mid R,p_R,p_\theta\right)\exp\left(-i\omega t\right)dt\right|^2 = (\text{Кл}\cdot\text{м}\cdot\text{с})^2 \tag{9}$$

Коэффициент пропорциональности в (8) равен $\dfrac{1}{2\pi}\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}$ (основываясь на статье А.А.)

$$\mathrm{Dim}\left[\varepsilon_0^{-1}\right] = \text{Н}\cdot\text{м}^2\cdot\text{Кл}^{-2} \tag{10}$$

Полная размерность выражения для спектральной функции $J(\omega)$:

$$\mathrm{Dim}\left[J(\omega)\right] = \text{с}^{-1}\cdot\text{Н}\cdot\text{м}^2\cdot\text{Кл}^{-2}\cdot\text{Кл}^2\cdot\text{м}^2\cdot\text{с}^2 = \text{Дж}\cdot\text{м}^3\cdot\text{с} \tag{11}$$