[振動分配関数]

$$q_{\rm vib}^{(1)} = \left[1-\exp\left(-\frac{h\nu}{k_{\rm B}T}\right)\right]^{-1} \qquad \text{1 振動子} \quad (7.4)$$

$$q_{\rm vib\text{-}cl}^{(1)} = \frac{k_{\rm B}T}{h\nu} \qquad \text{古典極限 1 振動子} \quad (7.4\text{-cl})$$

$$q_{\rm vib} = \prod_{i=1}^{n_{\rm v}}\left[1-\exp\left(-\frac{h\nu_i}{k_{\rm B}T}\right)\right]^{-1} \qquad n_{\rm v}\ \text{振動子} \quad (7.5)$$

[回転分配関数]

$$q_{\rm rot}^{\rm 2D} = \int_0^\infty \rho_{\rm rot}^{\rm 2D}\exp\left(-\frac{\varepsilon_J}{k_{\rm B}T}\right)d\varepsilon_J = \frac{k_{\rm B}T}{\sigma B} \qquad \text{2 次元回転子} \quad (7.6)$$

σ: 回転対称数
= 2 (H_2, N_2, CO_2)
= 1 (HCl, N_2O)

$$q_{\rm rot}^{\rm 3D} = \frac{n_{\rm isom}\pi^{1/2}}{\sigma}\left(\frac{k_{\rm B}T}{A}\frac{k_{\rm B}T}{B}\frac{k_{\rm B}T}{C}\right)^{1/2} \qquad \text{3 次元回転子} \quad (7.7)$$

σ: 回転対称数
= 2 (H_2O, SO_2)
= 3 (NH_3)
:
$n_{\rm isom}$: (光学)異性体の数

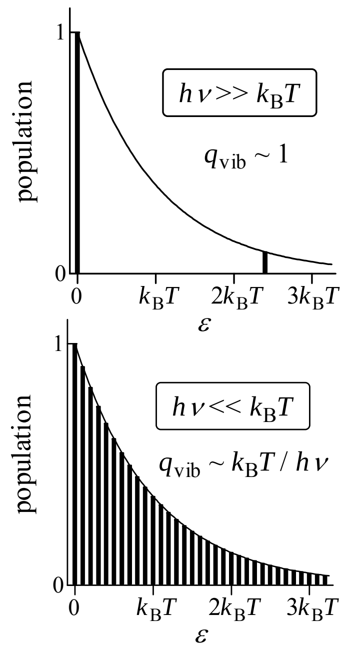
[並進分配関数]

$$q_{\rm trans}^{\rm 1D} = \left(\frac{2\pi m k_{\rm B}T}{h^2}\right)^{1/2} l \qquad \text{1 次元並進} \quad (7.8)$$

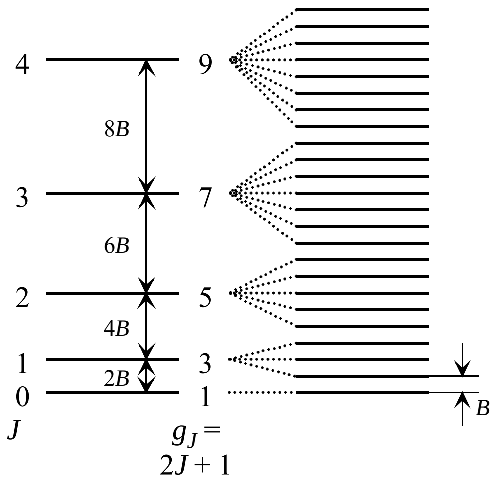
$$q_{\rm trans}^{\rm 3D} = \left(\frac{2\pi m k_{\rm B}T}{h^2}\right)^{3/2} l_x l_y l_z \qquad \text{3 次元並進} \quad (7.9)$$

$$q_{\rm trans}^{\circ} = \left(\frac{2\pi m k_{\rm B}T}{h^2}\right)^{3/2} \qquad \text{3 次元並進/単位体積あたり} \quad (7.10)$$

$$q_{\rm trans}^{\circ} = \left(\frac{2\pi \mu k_{\rm B}T}{h^2}\right)^{3/2} \qquad \text{3 次元相対並進/単位体積あたり} \quad (7.11)$$



10.1 振動分配関数



10.2 二次元回転の状態密度 ~ 1 / B

10.3 ボルツマン分布 – 統計力学的裏付