

質問③ 回転の分配関数を J_{rot} として、

$$\begin{aligned} J_{\text{rot}} &= \sum_{J=0}^{\infty} \sigma e^{-\beta \epsilon_J} = \sum_{J=0}^{\infty} (2J+1) e^{-\frac{1}{k_B T} \cdot \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)} \\ &= \sum_{J=0}^{\infty} (2J+1) e^{-J(J+1)\Theta/T} \end{aligned}$$

ここで、 σ は縮退度 $2J+1$ 、 $\epsilon_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$ 、 $\Theta = \frac{\hbar^2}{2I}$ である。
このうち、対称なものは、偶数項で、反対称なものは奇数項
なので、回転の分配関数は、

$$\begin{aligned} \text{対称なもの} \quad r_e &= \sum_{J=\text{even}}^{\infty} (2J+1) e^{-J(J+1)\Theta/T} \\ \text{反対称なもの} \quad r_o &= \sum_{J=\text{odd}}^{\infty} (2J+1) e^{-J(J+1)\Theta/T} \end{aligned}$$

でよいですか。