

ボルツマン分布

等重率の原理 (アприオリ確率一定の原理)

配置, 重み

$$\frac{N_i}{N} = \frac{e^{-\beta \varepsilon_i}}{\sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}} \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

分子分配関数

$$q = \sum_{\text{状態 } i} e^{-\beta \varepsilon_i}$$

$$q = q^{\text{T}} q^{\text{R}} q^{\text{V}} q^{\text{E}}$$

振動 $q^{\text{V}} = \frac{1}{1 - e^{-\beta h c \tilde{\nu}}}$