

k_B は、ボルツマン定数を表し、 T は温度、 $\beta \equiv 1/(k_B T)$ 、 \hbar はプランク定数を 2π で割ったものを表す。

異核 2 原子分子を剛体回転子と見なせる時、分子の慣性モーメントを I とすると、回転運動のエネルギー準位は、

$$\epsilon_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (1)$$

で与えられ、その縮退度は $2l+1$ と書ける。1 分子の内部エネルギーに対する寄与 ϵ_{rot} について、低温の極限で、絶対値が最も大きいものから 2 つ書くと、

$$\epsilon_{rot} = Ak_B \Theta \exp[-2\frac{\Theta}{T}] + Bk_B \Theta \exp[-4\frac{\Theta}{T}] + \dots \quad (2)$$

となる。実数 A 、 B を求めよ。ただし、 $\Theta = \hbar^2/(2Ik_B)$ で、次の公式を使っても良いが、 x 、 E 、 Z を答えに書いてはいけない。

$$x \ll 1 \text{ で、} \quad \ln(1+x) \simeq x - \frac{x^2}{2} \quad (3)$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \quad (4)$$