k_{B} は、ボルツマン定数を表し、T は温度、$\hbar$ はプランク定数を 2π で割ったものを表す。また、$\beta \equiv 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ を使っても良い。

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固有値は、

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

で与えられる。回転運動の固有状態を指定する量子数は、l の他に m もあり、$-l \leq m \leq l$。1 分子のヘルムホルツの自由エネルギーに対する寄与 f_{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、

$$f_{\mathrm{rot}} = A k_{\mathrm{B}} T \exp[-C\frac{\Theta}{T}] + B k_{\mathrm{B}} T \exp[-D\frac{\Theta}{T}] + \cdots \tag{2}$$

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

$$|x| << 1 \text{ で、} \qquad \ln(1+x) \simeq x - \frac{x^2}{2} \tag{3}$$

$$F = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z \tag{4}$$