ハミルトニアンは,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \tag{3.4}$$

シュレディンガー方程式は,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(x,y,z) = E\varphi(x,y,z) \tag{3.5}$$

これを解くと規格化して,

$$\varphi(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)\sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z) \tag{3.6}$$

物理的に意味のある状態を重複なく数えると,

$$k_x = \frac{\pi}{L}n_x, k_y = \frac{\pi}{L}n_y, k_z = \frac{\pi}{L}n_z \tag{3.7}$$

これをシュレディンガー方程式に代入すると,

$$E_{(n_x,n_y,n_z)} = \frac{\hbar^2}{2m}|\boldsymbol{k}^2| = E_0(n_x^2+n_y^2+n_z^2) \tag{3.8}$$

- エネルギー固有値は (n_x, n_y, n_z) という 3 つの整数の組みで指定.
- 対応するエネルギー固有値は $E_{(n_x,n_y,n_z)} = E_0(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$ と書ける.

3.2 カノニカルアンサンブルで計算

$$Z = \frac{1}{N!}\sum_{(n_\alpha^{(j)})\alpha=x,y,z,\ j=1,\dots,N} \exp[-\beta E_0 \sum_{\alpha=x,y,z}\sum_{j=1}^{N}(n_\alpha^{(j)})^2] \tag{3.9}$$

exp の中の和は掛け算に直せるので,

$$Z = \frac{1}{N!}\prod_{\alpha=x,y,z}\prod_{j=1}^{N}\left\{\sum_{n_\alpha^{(j)}=1}^{\infty}\exp[-\beta E_0(n_\alpha^{(j)})^2]\right\} \tag{3.10}$$

かっこの中の和は全て等しいので,

$$Z = \frac{1}{N!}\left\{\sum_{n=1}^{\infty}\exp[-\beta E_0(n_\alpha^{(j)})^2]\right\}^{3N} \tag{3.11}$$