$$\boxed{\text{不確定性関係：}\delta x \cdot \delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

粒子の同等性：

図 1

1 電子系

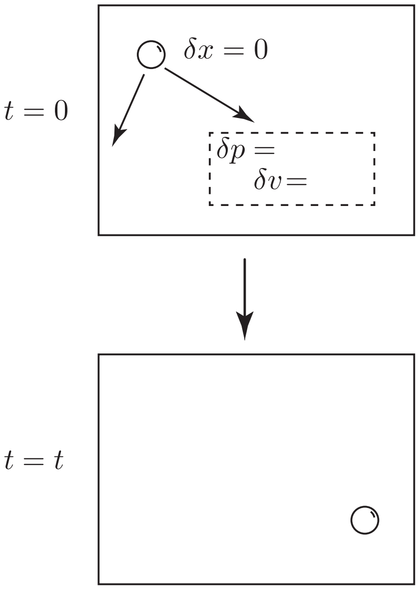
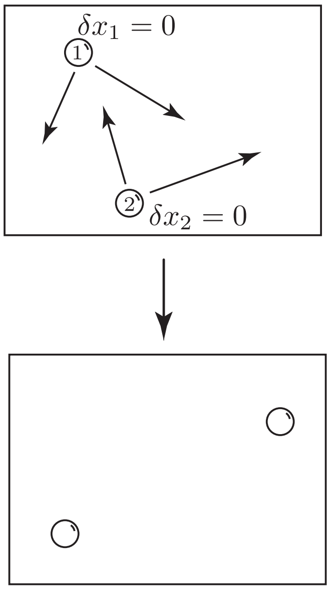


図 2

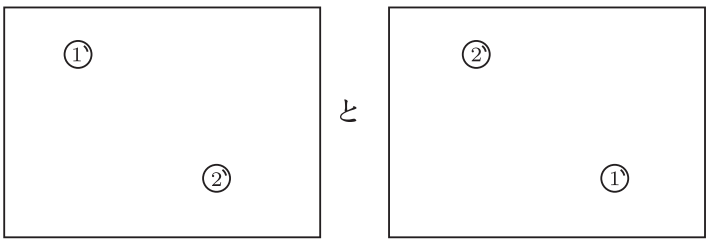
2 電子系



（何らかの方法で）
粒子の位置が定まった状態を作れたとすると，その状態は運動量が全く不定な状態になっている。

区別できないものは同一と見なす

図 3



$\Psi(\tau_1, \tau_2)$ と $\Psi(\tau_2, \tau_1)$ は

同じ状態と見なす

$$\Psi(\tau_1, \tau_2) = \pm\Psi(\tau_2, \tau_1)$$

	粒子の交換に対して	粒子の総称	例
$\Psi(\tau_1, \tau_2) = +\Psi(\tau_2, \tau_1)$	対称	ボース粒子	光子／ヒッグス粒子
$\Psi(\tau_1, \tau_2) = -\Psi(\tau_2, \tau_1)$	反対称	フェルミ粒子	電子／中性子／陽子

Pauliの排他律

2つの電子は同じ1粒子状態を占めることができない。すなわち，1つの軌道には α スピンおよび β スピンの電子をそれぞれ1個収容可能であるが，同じスピンの電子を2個以上収容することはできない。

□記号の約束

$\phi_{1\mathrm{s}}(1)$：電子1が1s軌道に入っていることを表す。

$\alpha\,(2)$：電子2のスピン成分が α であることを表す。

■全波動関数の反対称性

$$\text{○全波動関数（反対称）} = \begin{cases} \text{軌道成分（ 対称 ）} \times \text{スピン部分（反対称）} & (+1)\times(-1) = -1 \\ \text{軌道成分（反対称）} \times \text{スピン部分（ 対称 ）} & (-1)\times(+1) = -1 \end{cases}$$

$$\times\text{全波動関数（ 対称 ）} = \begin{cases} \text{軌道成分（ 対称 ）} \times \text{スピン部分（ 対称 ）} & (+1)\times(+1) = +1 \\ \text{軌道成分（反対称）} \times \text{スピン部分（反対称）} & (-1)\times(-1) = +1 \end{cases}$$

■ 2電子系波動関数のスピン成分

$$\Gamma_{\text{対称}} = \begin{cases} \alpha\,(1)\cdot\alpha\,(2) & \text{2つの電子がともに}\alpha\text{スピン状態} \\ \beta\,(1)\cdot\beta\,(2) & \text{2つの電子がともに}\beta\text{スピン状態} \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\Big[\alpha\,(1)\cdot\beta\,(2)+\beta\,(1)\cdot\alpha\,(2)\Big] & \text{1つの電子が}\alpha\text{で，もう1つの電子が}\beta \end{cases}$$

$\Gamma_{\text{反対称}}$[1] $= \dfrac{1}{\sqrt{2}}\Big[\alpha\,(1)\cdot\beta\,(2)-\beta\,(1)\cdot\alpha\,(2)\Big]$　　1つの電子が α で，もう1つの電子が β

■ 2電子系波動関数の軌道関数（2個の電子が異なる軌道に入っている場合）

$$\begin{aligned} \psi_{\mathrm{orb,s}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\phi_{1\mathrm{s}}(1)\cdot\phi_{2\mathrm{s}}(2)+\phi_{2\mathrm{s}}(1)\cdot\phi_{1\mathrm{s}}(2)\Big] \\ \psi_{\mathrm{orb,a}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\phi_{1\mathrm{s}}(1)\cdot\phi_{2\mathrm{s}}(2)-\phi_{2\mathrm{s}}(1)\cdot\phi_{1\mathrm{s}}(2)\Big] \end{aligned}$$

■ 2電子系波動関数の全関数（2個の電子が異なる軌道に入っている場合）

$$\Psi_{\mathrm{S}}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\phi_{1\mathrm{s}}(1)\phi_{2\mathrm{s}}(2)+\phi_{2\mathrm{s}}(1)\phi_{1\mathrm{s}}(2)\Big]\frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)\Big]$$

$$\Psi_{\mathrm{T}}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\phi_{1\mathrm{s}}(1)\phi_{2\mathrm{s}}(2)-\phi_{2\mathrm{s}}(1)\phi_{1\mathrm{s}}(2)\Big]\begin{cases} \alpha(1)\alpha(2) \\ \beta(1)\beta(2) \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\Big[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)\Big] \end{cases}$$

---

[1] $\alpha(1)\cdot\beta(2)-\beta(1)\cdot\alpha(2) \xrightarrow{\text{1と2を入れ換えると}} \alpha(2)\cdot\beta(1)-\beta(2)\cdot\alpha(1)$

順番を入れ換えた

$$= -\Big[\alpha(1)\cdot\beta(2)-\beta(1)\cdot\alpha(2)\Big]$$

と符号が変わる。