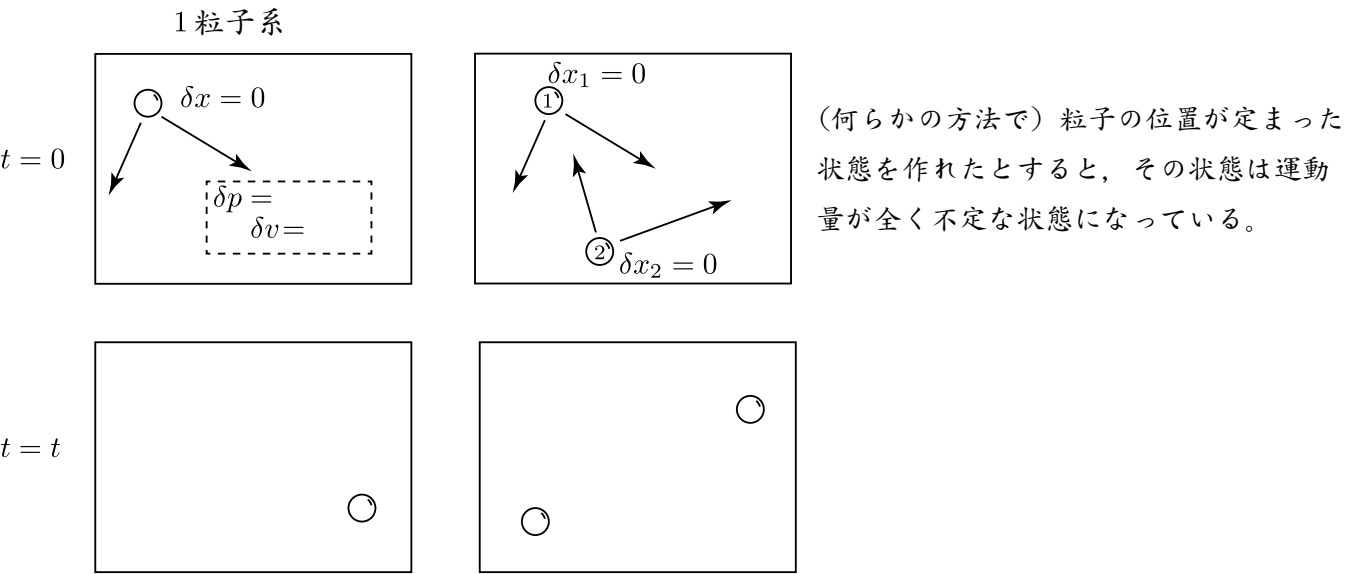
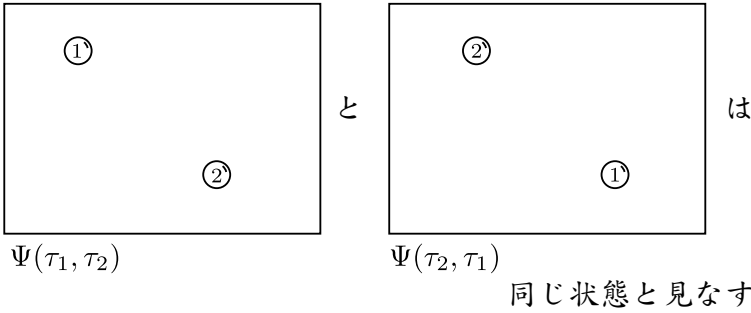


不確定性関係： $\delta x \cdot \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

粒子の同等性：



区別できないものは同一と見なす



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

	粒子の交換に対して	粒子の総称	例
$\Psi(\tau_1, \tau_2) = +\Psi(\tau_2, \tau_1)$			
$\Psi(\tau_1, \tau_2) = -\Psi(\tau_2, \tau_1)$			

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

$\phi_{1s}(1)$: 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

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

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

■2電子系波動関数のスピン成分

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

$$\Gamma_{\text{反対称}}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1) \cdot \beta(2) - \beta(1) \cdot \alpha(2)] \quad \text{1つの電子が}\alpha\text{で、もう1つの電子が}\beta$$

■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)

$$\psi_{\text{orb,s}} = \phi_{1s}(1) \cdot \phi_{2s}(2) + \phi_{2s}(1) \cdot \phi_{1s}(2)$$

$$\psi_{\text{orb,a}} = \phi_{1s}(1) \cdot \phi_{2s}(2) - \phi_{2s}(1) \cdot \phi_{1s}(2)$$

■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)

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

$$\Psi_T(1,2) = [\phi_{1s}(1)\phi_{2s}(2) - \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)] \begin{cases} \alpha(1)\alpha(2) \\ \beta(1)\beta(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \end{cases}$$

$$\begin{array}{ccc} \alpha(1) \cdot \beta(2) - \beta(1) \cdot \alpha(2) & \xrightarrow{\text{1 と 2 を入れ換えると}} & \alpha(2) \cdot \beta(1) - \beta(2) \cdot \alpha(1) \\ & & \swarrow \quad \searrow \quad \text{順番を入れ換えた} \\ & & = -[\alpha(1) \cdot \beta(2) - \beta(1) \cdot \alpha(2)] \end{array}$$

と符号が変わる。