3.7. Pauliの排他原理

- （発展的話題含む）波動関数の対称性*とスピン量子数
  - Sが整数 → Boson（ボゾン、Bose粒子）
    → 対称
  - Sが半整数 → Fermion（フェルミオン、Fermi粒子）
    → 反対称

  電子はフェルミオンなので、波動関数は反対称であるべき

3.7. Pauliの排他原理

- 反対称な波動関数
  - 例）二つの粒子1,2の波動関数

$$\Psi(q_1,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}\psi_1(q_1) & \psi_2(q_1)\\ \psi_1(q_2) & \psi_2(q_2)\end{vmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)-\psi_2(q_1)\psi_1(q_2)\right)$$

2個の電子の波動関数を1個の電子の波動関数の積で（近似的に）表す（Hartree積）。

$\psi_i(q_j)$:j番目の電子が状態iの（一電子）波動関数に従うことを示す。

3.7. Pauliの排他原理

- 反対称な波動関数
  - 例）二つの粒子1,2の波動関数（続き）

$$\Psi(q_1,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}\psi_1(q_1) & \psi_2(q_1)\\ \psi_1(q_2) & \psi_2(q_2)\end{vmatrix}$$

は、反対称である: $\Psi(q_2,q_1)=-\Psi(q_1,q_2)$

  - 反対称な波動関数の特徴

$\psi_1=\psi_2=\psi$ なら、

$$\Psi(q_1,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}\psi(q_1) & \psi(q_1)\\ \psi(q_2) & \psi(q_2)\end{vmatrix}$$

$$=\psi(q_1)\psi(q_2)-\psi(q_2)\psi(q_1)=0$$

→二つの電子が同じ状態となることは許されない
（Pauliの排他原理）

3.7. Pauliの排他原理

- N個の電子の波動関数

$$\Psi(1,2,\ldots N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\psi_1(1) & \psi_2(1) & \cdot & \cdot & \psi_N(1)\\ \psi_1(2) & \cdot & & & \psi_N(2)\\ \cdot & & \cdot & & \cdot\\ \cdot & & & \cdot & \cdot\\ \psi_1(N) & \psi_2(N) & \cdot & \cdot & \psi_N(N)\end{vmatrix}$$

ただし、$1,2,\ldots N$などはq_1, q_2などの略

Slater（スレーター）行列式

問3-10: N=3として、この波動関数が反対称であることを確かめよ