逆向きスピンをもつ 2 電子状態 (filename=two-electrons-system-wavefunction-with-opposite-spin-QA20160801A.tex)

2 個の電子がお互いに逆向きスピンを持ち，そのうち 1 個の空間部分の量子状態が $\phi_a(\vec{r}_1)$ で，別の 1 個の空間部分の量子状態が $\phi_b(\vec{r}_2)$ であるとする．また電子 1 個の上向き (下向き）スピン状態を $|\alpha>$ ($|\beta>$) とする．この 2 電子系の波動関数 $\psi(1,2)$ を記し，この波動関数が粒子交換について反対称であることを確かめよ．

(解答例)

電子はフェルミ粒子であるから，全系の波動関数は粒子交換に対して反対称でなければならない．この問いでは，スピン状態も逆向きであるから，次の 2 つの表現のように、粒子交換について対称と反対称の両方が可能である．

$$
\begin{aligned}
[|\alpha_1\beta_2> + |\beta_1\alpha_2>] &\rightarrow [|\alpha_2\beta_1> + |\beta_2\alpha_1>] = [|\alpha_1\beta_2> + |\beta_1\alpha_2>],\ (\text{対称}),\\
[|\alpha_1\beta_2> - |\beta_1\alpha_2>] &\rightarrow [|\alpha_2\beta_1> - |\beta_2\alpha_1>] = -[|\alpha_1\beta_2> - |\beta_1\alpha_2>],\ (\text{反対称}).
\end{aligned}
$$

従って，全体として反対称になるためには, スピン部分の波動関数の粒子交換についての対称性に応じて，空間部分の波動関数は粒子交換に対して反対称または対称でなければならない．故に，2 電子系の全体の波動関数 $\psi(1,2)$ は

$$
\psi(1,2) = N[\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) \pm \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)][|\alpha_1\beta_2> \mp |\beta_1\alpha_2>], (N: \text{規格化定数}) \tag{1}
$$

となる．ここで，N は規格化定数で，複合は同順を取る, すなわち上符号は上符号同士，下符号は下符号同士を取る．

さらに

$$
\begin{aligned}
\psi(2,1) &= N[\phi_a(\vec{r}_2)\phi_b(\vec{r}_1) \pm \phi_b(\vec{r}_2)\phi_a(\vec{r}_1)][|\alpha_2\beta_1> \mp |\beta_2\alpha_1>]\\
&= N(\pm)[\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) \pm \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)](\mp)[|\alpha_1\beta_2> \mp |\beta_1\alpha_2>]\\
&= -N[\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) \pm \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)][|\alpha_1\beta_2> \mp |\beta_1\alpha_2>]\\
&= -\psi(1,2)
\end{aligned} \tag{2}
$$

となる．すなわち，粒子入れ替えについて，確かに反対称になっている．