(filename=two-electrons-system-wavefunction-with-same-spin-QA20170720.tex)

2個の電子が 共に上向きスピン 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．ここで a, b はそれぞれの一粒子状態を特徴づける複数の量子数のある組である。また電子1個の上向き (下向き) スピン状態を $|\alpha>$ ($|\beta>$) とする．

(1) この2電子系の全体の波動関数 $\psi_{a,b}(1,2)$ を記し，これが粒子交換について反対称であることを確認せよ．

(2) 前問の結果の意味を，2つの一粒子状態 a と b が同じ場合と異なる場合に分けて，記せ．

(解答例)

(1) 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ついて反対称, すなわち空間座標の交換とスピンの交換の全体に対して反対称でなければならない．この問いでは，2つのスピン状態は同じ上向きであるから，波動関数のスピン部分は対称である．すなわち、$|\alpha_2\alpha_1> = |\uparrow\uparrow> = |\alpha_1\alpha_2>$ である．従って，波動関数の空間部分が反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 ($\psi_{a,b}(1,2)$) は

$$\psi_{a,b}(1,2) = N[\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) - \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)]|\alpha_1\alpha_2>, \ (N: \text{規格化定数}) \quad (1)$$

となる．ここで，この2粒子系の粒子交換した波動関数は

$$\begin{aligned}\psi_{a,b}(2,1) &= N[\phi_a(\vec{r}_2)\phi_b(\vec{r}_1) - \phi_b(\vec{r}_2)\phi_a(\vec{r}_1)]|\alpha_2\alpha_2> \\ &= -N[\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) - \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)]|\alpha_1\alpha_2> \\ &= -\psi_{a,b}(1,2) \quad (2)\end{aligned}$$

となる．故に，式 (1) は粒子交換について反対称となる．

(2) (a) 一粒子状態 a と b が同じ場合，すなわち2電子が同じ一粒子状態を占める場合

$$\begin{aligned}\psi_{a,a}(1,2) &= N[\phi_a(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2) - \phi_a(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)]|\alpha_1\alpha_2> \\ &= 0, \quad (3)\end{aligned}$$

すなわち，平行スピンをもつ2電子は同じ量子状態には入れない，というパウリの排他原理になる．

(b) 一粒子状態 a と b が異なる場合，$\psi_{a,b}(1,2)$ は一般にはゼロではない．しかし，同じ場所で2電子が鉢合わせすること，すなわち $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ とおく

と，[ ] 内が 0 なる．この結果は同じ場所で 2 電子が鉢合わせすることはないように振る舞うことを意味する．全反対称化という手続きにより，平行スピンの 2 電子間には位置の相関（互いによけ合うこと）(電子間の短距離相関) が自動的に生じていることを意味する．

参考：小出昭一郎「量子力学 (II)」裳華房，1974 年，p．225 例題 3．