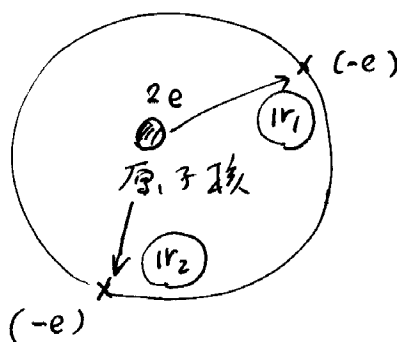


7-4-3 2 電子系の波動関数

59

2 電子系 : He-原子



① 2 電子系のハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2) - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \bullet \quad Z = 2 \\ \bullet \quad m \text{ は 電子の質量} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{Ze^2}{r_1}, -\frac{Ze^2}{r_2} : \text{電子と原子核のクーレ相互作用 (引力)} \\ \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} : \text{電子間のクーレ相互作用 (反発力, 斥力)} \end{array} \right.$$

[近似] 電子間の相互作用を無視する

$$\left(\text{つまり } \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \text{ を無視する} \right)$$

この時 : 2電子系の波動関数 $\Psi(r_1, r_2)$ は

$$\boxed{\Psi(r_1, r_2) = \phi_{n_1}(r_1) \phi_{n_2}(r_2)} \quad \text{と仮定}$$

- つまり $\phi_{n_i}(r)$ は 水素型原子の場合の固有関数
- n_i は量子数
- 束縛エネルギー E_{n_i} は

$$\boxed{E_{n_i} = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n_i^2}} \quad \text{と仮定する}$$

(第8章参照)

① $\Psi(r_1, r_2) = \phi_{n_1}(r_1) \phi_{n_2}(r_2)$

の問題点

この波動関数は $\boxed{\text{対称}}$ である

$$\boxed{P_{12} \Psi(r_1, r_2) = \Psi(r_1, r_2)}$$

しかし 電子はフェルミオン である $\boxed{\text{反対称}}$ である

$$\Psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_{n_1}(r_1) & \phi_{n_2}(r_2) \\ \phi_{n_2}(r_1) & \phi_{n_1}(r_2) \end{vmatrix}$$

よって $n_1 = n_2 = n$ とすると $\Psi(r_1, r_2) = 0$



Pauli 原理より明らか

(15 の電子は 14 の状態に入る)

【ここから】

He-原子では

2 個の電子が 1s-状態 に入る
($n=1$ の状態)

何故か



電子は 2002 と 2003. 正負は動かない

$$\Psi(r_1, r_2) = \phi_n(r_1) \phi_n(r_2) \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_1^\uparrow \chi_2^\downarrow - \chi_1^\downarrow \chi_2^\uparrow]$$

(2002 ↑ の電子と 2002 ↓ の電子は
別の状態の電子である)