

Pauliho vylučovací princip

- celková spin-orbitální vlnová funkce popisující stav atomu či molekuly musí být antisymetrická vůči záměně VŠECH souřadnic, tj.:

$$\Phi(1,2) = -\Phi(2,1) \quad (1)$$

- vlnová funkce popisující atomy s více elektrony je popsána Slaterovým determinantem:
atom s 2ma elektrony:

$$\Phi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \Phi_a(1) & \Phi_a(2) \\ \Phi_b(1) & \Phi_b(2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_a(1)\Phi_b(2) - \Phi_b(1)\Phi_a(2)] \quad (2)$$

kde $\Phi_a(1)$ je jednočásticová spinorbitální vlnová funkce popisující 1. elektron se spinem ve stavu a , podobně u ostatních.

Podobně lze popsat atom se 3mi elektrony:

$$\Phi(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \Phi_a(1) & \Phi_a(2) & \Phi_a(3) \\ \Phi_b(1) & \Phi_b(2) & \Phi_b(3) \\ \Phi_c(1) & \Phi_c(2) & \Phi_c(3) \end{vmatrix} \quad (3)$$

- Př. atom He

$$\Phi_a = \Psi_{1s}|+\rangle$$

$$\Phi_b = \Psi_{1s}|-\rangle$$

kde Φ jsou spin-orbitální, Ψ jsou orbitální vlnové funkce a $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ popisují spinový stav.

Celková vlnová funkce popisující atom He s 2ma elektrony pak je tvořena jako jeden Slaterův determinant typu (2). Je tedy symetrická v orbitální (prostorové) části a antisymetrická ve spinové části.

Pauliho princip obecně platí nejen pro molekuly a atomy, ale pro všechny soustavy částic sestávající z fermionů, tedy částic s poločíselným spinem. Mezi fermiony patří protony, elektrony, neutrony. Pauliho princip tedy neplatí pro fotony, které mají spin celočíselný (jsou to tedy bosony). Lze jej také formulovat takto: Dva fermiony nemohou mít všechna kvantová čísla stejná. Neboli: dva fermiony nemohou sedět ve stejném spin-orbitalu. Nebo ještě jinak: dva fermiony sedící na stejné energetické hladině, tedy sdílející stejný prostorový orbital, se musí lišit spinovou částí své vlnové funkce.

Další pohled na tento princip viz otázka Symetrie vlnové funkce, bosony a fermiony.