sledećih poglavlja. Sada ćemo se posvetiti razmatranju uticaja spina elektrona na rešenja Šredingerove jednačine. Pokazaćemo, takođe, da je pri rešavanju Šredingerove jednačine za atome s više elektrona, neophodno uzeti u obzir da su elektroni identične čestice.

9.2.4 Uticaj spina na energiju i talasne funkcije atoma (He)

U prethodnom poglavlju uspeli smo da dosta tačno izračunamo energiju osnovnog stanja atoma helijuma. Da bi se, međutim, objasnili neki drugi eksperimentalni rezultati koji ukazuju na:

– postojanje singuletnih i tripletnih elektronskih stanja, pri čemu, u opštem slučaju, jednom singuletnom odgovara tripletno stanje niže energije,

– osnovno stanje He atoma je singuletno, bez odgovarajućeg energijski bliskog tripleta,

– zabranu spektralnih prelaza između singuleta i tripleta,

moraćemo pri rešavanju Šredingerove jednačine uključiti spin. Kao što je u poglavljima 5, 6 i 9.1 rečeno, kvantni broj spina pojedinačnog elektrona je 1/2, a projekcija spina na bilo koju izabranu osu (po dogovoru to je z-osa) može da ima vrednost $1/2\,\hbar$ ili $-\,1/2\,\hbar$. Svojstvena funkcija koja odgovara svojstvenoj vrednosti projekcije na z-osu $s_z = +1/2$ označava se sa α, a svojstvena funkcija koja odgovara svojstvenoj vrednosti projekcije $s_z = -1/2$ sa β. Kao što je ranije pomenuto, zbog spinorbitnog međudejstva (interakcije) nastaje dodatna energija:

$$\Delta E = f(r)\vec{l}\cdot\vec{s} \tag{9.2.31}$$

pri čemu je $f(\vec{r})$ funkcija položaja elektrona. Egzaktni Hamiltonov operator atoma trebalo bi da uključuje član prikazan jednačinom (9.2.31). Ovo bi značilo uključivanje i N spinskih (u slučaju N elektrona), pored $3\,N$ prostornih koordinata, zbog čega bi se pokazalo kao nemoguće rastavljanje Šredingerove jednačine na jednu jednačinu koja zavisi samo od prostornih koordinata i drugu koja zavisi od spinskih promenljivih. S druge strane, uključivanje popravke (9.2.31) u Hamiltonov operator, dovelo bi do neznatne promene u energiji sistema, pa se zbog navedenih razloga, član (9.2.31) ne unosi u Hamiltonov operator.

Spin elektrona se ipak uzima u obzir i to kroz oblik talasne funkcije. Pretpostavlja se da ukupna talasna funkcija zavisi kako od prostornih tako i od spinskih koordinata i predstavlja se u obliku proizvoda dve funkcije. Jedna od tih funkcija zavisi samo od spinskih, a druga samo od prostornih koordinata:

$$\Psi(\vec{r},\vec{s}) = \psi(\vec{r})\cdot\Theta(\vec{s}) \tag{9.2.32}$$

($\vec{r}$ predstavlja skup svih prostornih, a $\vec{s}$ skup svih spinskih koordinata). Cilj je da se na ovaj način rešavanje ukupne Šredingerove jednačine svede na rešavanje njenog prostornog dela (9.2.9).

Razmotrićemo sada kakav konkretni oblik funkcija (9.2.32) dvoelektronskog sistema, kao što je He atom, treba da ima. Sa $\Psi(1, 2)$ označićemo talasnu funkciju koja odgovara stanju kada se jedan elektron nalazi na jednom mestu, koordinata 1, a drugi elektron na nekom drugom mestu, koordinata 2. Stanje nastalo zamenom mesta dva elektrona opisuje se talasnom funkcijom $\Psi(2, 1)$. Pošto u fizičkim merenjima elektroni ne mogu da se razlikuju (oni su „identične čestice”)[15], stanja opisana funkcijama $\Psi(1, 2)$ i $\Psi(2, 1)$ odgovaraju istoj fizičkoj situaciji. Dalje, fizički smisao ima kvadrat talasne funkcije (predstavlja gustinu verovatnoće nalaženja sistema u određenom stanju), tako da je:

$$\Psi^2(1, 2) = \Psi^2(2, 1) \tag{9.2.33}$$

na osnovu čega slede dve mogućnosti:

$$\Psi(1, 2) = \pm\Psi(2, 1). \tag{9.2.34}$$

Indeksi 1 i 2 odnose se na sve, kako prostorne tako i spinske koordinate elektrona označenih indeksima 1 i 2. Jednačine (9.2.33) i (9.2.34) su matematičke formulacije principa (zakona prirode): ako neka fizički merljiva veličina zavisi od koordinata identičnih čestica, tada rezultat merenja mora da bude nezavisan od permutacije tih koordinata. Sve čestice u prirodi mogu da se podele na *fermione* koji imaju **antisimetričnu** talasnu funkciju u odnosu na permutaciju koordinata:

$$\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)$$

i *bozone,* kojima odgovara simetrična talasna funkcija:

$$\Psi(1, 2) = +\Psi(2, 1).$$

Fermioni imaju polubrojni spin, a bozoni celobrojni. Elektroni, protoni, neutroni kao i sve složene čestice (npr. atomi) koji sadrže neparan broj fermiona su fermioni.

Posledica antisimetrije talasne funkcije kod fermiona je **Paulijev princip isključenja,** po kojem dva elektrona u atomu ne mogu da imaju ista sva četiri kvantna broja.

Talasnu funkciju [videti (9.2.32)] atoma s dva elektrona, predstavićemo u obliku:

$$\Psi(\vec{r}_1, s_1;\vec{r}_2, s_2) = \Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \cdot \Theta(s_1,s_2)\,. \tag{9.2.35}$$

Očekivana vrednost energije s nerelativističkim Hamiltonovim operatorom je tada:

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= \iiiint \Psi^*(\vec{r}_1, s_1;\vec{r}_2, s_2)H\Psi(\vec{r}_1, s_1;\vec{r}_2, s_2)d\vec{r}_1ds_1d\vec{r}_2ds_2 = \\ &= \iint \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)d\vec{r}_1d\vec{r}_2\iint \Theta^*(s_1, s_2)\Theta(s_1, s_2)ds_1ds_2 = \\ &= \iint \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)d\vec{r}_1d\vec{r}_2\,.\end{aligned} \tag{9.2.36}$$

U jednačinama (9.2.36) korišćena je skraćena oznaka za integraljenje po prostornim promenljivim:

[15] Problem identičnih čestica postoji, u principu, i u makrosvetu, ali tu ima mnogo manju ulogu nego na atomskom nivou. Razlog je u tome što se makrotela odlikuju velikim brojem osobina, pa je teško da se nađu dva identična makroobjekta, osim u idealizovanim modelima. Suprotno ovome, mikročestice imaju ograničeni broj osobina (masa, naelektrisanje, spin) i problemi povezani sa nemogućnošću njihovog razlikovanja sasvim su realni.

$$\int d\vec{r}_1 = \iiint r_1^2 \sin\theta_1 dr_1 d\theta_1 d\varphi_1$$

i:

$$\int d\vec{r}_2 = \iiint r_2^2 \sin\theta_2 dr_2 d\theta_2 d\varphi_2 .$$

Jednakost poslednjeg i pretposlednjeg izraza u (9.2.36) posledica je normiranosti spinskog dela talasne funkcije:

$$\iint \Theta^*(s_1,s_2)\Theta(s_1,s_2)\ ds_1 ds_2 = 1 . \qquad (9.2.37)$$

Dakle, spinski deo talasne funkcije nije uključen neposredno u proračun očekivane vrednosti energije. Spinski deo, međutim, posredno utiče jer određuje simetriju prostornog dela talasne funkcije $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$.

U dosadašnjim razmatranjima talasna funkcija helijumovog atoma predstavljana je u obliku proizvoda:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_1(\vec{r}_1) \cdot \phi_2(\vec{r}_2) \equiv \phi_1(1) \cdot \phi_2(2) . \qquad (9.2.38)$$

U jednačinu (9.2.38) uvodimo skraćenu oznaku, $\phi_1(\vec{r}_1) \equiv \phi_1(1)$. Indeks 1 u ϕ_1 označava funkciju (npr. 1*s*, 2*p* itd.), a broj 1 u zagradi $(1) \equiv \vec{r}_1$ koordinatu elektrona 1. Ako se na desnoj strani jednačine (9.2.38) permutuju elektronske koordinate (odnosno elektroni), dobija se funkcija:

$$\phi_1(2) \cdot \phi_2(1) = \phi_2(1) \cdot \phi_1(2) \qquad (9.2.39)$$

koja opisuje potpuno istu fizičku situaciju kao jednačina (9.2.38). Međutim, ni funkcije (9.2.38) i (9.2.39) ne zadovoljavaju, u opštem slučaju, uslov (9.2.33) odnosno uslov (9.2.34), jer pri permutaciji elektrona 1 i 2 ne ostaju nepromenjene do na znak. Kaže se da funkcije (9.2.38) i (9.2.39) nisu pravilno simetrizovane. Pomoću funkcija (9.2.38) i (9.2.39) mogu da se formiraju njihove linearne kombinacije:

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1) \cdot \phi_2(2) + \phi_2(1) \cdot \phi_1(2)] \qquad (9.2.40a)$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1) \cdot \phi_2(2) - \phi_2(1) \cdot \phi_1(2)] \qquad (9.2.40b)$$

od kojih prva, očigledno, ne menja znak pri permutaciji elektrona 1 i 2, dok druga pri tome menja znak. Ovakve talasne funkcije su simetrizovane. Faktor $1/\sqrt{2}$ uveden je da bi funkcije ψ_s i ψ_a bile normirane (pretpostavlja se da su funkcije ϕ_1 i ϕ_2 već bile normirane).

Iako su elektroni fermioni, pa njihova talasna funkcija mora da bude antisimetrična u odnosu na permutacije, obe talasne funkcije (9.2.40a) i (9.2.40b), kako simetrična tako i antisimetrična, su od interesa jer one predstavljaju samo jedan deo (prostorni) ukupne talasne funkcije. Simetrija talasne funkcije osigurava se kombinovanjem antisimetrične prostorne talasne funkcije sa simetričnom spinskom i obrnuto.

Sada ćemo razmotriti oblik spinske talasne funkcije $\Theta(s_1, s_2)$. Ukupnu spinsku funkciju za sistem od dva elektrona, predstavićemo u obliku proizvoda jednoelektronskih spinskih funkcija. Postoje ukupno četiri mogućnosti:

spin (1)	spin (2)	ukupna spinska funkcija	
1/2	1/2	$\alpha(1)\alpha(2)$	
1/2	–1/2	$\alpha(1)\beta(2)$	(9.2.41)
–1/2	1/2	$\beta(1)\alpha(2)$	
–1/2	–1/2	$\beta(1)\beta(2)$.	

Druga i treća talasna funkcija predstavljaju isto fizičko stanje, a svaka za sebe nije ni simetrična ni antisimetrična u odnosu na permutacije elektrona. Zato se od njih obrazuje simetrična i antisimetrična kombinacija. Prema tome, četiri spinske funkcije su:

$$\Theta_1 = \alpha(1)\alpha(2)$$

$$\Theta_2 = \beta(1)\beta(2)$$

$$\Theta_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \tag{9.2.42}$$

$$\Theta_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)].$$

Funkcije $\Theta_1, \Theta_2, \Theta_3$ simetrične su u odnosu na permutaciju elektrona, dok je funkcija Θ_4 antisimetrična. Faktor $1/\sqrt{2}$ uveden je u Θ_3 i Θ_4 da bi bile normirane.

Kombinovanjem spinskih (9.2.42) sa prostornim (9.2.40) funkcijama dobijaju se četiri antisimetrične ukupne talasne funkcije atoma helijuma (koristi se pravilo:

$$s \cdot s = s, \quad a \cdot a = s, \quad s \cdot a = a$$

sa s je označena simetrična, a sa a antisimetrična funkcija):

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1)\cdot\phi_2(2) - \phi_2(1)\cdot\phi_1(2)]\cdot\alpha(1)\alpha(2) \tag{9.2.43a}$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1)\cdot\phi_2(2) - \phi_2(1)\cdot\phi_1(2)]\cdot\beta(1)\beta(2). \tag{9.2.43b}$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1)\cdot\phi_2(2) - \phi_2(1)\cdot\phi_1(2)]\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \tag{9.2.43c}$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(1)\cdot\phi_2(2) + \phi_2(1)\cdot\phi_1(2)]\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]. \tag{9.2.43d}$$

Kako energija sistema (u okviru aproksimacija koje su usvojene) ne zavisi od spinskog dela talasne funkcije [videti jednačinu (9.2.36)], stanja opisana funkcijama Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 odgovaraće istoj energiji (trostruka degeneracija, tripletno stanje). Stanje opisano sa Ψ_4, ostaje nedegenerisano (singulet).

Pre nego što počnemo s proračunom energija koje odgovaraju singuletnom i tripletnom stanju He atoma, osvrnućemo se na proračun energije osnovnog stanja He atoma u odeljku 9.2.3. Pri izvođenju izraza za očekivanu vrednost energije, tamo se nije eksplicitno vodilo računa o tome da li je talasna funkcija simetrizovana. Međutim, kako smo određivali samo najniže stanje He atoma, za funkcije ϕ_1 i ϕ_2 uzeta je $1s$ orbitala vodonikovog atoma. Ako je, kao u tom slučaju, $\phi_2 = \phi_1 = \phi$, antisimetrična talasna funkcija postaje jednaka nuli, a simterična prostorna funkcija (9.2.40a) je ~ $\phi(1)\ \phi(2)$, tj. upravo onakva kakva je korišćena u računu. U odeljku 9.2.3, dakle, određena je energija singuletnog stanja opisanog funkcijom Ψ_4 (9.2.43d).

Očekivana vrednost energije (9.2.36) sada se izračunava sa funkcijama (9.2.43), odnosno (9.2.40) za opšti slučaj kada je $\phi_1 \neq \phi_2$:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{2}\iint[\phi_1(1)\cdot\phi_2(2)\pm\phi_2(1)\cdot\phi_1(2)]^*\,(h_1+h_2+h_{12}) \qquad (9.2.44)$$
$$[\phi_1(1)\phi_2(2)\pm\phi_2(1)\phi_1(2)]d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

pri čemu se znak „+” odnosi na singuletno, a znak „-” na tripletno stanje. Radi preglednosti, potražićemo posebno očekivane vrednosti za h_1, h_2 i h_{12}. Pri tome, koristimo činjenicu da operator h_1 sadrži samo koordinate i izvode po koordinatama elektrona 1, što omogućuje da se dvostruki integral [u stvari šestostruki, videti primedbu posle jednačine (9.2.36)] rastavi na dva jednostruka (u stvari trostruka) integrala. Dalje, operator h_2 deluje samo na koordinate elektrona 2. Operator h_{12} uključuje koordinate oba elektrona i u tom slučaju razdvajanje dvostrukog integrala nije moguće:

$$\langle h_1\rangle = \frac{1}{2}\iint[\phi_1(1)\cdot\phi_2(2)\pm\phi_2(1)\cdot\phi_1(2)]^*\,h_1[\phi_1(1)\phi_2(2)\pm\phi_2(1)\phi_1(2)]d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 =$$
$$= \frac{1}{2}[\int\phi_1^*(1)h_1\phi_1(1)d\vec{r}_1\int\phi_2^*(2)\phi_2(2)d\vec{r}_2\,\pm \qquad (9.2.45)$$
$$\pm\int\phi_2^*(1)h_1\phi_1(1)d\vec{r}_1\int\phi_1^*(2)\phi_2(2)d\vec{r}_2\,\pm$$
$$\pm\int\phi_1^*(1)h_1\phi_2(1)d\vec{r}_1\int\phi_2^*(2)\phi_1(2)d\vec{r}_2 + \int\phi_2^*(1)h_1\phi_2(1)d\vec{r}_1\int\phi_1^*(2)\phi_1(2)d\vec{r}_2].$$

Pretpostavljamo da su funkcije ϕ_1 i ϕ_2 normirane:

$$\int\phi_1^*(1)\phi_2(1)d\vec{r}_1 = 0$$

tako da se izraz (9.2.45) svodi na:

$$\langle h_1 \rangle = \frac{1}{2}[\int \phi_1^*(1) h_1 \phi_1(1) d\vec{r}_1 + \int \phi_2^*(1) h_1 \phi_2(1) d\vec{r}_1]. \qquad (9.2.46)$$

Ne ulazeći u to kolika je vrednost $< h_1 >$, utvrđujemo samo da je ona jednaka i za singuletno i za tripletno stanje [članovi s različitim znakom iz izraza (9.2.45) su iščezli]. Na potpuno isti način je:

$$\langle h_2 \rangle = \frac{1}{2}[\int \phi_2^*(2) h_2 \phi_2(2) d\vec{r}_2 + \int \phi_1^*(2) h_2 \phi_1(2) d\vec{r}_2]. \qquad (9.2.47)$$

Za h_{12} dobija se:

$$\langle h_{12} \rangle = \frac{1}{2}[\int\int \phi_1^*(1)\phi_2^*(2) h_{12} \phi_1(1)\phi_2(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \pm$$

$$\pm \int\int \phi_2^*(1)\phi_1^*(2) h_{12} \phi_1(1)\phi_2(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \pm \int\int \phi_1^*(1)\phi_2^*(2) h_{12} \phi_2(1)\phi_1(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 +$$

$$+ \int\int \phi_2^*(1)\phi_1^*(2) h_{12} \phi_2(1)\phi_1(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2]. \qquad (9.2.48)$$

U izrazu (9.2.48) javljaju se dve vrste integrala:

$$J = \int\int \phi_1^*(1)\phi_2^*(2) h_{12} \phi_1(1)\phi_2(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 =$$

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int\int \frac{|\phi_1(1)|^2 e |\phi_2^2(2)^2| e}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \qquad (9.2.49)$$

Jednačina (9.2.49) predstavlja tzv. Kulonov integral. Kako je kvadrat talasne funkcije gustina verovatnoće nalaženja elektrona u određenoj tački prostora, izraz $|\phi_1(1)|^2 e$ predstavlja gustinu naelektrisanja elektrona 1, a $|\phi_2(2)|^2 e$ gustinu naelektrisanja elektrona 2. Prema tome, relacija (9.2.49), opisuje Kulonovu interakciju „oblaka" naelektrisanja koji predstavljaju elektrone 1 i 2. Uočava se to da je brojna vrednost drugog Kulonovog integrala koji se javlja u izrazu (9.2.48):

$$J = \int\int \phi_2^*(1)\phi_1^*(2) h_{12} \phi_2(1)\phi_1(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 =$$

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int\int \frac{|\phi_2(1)|^2 e |\phi_1^2(2)^2| e}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \qquad (9.2.50)$$

jednaka vrednosti integrala (9.2.49). Izraz:

$$K = \int\int \phi_2^*(1)\phi_1^*(2) h_{12} \phi_1(1)\phi_2(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \qquad (9.2.51)$$

naziva se integral izmene. On nema klasičnu analogiju (levo od operatora h_{12}, pod integralom, elektron 1 nalazi se u stanju ϕ_2, a desno od operatora nalazi se u stanju ϕ_1) i posledica je simetrizovanja talasne funkcije.

Sabirajući izraze za $< h_1 >$ (9.2.46), $< h_2 >$ (9.2.47) i $< h_{12} >$ (9.2.48), dobija se za očekivanu vrednost energije He atoma:

$$\langle E \rangle = \langle h_1 \rangle + \langle h_2 \rangle + J \pm K \tag{9.2.52}$$

pri čemu se znak „+" u poslednjem članu odnosi na simetričnu linearnu kombinaciju prostornih funkcija, odnosno na singuletno stanje, a znak „-" na antisimetričnu prostornu kombinaciju, odnosno na tripletno stanje. Vrednost K uvek je pozitivna, tako da na osnovu jednačine (9.2.52) sledi da tripletno stanje leži za $2K$ ispod singuletnog stanja obrazovanog od istih jednoelektronskih prostornih funkcija ϕ_1 i ϕ_2. Izraz (9.2.52) pokazuje kako spin elektrona posredno utiče na energiju stanja atoma i onda kada Hamiltonov operator ne sadrži spinske koordinate.

Na kraju ovog poglavlja pokazaćemo da talasne funkcije [(9.2.43a) – (9.2.43d)] mogu da se predstave i u obliku jedne determinante ili linearne kombinacije nekoliko determinanti:

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \phi_1(1)\alpha(1) & \phi_2(1)\alpha(1) \\ \phi_1(2)\alpha(2) & \phi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}; \tag{9.2.53a}$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \phi_1(1)\beta(1) & \phi_2(1)\beta(1) \\ \phi_1(2)\beta(2) & \phi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix}; \tag{9.2.53b}$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{2}\begin{vmatrix} \phi_1(1)\alpha(1) & \phi_2(1)\beta(1) \\ \phi_1(2)\alpha(2) & \phi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix} + \frac{1}{2}\begin{vmatrix} \phi_1(1)\beta(1) & \phi_2(1)\alpha(1) \\ \phi_1(2)\beta(2) & \phi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}; \tag{9.2.53c}$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{2}\begin{vmatrix} \phi_1(1)\alpha(1) & \phi_2(1)\beta(1) \\ \phi_1(2)\alpha(2) & \phi_2(2)\beta(2) \end{vmatrix} - \frac{1}{2}\begin{vmatrix} \phi_1(1)\beta(1) & \phi_2(1)\alpha(1) \\ \phi_1(2)\beta(2) & \phi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix}. \tag{9.2.53d}$$

Svaka od determinanti u izrazima (9.2.53) predstavlja određenu elektronsku konfiguraciju, tj. raspored elektrona po raspoloživim prostorno – spinskim stanjima. Analiza izraza (9.2.43a) i (9.2.53a) za, npr. Ψ_1, pokazuje da ova talasna funkcija predstavlja stanje atoma helijuma u kojem se jedan elektron nalazi u prostornoj orbitali ϕ_1 sa spinom1/2, a drugi u prostornoj ϕ_2 sa spinom, takođe, 1/2. Uvedimo sada pojam spin orbitale. Spinorbitala je proizvod jednoelektronske prostorne talasne funkcije (orbitala) i jednoelektronske spinske funkcije, α ili β. Ako se, na primer, elektron 1 nalazi u prostornoj orbitali ϕ_1 sa spinom 1/2, njegovo stanje predstavljeno je spinorbitalom koja se označava sa S_1:

$$S_1(1) = \phi_1(1)\alpha(1). \tag{9.2.54}$$

Po Paulijevom principu, u jednoj spinorbitali može da se nalazi samo **jedan** elektron.

Analiza talasne funkcije Ψ_1, pokazuje to da kada bi elektroni 1 i 2 mogli da se razlikuju jedan od drugog, tada bismo mogli konstatovati i da se elektron 1, na primer, nalazi u spinorbitali $S_1 = \phi_1\,\alpha$, a elektron 2 u spinorbitali $S_2 = \phi_2\,\alpha$. Ukupna talasna funkcija koja bi odgovarala toj situaciji bila bi: