

複数電子の波動関数：フェルミ粒子

量子力学に従う粒子は区別できない

古典力学に従う粒子は、たとえそれが多数の同種粒子であっても原理的には1個1個を区別して運動を追跡することができる。常に1つ1つの粒子の位置と速度を測定し決定する事ができるからである。ところが、量子力学に従う粒子では事情が全く違っている。ある時刻にそれぞれの粒子の波動関数が重なり合わないように離しても、しばらくの後には波動関数は広がって互いに重なりあい、粒子の1つ1つを区別する事ができなくなる。

この状況を式を用いて表現するにはどの様にしたら良いだろうか。 N 個の同種粒子からなる系を考えよう。粒子の座標 r_i とスピン座標 σ_i をまとめて

$$\xi_i = (r_i, \sigma_i), \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

と書くことにする。ハミルトニアンは $\xi_1 \sim \xi_N$ の関数であるが、一般に任意の座標の交換に対して不変である。したがって、座標 ξ_i と ξ_j を交換をする演算子を P_{ij} と書くと

$$\begin{aligned} P_{ij} H(\xi_1, \dots, \xi_i \dots \xi_j \dots, \xi_N) \\ = H(\xi_1, \dots, \xi_j \dots \xi_i \dots, \xi_N) P_{ij} \\ = H(\xi_1, \dots, \xi_i \dots \xi_j \dots, \xi_N) P_{ij} \end{aligned} \quad (2)$$

となる。(2)は P_{ij} がハミルトニアンと交換する事を意味するから、 N 個の粒子の状態は P_{ij} の固有状態として選ぶ事ができる。それでは P_{ij} の固有状態とは何だろうか。

簡単のために2個の電子を考えその固有状態の波動関数を

$$\Psi_a(\xi_1, \xi_2) \quad (3)$$

と書く事にする。 a は固有状態を指定する添え字である。これに P_{12} を演算すると $P_{12}\Psi_a(\xi_1, \xi_2) = \Psi_a(\xi_2, \xi_1)$ である。今、 $\Psi_a(\xi_1, \xi_2)$ を P_{ij} の固有状態と選んだとしてその固有値を p_a とすると、

$$P_{12}\Psi_a(\xi_1, \xi_2) = \Psi_a(\xi_2, \xi_1) = p_a\Psi_a(\xi_1, \xi_2) \quad (4)$$

と書けるはずである。もう一度 P_{12} を演算すれば、元の波動関数で ξ_1 と ξ_2 を 2 度入れ換えるのだから元の波動関数に戻り、したがって

$$P_{12}^2\Psi_a(\xi_1, \xi_2) = p_a P_{12}\Psi_a(\xi_1, \xi_2) = p_a^2\Psi_a(\xi_1, \xi_2) = \Psi_a(\xi_1, \xi_2) \quad (5)$$

である。(5) から固有値 p_a の 2 乗が $p_a^2 = 1$, すなわち

$$p_a = \pm 1 \quad (6)$$

である。今、2 個の粒子の状態を考えだが、一般に N 個の粒子の状態についてもそのうちの 2 個の粒子の座標を入れかえると $p_a = \pm 1$ の固有値を与える。以上により、量子力学的粒子の状態は、2 個の粒子の座標の入れ替えに対して符号を変えないか(「対称」という)あるいは符号を変えるか(「反対称」という)のいずれかの波動関数で記述される事が分かった。

(2) のようにハミルトニアンと「交換の演算子」 P_{ij} とは可換であるので、波動関数の対称性 (6) は保存される。このことは粒子間の相互作用の有無にかかわらず成立している。我々の知っている量子力学的粒子のすべてについて、 N 個の粒子の波動関数は、粒子の座標の交換に対して、 $p = +1$ であるか $p = -1$ であるかの何れかであって、それが混ざったような状態をとる粒子は無い。さらに、交換に対して $p = +1$ であるか $p = -1$ であるかは、粒子の種類によって決まっているのであって、その状態によって決まっているのではない。対称な波動関数で記述されるものをボーズ粒子(ボゾン)、反対称な波動関数で記述されるものをフェルミ粒子(フェル

ミオン)という。またその統計を各々、ボーズ・アインシュタイン統計、フェルミ・ディラック統計と呼んでいる。一般にスピン角運動量が半奇整数の粒子(電子、中性子、陽子等)はフェルミ粒子であり、0又は整数のもの(光子等)はボーズ粒子である事が知られている。これについては、相対論的量子力学の枠内で、つじつまのあった説明をする事ができる。

対称波動関数と反対称波動関数

具体的に多粒子系の波動関数がどのようなものであるのか考えてみる事にしよう。簡単のために、2個の粒子が中心力ポテンシャルの中にあり粒子間の相互作用は無く、さらにスピン軌道相互作用も無視することにしよう。この時系のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{p}_1^2 + V(r_1) + \frac{1}{2m} \mathbf{p}_2^2 + V(r_2) \quad (7)$$

と与えられる。ハミルトニアンは座標について完全に分離されているから波動関数についても変数分離の形

$$\Psi_a(\xi_1, \xi_2) = \psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) \quad (8)$$

を仮定する事にしよう。(8)を2粒子のシュレディンガー方程式

$$H\Psi_a(\xi_1, \xi_2) = E_a\Psi_a(\xi_1, \xi_2) \quad (9)$$

に代入すると、

$$\begin{aligned} \psi_2(\xi_2)\left\{\frac{1}{2m}\mathbf{p}_1^2 + V(r_1)\right\}\psi_1(\xi_1) + \psi_1(\xi_1)\left\{\frac{1}{2m}\mathbf{p}_2^2 + V(r_2)\right\}\psi_2(\xi_2) \\ = E_a\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) \end{aligned} \quad (10)$$

と書くことができる。両辺を $\psi_1\psi_2$ で割れば

$$\begin{aligned} E_a &= \frac{1}{\psi_1(\xi_1)} \left\{ \frac{1}{2m} \mathbf{p}_1^2 + V(r_1) \right\} \psi_1(\xi_1) \\ &+ \frac{1}{\psi_2(\xi_2)} \left\{ \frac{1}{2m} \mathbf{p}_2^2 + V(r_2) \right\} \psi_2(\xi_2) \end{aligned}$$

であり、右辺第 1 項と第 2 項はそれぞれ ξ_1 と ξ_2 だけの関数となる。したがって各々は実際には ξ_1, ξ_2 によらない定数でなければならない。それを各々 E_1, E_2 と書けば

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{1}{2m} \mathbf{p}_1^2 + V(r_1) \right\} \psi_1(\xi_1) &= E_1 \psi_1(\xi_1) \\ \left\{ \frac{1}{2m} \mathbf{p}_2^2 + V(r_2) \right\} \psi_2(\xi_2) &= E_2 \psi_2(\xi_2) \\ E_a &= E_1 + E_2 \end{aligned} \quad (11)$$

と書き改められる。すなわち 1 粒子のシュレディンガー方程式の解を知れば、それから (8) のように 2 粒子の波動関数を作る事ができる。

しかしこの波動関数は一般に粒子の座標の交換についての固有状態になっていない。

$$P_{12} \Psi_a(\xi_1, \xi_2) = P_{12} \psi_1(\xi_1) \psi_2(\xi_2) = \psi_1(\xi_2) \psi_2(\xi_1) \quad (12)$$

だからである。ところで

$$\Psi_b(\xi_1, \xi_2) = \psi_2(\xi_1) \psi_1(\xi_2) \quad (13)$$

を考えると、これも同じ固有エネルギー E_a をもった固有関数で

$$H \Psi_b(\xi_1, \xi_2) = E_a \Psi_b(\xi_1, \xi_2) \quad (14)$$

を満たしているはずである。したがって Ψ_a と Ψ_b との線形結合

$$\begin{aligned} \Psi(\xi_1, \xi_2) &= a \Psi_a(\xi_1, \xi_2) + b \Psi_b(\xi_1, \xi_2) \\ &= a \psi_1(\xi_1) \psi_2(\xi_2) + b \psi_2(\xi_1) \psi_1(\xi_2) \end{aligned} \quad (15)$$

をとっても、それはハミルトニアンと同じ固有エネルギー E_a をもった固有関数となっている。

次にこのような形の波動関数で粒子の交換 P_{12} の固有関数となるものが作れないかを考えてみよう。

$$\begin{aligned} P_{12} \{ a \psi_1(\xi_1) \psi_2(\xi_2) + b \psi_2(\xi_1) \psi_1(\xi_2) \} \\ &= \{ a \psi_1(\xi_2) \psi_2(\xi_1) + b \psi_2(\xi_2) \psi_1(\xi_1) \} \\ &= \pm \{ a \psi_1(\xi_1) \psi_2(\xi_2) + b \psi_2(\xi_1) \psi_1(\xi_2) \} \end{aligned}$$

であるから、

$$a = b \quad (p = +1), \quad \text{または} \quad a = -b \quad (p = -1) \quad (16)$$

でなければならない。 ψ_1 と ψ_2 が同じ波動関数である場合には、 $p = -1$ (反対称)に対応する波動関数は現れない事に注意しよう。 ψ_1 と ψ_2 とが異なる場合には、それらは互いに直交して

$$\sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \psi_i(\xi)^* \psi_j(\xi) = \delta_{ij} \quad (17)$$

であるようにしておこう。たとえば

$$\begin{aligned} \psi_i(\xi) &= \phi_n(\mathbf{r})\alpha(\sigma) \quad \text{または} \quad \psi_j(\xi) = \phi_m(\mathbf{r})\beta(\sigma) \\ \int d\mathbf{r} \phi_n(\mathbf{r})^* \phi_m(\mathbf{r}) &= \delta_{nm} \end{aligned} \quad (18)$$

などであり、波動関数の状態を指定する添え字 i, j は、波動関数の軌道の様子とスピン状態を一緒に指し示している。1 粒子波動関数を (17) で規格直交化して、2 粒子の波動関数を 1 に規格化すると、上の式で $a = 1/\sqrt{2}$ ととるべきであり、

$$\begin{aligned} \Psi(\xi_1, \xi_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) \pm \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2) \} \\ & \quad (\pm \text{は } p = \pm 1 \left\{ \begin{array}{l} \text{ボーズ粒子} \\ \text{フェルミ粒子} \end{array} \right\} \text{に対応する。}) \end{aligned} \quad (19)$$

と定められる。実際、規格化は

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Psi(\xi_1, \xi_2)^* \Psi(\xi_1, \xi_2) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \{ |\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2)|^2 + |\psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2)|^2 \\
&\quad \pm \psi_1(\xi_1)^* \psi_2(\xi_2)^* \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2) \pm \psi_2(\xi_1)^* \psi_1(\xi_2)^* \psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) \} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} \int d\mathbf{r}_1 |\psi_1(\xi_1)|^2 \sum_{\sigma_2} \int d\mathbf{r}_2 |\psi_2(\xi_2)|^2 \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} \int d\mathbf{r}_1 |\psi_2(\xi_1)|^2 \sum_{\sigma_2} \int d\mathbf{r}_2 |\psi_1(\xi_2)|^2 \\
&\quad \pm \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} \int d\mathbf{r}_1 \psi_1(\xi_1)^* \psi_2(\xi_1) \sum_{\sigma_2} \int d\mathbf{r}_2 \psi_2(\xi_2)^* \psi_1(\xi_2) \\
&\quad \pm \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} \int d\mathbf{r}_1 \psi_2(\xi_1)^* \psi_1(\xi_1) \sum_{\sigma_2} \int d\mathbf{r}_2 \psi_1(\xi_2)^* \psi_2(\xi_2) \\
&= \frac{1}{2} \cdot 1 \cdot 1 + \frac{1}{2} \cdot 1 \cdot 1 \pm \frac{1}{2} \cdot 0 \cdot 0 \pm \frac{1}{2} \cdot 0 \cdot 0 = 1
\end{aligned}$$

と確かめられる。(19)の内、反対称波動関数は、行列式を用いて次のように書く事もできる。

$$\Psi_{Fermi}(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) \end{vmatrix} \quad (20)$$

粒子の状態が行列式の行に、粒子の座標が列に対応する。2個の1粒子状態を用いた2!個の2粒子波動関数の線形結合によって、粒子座標の交換に関して固有状態となる2粒子固有状態が表された。この反対称性は、行列式の性質と対応しているわけである。

以上の議論は、一般の相互作用があるN粒子に関しても、その1粒子波動関数が決まっているとすると、そのまま適用できる。規格直交化さ

れた 1 粒子波動関数 $\{\psi_i(\xi)\}$ を用いて、 N 粒子の状態が

ボーズ粒子：

$$\Psi(\xi_1, \dots, \xi_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \psi_1(\xi_{P1}) \psi_2(\xi_{P2}) \cdots \psi_N(\xi_{PN}),$$

フェルミ粒子：

$$\begin{aligned} \Psi(\xi_1, \dots, \xi_n) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sgn}(P) \psi_1(\xi_{P1}) \psi_2(\xi_{P2}) \cdots \psi_N(\xi_{PN}) \quad (21) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \cdots & \psi_1(\xi_N) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \cdots & \psi_2(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\xi_1) & \psi_N(\xi_2) & \cdots & \psi_N(\xi_N) \end{vmatrix} \end{aligned}$$

と表される。フェルミ粒子の場合の行列式波動関数をスレーター行列式という。 P の和は $1 \sim N$ の N 個の数字に関する置換に関するものである。 n 個の数字の置換は、全部で $n!$ 個あるため、規格化定数として $1/\sqrt{N!}$ があられる。置換 P は

$$P : (1, 2, 3, \dots, N) \rightarrow (P1, P2, \dots, PN)$$

という並べ換えを粒子の座標について行うことを意味する。 $\text{sgn}(P)$ は ± 1 の値であり、この置換が偶置換なら $+1$ 、奇置換なら -1 をとる。こうして多粒子の対称性 (6) を満足する波動関数を作る事ができた。1 粒子波動関数 $\psi_i(\xi)$ をどう決めたらよいかは、別に考える。

N 個のフェルミ粒子の波動関数が (21) の第 2 式のような意味について触れよう。 N 個の 1 粒子波動関数 $\psi_1 \sim \psi_N$ のうち、 ψ_1 と ψ_2 が同一であるとしよう。2 つの行が全く同じになる場合には、行列式の値は 0 になるという基本的な性質によって、(21) の第 2 式は恒等的にゼロになる。別の言い方をすれば、1 つの 1 粒子状態にはフェルミ粒子を 1 個しか収容する事はできない。これをパウリの「排他律」という。一方、ボーズ粒子の場合には、(21) の第 1 式からこの制限は導かれないから、粒子の統計に

対する制限はなく、1つの1粒子量子状態にいくつでも同一粒子を収容する事ができる。

多粒子波動関数の意味するところ

1粒子波動関数の絶対値の2乗 $|\psi(\xi)|^2$ は、1個の粒子をある空間座標 r , スピン座標 $\sigma = \pm 1$ に見いだす確率である。 N 粒子の場合にも

$$P_N(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = |\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)|^2 \quad (22)$$

は、 N 個の粒子を $\xi_1 = (r_1, \sigma_1)$, ξ_2, \dots, ξ_N に見いだす確率と考えなければならぬ。 N 個の粒子の内、 $N - 1$ 個の粒子を見いだしてしまえば残りは1個の粒子に対する確率になる。これがつじつまのあった理解の仕方であることを示そう。

$$P_1(\xi) = \sum_{\sigma_2 \dots \sigma_N} \int dr_2 \dots dr_N P_N(\xi, \xi_2, \dots, \xi_N) \quad (23)$$

は残り1個の粒子を ξ に見いだす確率であり、

$$P_2(\xi_1, \xi_2) = \sum_{\sigma_3 \dots \sigma_N} \int dr_3 \dots dr_N P_N(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \quad (24)$$

は2個の粒子を ξ_1, ξ_2 に見いだす確率となる。簡単のために $N = 2$ について書き下すと、

$$\begin{aligned} P_2(\xi_1, \xi_2) &= \frac{1}{2} \{ |\psi_1(\xi_1)|^2 |\psi_2(\xi_2)|^2 + |\psi_2(\xi_1)|^2 |\psi_1(\xi_2)|^2 \\ &\quad - \psi_1(\xi_1)^* \psi_2(\xi_1) \cdot \psi_2(\xi_2)^* \psi_1(\xi_2) \\ &\quad - \psi_2(\xi_1)^* \psi_1(\xi_1) \cdot \psi_1(\xi_2)^* \psi_2(\xi_2) \} \end{aligned} \quad (25)$$

である。これを ξ_2 で和・積分を実行すれば (17) があるから

$$P_1(\xi) = \sum_{\sigma_2} \int dr_2 P_2(\xi, \xi_2) = \frac{1}{2} \{ |\psi_1(\xi)|^2 + |\psi_2(\xi)|^2 \} \quad (26)$$

となる。(26) はちょうど ψ_1 という状態と ψ_2 という状態の両方に均等に粒子が詰まっている場合の、粒子密度を表している。

$$\psi_1(\xi) = \phi_1(\mathbf{r})\alpha(\sigma), \quad \psi_2(\xi) = \phi_2(\mathbf{r})\alpha(\sigma) \quad (27a)$$

ならば

$$P_1(\xi) = \frac{1}{2} \{ |\phi_1(\mathbf{r})|^2 + |\phi_2(\mathbf{r})|^2 \} |\alpha(\sigma)|^2$$

$$\sum_{\sigma} P_1(\xi) = \frac{1}{2} \{ |\phi_1(\mathbf{r})|^2 + |\phi_2(\mathbf{r})|^2 \} \quad (27b)$$

であり、また

$$\psi_1(\xi) = \phi_1(\mathbf{r})\alpha(\sigma), \quad \psi_2(\xi) = \phi_2(\mathbf{r})\beta(\sigma) \quad (28a)$$

ならば

$$P_1(\xi) = \frac{1}{2} \{ |\phi_1(\mathbf{r})|^2 |\alpha(\sigma)|^2 + |\phi_2(\mathbf{r})|^2 |\beta(\sigma)|^2 \}$$

$$\sum_{\sigma} P_1(\xi) = \frac{1}{2} \{ |\phi_1(\mathbf{r})|^2 + |\phi_2(\mathbf{r})|^2 \} \quad (28b)$$

などである。この2つの例(27)~(28)では、スピンまで考慮した粒子密度(スピン密度)は2つの状態で異なるが、スピン座標に関して和を取ってしまった(スピン座標を気にしなければ)単なる粒子密度に関しては同一である事を示している。

(27a) (28a) の時、2粒子密度 $P_2(\xi_1, \xi_2)$ はどうなるだろうか。(25)より直接計算できる。2つの状態のスピンが同じ時は

$$(27a) \rightarrow \sum_{\sigma_1 \sigma_2} P_2(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{2} \{ |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2 |\phi_2(\mathbf{r}_2)|^2 + |\phi_2(\mathbf{r}_1)|^2 |\phi_1(\mathbf{r}_2)|^2$$

$$- \phi_1(\mathbf{r}_1)^* \phi_2(\mathbf{r}_1) \cdot \phi_2(\mathbf{r}_2)^* \phi_1(\mathbf{r}_2) - \phi_2(\mathbf{r}_1)^* \phi_1(\mathbf{r}_1) \cdot \phi_1(\mathbf{r}_2)^* \phi_2(\mathbf{r}_2) \} \quad (29a)$$

となり、一方2状態のスピンが異なるときは

$$(28a) \rightarrow \sum_{\sigma_1 \sigma_2} P_2(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{2} \{ |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2 |\phi_2(\mathbf{r}_2)|^2 + |\phi_2(\mathbf{r}_1)|^2 |\phi_1(\mathbf{r}_2)|^2 \} \quad (29b)$$

となる。(28a) の時には $\sum_{\sigma} \psi_1^*(\xi) \psi_2(\xi) = 0$ となるからである。(29a) と (29b) の差

$$\begin{aligned} & -\phi_1(\mathbf{r}_1)^* \phi_2(\mathbf{r}_1) \cdot \phi_2(\mathbf{r}_2)^* \phi_1(\mathbf{r}_2) - \phi_2(\mathbf{r}_1)^* \phi_1(\mathbf{r}_1) \cdot \phi_1(\mathbf{r}_2)^* \phi_2(\mathbf{r}_2) \} \\ & = -2Re\{\phi_1(\mathbf{r}_1)^* \phi_2(\mathbf{r}_1) \cdot \phi_2(\mathbf{r}_2)^* \phi_1(\mathbf{r}_2)\} \end{aligned}$$

は $r_1 \simeq r_2$ の領域では

$$\phi_1(\mathbf{r}_1)^* \phi_1(\mathbf{r}_2) \simeq |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2$$

であるから負の寄与をなす。すなわち 2 個の粒子は、スピンの同一の状態の方がスピンの異なる状態に比べて、空間的にも避け合う。これはフェルミ粒子間に働くパウリの排他律の空間的な現れに他ならない。

N 個のフェルミ粒子の場合にも、2 粒子の確率を計算しておこう。 ξ_3 から ξ_N まで $N - 2$ 個の空間座標の積分とスピン座標の和をとることにする。行列式の定義により (21) の置換を座標ではなく波動関数の方に付けてもよいから、

$$\begin{aligned} P_2(\xi_1, \xi_2) &= \sum_{\sigma_3 \cdots \sigma_N} \int \cdots \int d\mathbf{r}_3 \cdots d\mathbf{r}_N |\Psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3 \cdots \xi_N)|^2 \\ &= \sum_{\sigma_3 \cdots \sigma_N} \int \cdots \int d\mathbf{r}_3 \cdots d\mathbf{r}_N \frac{1}{N!} \sum_P \sum_Q \text{sgn}(P) \text{sgn}(Q) \\ &\quad \psi_{P1}(\xi_1)^* \psi_{Q1}(\xi_1) \cdot \psi_{P2}(\xi_2)^* \psi_{Q2}(\xi_2) \cdots \psi_{PN}(\xi_N)^* \psi_{QN}(\xi_N) \cdot \end{aligned} \quad (30)$$

である。これは規格直交条件 (17) によって

$$P3 = Q3, P4 = Q4, \cdots, PN = QN \quad (31)$$

というように $N - 2$ 個の状態の組は完全に一致していなくてはならない。残りの 2 つの組については

$$P1 = Q1, P2 = Q2 ; (\text{sgn}(P) = \text{sgn}(Q)) \quad (32a)$$

であるか

$$P1 = Q2, P2 = Q1 ; (\text{sgn}(P) = -\text{sgn}(Q)) \quad (32b)$$

であるかしかない。全部で $N!$ 個ある置換に対して、 $P1$ の選び方が 1 から N まで N 通り、 $P2$ の選び方は残りの $N - 1$ 通りあって、全部で $N(N - 1)$ 通りある。 $\xi_3 \sim \xi_N$ についての積分・和を実行してしまえば、残りのすべての置換は区別しないでもよい。ここで 1 の置換 $P1$ を改めて p_1 と書き

$$P_2(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{p_1=1}^N \sum_{\substack{p_2=1 \\ (p_2 \neq p_1)}}^N \{ |\psi_{p_1}(\xi_1)|^2 |\psi_{p_2}(\xi_2)|^2 - \psi_{p_1}(\xi_1)^* \psi_{p_2}(\xi_1) \cdot \psi_{p_2}(\xi_2)^* \psi_{p_1}(\xi_2) \} \quad (33)$$

が得られる。これが (25) に対応した一般の場合の 2 粒子密度である。さらに、 ξ_2 の積分・和を実行すれば (17) により

$$P_1(\xi_1) = \sum_{\sigma_2} \int d\mathbf{r}_2 P_2(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{N} \sum_{p_1=1}^N |\psi_{p_1}(\xi_1)|^2 \quad (34)$$

となる。つまり N 個の状態に、1 粒子を見いだす確率が均等に配分されている。