

分子の項記号

- 電子の配置を決める。
- 電子の詰まっている軌道の λ の和をとって記号で表す。
 - $\sum_i \lambda_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ を $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \dots$ で表す。
- 上の記号の左肩にスピン多重度 $2S + 1$ を書く。
 - $S = \sum_i s_i$ で合成スピン角運動量を求め、上の記号の左肩にスピン多重度 $2S + 1$ を書く。
- 全波動関数が分子の中心に対して対称か反対称かを、上の記号の右下に g, u で表す。
 - 分子軌道を原子軌道の積で表すかぎりにおいては、次のようにして g, u を決める¹。
 - * u (反対称) 軌道に偶数個の電子が詰まっている場合は全波動関数は g となる。
 - * u (反対称) 軌道に奇数個の電子が詰まっている場合は全波動関数は u となる。

¹ g を偶数、 u を奇数と読み替えれば、奇数 \times 偶数 = 偶数、奇数 \times 奇数 = 奇数となり、よく知っている規則と一致する。