一、波函数的宇称

$$u_{n\ell m_\ell}(r,\pi-\theta,\pi+\varphi)=(-1)^\ell u_{n\ell m_\ell}(r,\theta,\varphi)$$

当 ℓ 为偶数时为正，那时，$u_{n\ell m_\ell}$ 称之为具有偶宇称；

当 ℓ 为奇数时为负，那时 $u_{n\ell m_\ell}$ 具有奇宇称。

$\Rightarrow$波函数的奇偶性仅由 ℓ 的值决定。

二、几个有用的平均值

$$<r>=\frac{a_0}{2Z}\left[3n^2-\ell(\ell+1)\right]$$

$$<\frac{1}{r}>=\frac{Z}{n^2a_0}$$

$$<\frac{1}{r^3}>=\frac{Z^3}{a_0^3n^3\ell(\ell+1/2)(\ell+1)}$$

三、碱金属原子光谱的实验规律

（以 Li 为例）

主线系 $${}_{p}\tilde{\nu}_{n}=\frac{R}{(2-\Delta_{s})^{2}}-\frac{R}{(n-\Delta_{p})^{2}}$$ **n=2, 3, 4···**

第二辅线系（锐线系） $${}_{s}\tilde{\nu}_{n}=\frac{R}{(2-\Delta_{p})^{2}}-\frac{R}{(n-\Delta_{s})^{2}}$$ **n=3, 4, 5, ···**

第一辅线系（漫线系） $${}_{d}\tilde{\nu}_{n}=\frac{R}{(2-\Delta_{p})^{2}}-\frac{R}{(n-\Delta_{d})^{2}}$$ **n=3, 4, 5, ···**

柏格曼线系（基线系） $${}_{f}\tilde{\nu}_{n}=\frac{R}{(3-\Delta_{d})^{2}}-\frac{R}{(n-\Delta_{f})^{2}}$$ **n=4, 5, 6, ···**

光谱项变为 $T=\frac{R}{(n-\Delta_l)^2}=\frac{Z^{*2}R}{n^2}$ Z*为有效核电荷数＞1

Δ_l 称为量子数亏损。随 ℓ 增大，Δ_l 很快→**0**。

能量与 **n** 和 **l** 的值有关。同一 **n** 值，**l** 越小，能级越低。

能量比氢原子相应的能级低

主线系	$\mathrm{nP}\rightarrow 2S$	**n=2, 3, 4…**
第二辅线系（锐线系）	$\mathrm{nS}\rightarrow 2P$	**n=3, 4, 5…**
第一辅线系（漫线系）	$\mathrm{nD}\rightarrow 2P$	**n=3, 4, 5…**
柏格曼线系（基线系）	$\mathrm{nF}\rightarrow 3D$	**n=4, 5, 6…**

⇒选择定则 $\Delta l=\pm 1$

四、电子自旋假设

电子不是点电荷，它除了轨道运动以外，还有自旋运动。

自旋角动量 $S=\sqrt{s(s+1)}\hbar$，$s=\dfrac{1}{2}$ 称为自旋角动量量子数

$$S_z=m_s\hbar,\quad m_s=\pm\frac{1}{2}$$，称为磁自旋量子数

自旋磁距 $\vec{\mu}_s=-\dfrac{e}{m_e}\vec{s}$，负号表示二者方向相反。

自旋是电子的固有属性之一，完全不能用任何经典物理的语言加以描述，只能用量子力学来描述。

相对论量子力学建立之后，电子自旋不再是假设，而是理论的产物。