

电子组态中包含两个或两个以上 非闭合壳层时原子静电能矩阵元的 一种计算方法

孙 军 强

提 要 应用 Racah 代数和反对称化子技巧, 求得了 LS 耦合下组态为 $l^n l'^n l''^{n''} \dots$ 的原子静电能矩阵元。在矩阵元的表达式中只含有 $6j$ 、 $9j$ 符号和单电子主亲态比系数。因此, 可以比较容易地算出原子静电能。

有时烧蚀蒸汽中包含原子序数较高的原子或离子。利用这种方法可以计算出它们的能级。

1. 引 言

宇航技术中, 时常遇到需要计算高温气体的热力学函数问题。当用物理力学方法进行这类计算时, 首先必须具有气体中各组分的配分函数, 因而求出原子各激发态的能量是一项很重要的工作^[1,2]。

当高温气体中含有原子序数较高的原子或其离子时, 由于它们的电子组态复杂, 可能包含多个非闭合壳层, 计算起来相当困难。对于仅含一个非闭合壳层, 即 l^n 的情况, Nielson 和 Koster^[3] 给出了计算结果。对于 $l^n l'$ 组态, Slater^[4], Condon 和 Odabasi^[5] 也给出了计算结果。对于 $l^n l'^n$ 或更复杂的 $l^n l'^n l''^{n''} \dots$ 组态, Chisholm 等^[6,7] 提出可以利用附亲态比系数来计算。但附亲态比系数的计算相当复杂。事实上文献^[6,7] 仅限于给出对简单的 $s^n s'^n p^{n''}$ 组态的计算结果和 $l^2 l'^2$ 组态的主、附亲态比系数。

我们利用 Racah 代数和 S_n 群中反对称化子技巧, 得出一种计算 $l^n l'^n$ 组态在 LS 耦合下原子静电能矩阵元的新方法。按照此种方法可以推导出静电能矩阵元的明显表达式, 式中仅含单电子主亲态比系数及 $6j$ 、 $9j$ 符号, 因而计算起来相当简便。比起 Chisholm 等提出的利用附亲态比系数法显然优越。这种方法可以毫无困难地推广到处理 $l^n l'^n l''^{n''} \dots$ 组态。本文以 $l^n l'^n l''^{n''}$ 组态为例, 进行了讨论。

2. $l^n l^{n'}$ 组态的静电能矩阵元

设 $A^{(N)}(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} (-1)^{\delta_P} P$ 为 S_N 群中的反对称化子, 其中 δ_P 为 P 的宇称, $P \in S_N$. 再设 $\psi(1, 2, \dots, N)$ 和 $\phi(1, 2, \dots, N)$ 为任意两个 N 电子波函数, 则

$$\begin{aligned} & \langle P\psi(1, 2, \dots, N) | \phi(1, 2, \dots, N) \rangle \\ &= \langle P^{-1} P\psi(1, 2, \dots, N) | P^{-1} \phi(1, 2, \dots, N) \rangle \\ &= \langle \psi(1, 2, \dots, N) | P^{-1} \phi(1, 2, \dots, N) \rangle \end{aligned} \quad (1)$$

所以

$$\begin{aligned} & \langle A^{(N)}\psi(1, 2, \dots, N) | \phi(1, 2, \dots, N) \rangle \\ &= \langle \psi(1, 2, \dots, N) | A^{(N)}\phi(1, 2, \dots, N) \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

$A^{(N)}$ 还有下列性质^[7]:

$$PA^{(N)} = (-1)^{\delta_P} A^{(N)} \quad (3)$$

$$A^{(N)}A^{(N)} = A^{(N)} \quad (4)$$

$$A^{(n)}A^{(N)} = A^{(N)} \quad (n \leq N) \quad (5)$$

$$A^{(N)} = \frac{n_1! n_2! \dots n_f!}{(n_1 + n_2 + \dots + n_f)!} \sum_i (-1)^{\delta_{Q_i}} A^{(n_1)} A^{(n_2)} \dots A^{(n_f)} \quad (6)$$

$$N = n_1 + n_2 + \dots + n_f$$

$Q_i(S_{n_1} \otimes S_{n_2} \otimes \dots \otimes S_{n_f})$ 是相对于 S_N 的子群 $S_{n_1} \otimes S_{n_2} \otimes \dots \otimes S_{n_f}$ 的陪集。

波函数 $|l^n(\alpha_1 S_1 L_1); l^{n'}(\alpha'_1 S'_1 L'_1)SL\rangle$ 对前 n 个电子和后 n' 个电子已反对称化, 但不是总反对称波函数。总反对称波函数可由下列方式得到:

$$\begin{aligned} & |l^n(\alpha_1 S_1 L_1); l^{n'}(\alpha'_1 S'_1 L'_1)SL\rangle \\ &= CA^{(n+n')} |l^n(\alpha_1 S_1 L_1); l^{n'}(\alpha'_1 S'_1 L'_1)SL\rangle \end{aligned} \quad (7)$$

$$\text{其中归一因子} \quad C = [(n+n')! / n! n'!]^{1/2} \quad (8)$$

设 h_0 是零级近似单电子 Hamilton 算符, $\psi_{nlm_l m_s}$ 为零级近似单电子波函数, 它是 h_0 和 l^2 的本征函数。

$|l^n(\alpha_1 S_1 L_1); l^{n'}(\alpha'_1 S'_1 L'_1)SL\rangle$ 仍然是 h_{0i} 和 l_i^2 的本征函数, $i=1, 2, \dots, n+n'$, 且 $1 \leq i \leq n$ 时, h_{0i} 和 l_i^2 的本征值与 i 无关。这个结论同样对 $n+1 \leq i \leq n+n'$ 的电子成立。对 $1 \leq i \leq n$, $n+1 \leq j \leq n+n'$, h_{0i}, l_i^2 的本征值与 h_{0j}, l_j^2 的本征值至少有一个不同。

静电能算符为

$$G = \sum_{i < j} g_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, N \quad (9)$$

它是 $n+n'$ 个电子的全对称算符, 因而

$$PG = GP, \quad P \in S_N, N = n+n' \quad (10)$$

$$A^{(N)}G = GA^{(N)} \quad (11)$$

$l^n l'^{n'}$ 组态的静电能矩阵元为:

$$\begin{aligned} & \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'} (\alpha'_1 S'_1 L'_1) SL | G | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL \rangle \\ &= C^2 \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'} (\alpha'_1 S'_1 L'_1) SL | \\ & \quad (\sum g_{rk} + \sum g_{mp} + \sum_{\substack{i \leq n \\ j > n}} g_{ij}) A^{(N)} | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL \rangle \\ &= I_1 + I_2 + I_3 \end{aligned} \quad (12)$$

其中

$$\begin{aligned} I_1 &= C^2 \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'} (\alpha'_1 S'_1 L'_1) SL | \sum g_{rk} A^{(N)} \\ & \quad | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL \rangle \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= C^2 \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'} (\alpha'_1 S'_1 L'_1) SL | \sum g_{mp} A^{(N)} \\ & \quad | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL \rangle \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} I_3 &= C^2 \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'} (\alpha'_1 S'_1 L'_1) SL | \sum_{\substack{i \leq n \\ j > n}} g_{ij} A^{(N)} \\ & \quad | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

式中 $N = n + n'$, $\sum g_{rk}$ 是前 n' 个电子之间的静电能算符, $\sum g_{mp}$ 是后 n' 个电子之间的静电能算符, $\sum_{\substack{i \leq n \\ j > n}} g_{ij}$ 是前 n 个电子与后 n' 个电子的静电能算符。

$$\begin{aligned} I_1 &= C^2 \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'} (\alpha'_1 S'_1 L'_1) SL | \sum g_{rk} \frac{n! n'!}{(n+n')!} \\ & \quad \sum_{Q_i} (-1)^{\delta_{Q_i}} Q_i A^{(n)} A^{(n')} | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL \rangle \\ &= \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'} (\alpha'_1 S'_1 L'_1) SL | \sum g_{rk} \sum_{Q_i} (-1)^{\delta_{Q_i}} Q_i \\ & \quad | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL \rangle \end{aligned} \quad (16)$$

$\{Q_i(S_n \otimes S_{n'})\}$ 的 $\{Q_i\}$ 中除单位元素(1)外, 别的任何一个 Q_i 不可能属于 S_n 的子群 $S_n \otimes S_{n'}$, 即 Q_i 作用在 $|l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL\rangle$ 上, 至少要把后 n' 个电子坐标中的一个, 不妨设为第 j 个 ($j > n$) 电子的坐标, 调到 $l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1)$ 中, 由于 $\sum g_{rk}$ 只与前 n 个坐标有关, $\sum g_{rk}$ 与 h_{oj} , l_j^2 可交换, 但 h_{oj} , l_j^2 作用在左矢和右矢上得到的本征值至少有一个不同, 所以除(1)外, 别的 Q_i 对应的积分为零。于是

$$\begin{aligned} I_1 &= \sum_{\substack{M_{L_1} M_{L'_1} M_{\widetilde{L}_1} M_{\widetilde{L}'_1} \\ M_{S_1} M_{S'_1} M_{\widetilde{S}_1} M_{\widetilde{S}'_1}}} C(L_1 L'_1 L, M_{L_1} M_{L'_1} M_L) \\ & \quad C(S_1 S'_1 S, M_{S_1} M_{S'_1} M_S) C(\widetilde{L}_1 \widetilde{L}'_1 L, M_{\widetilde{L}_1} M_{\widetilde{L}'_1} M_L) \\ & \quad C(\widetilde{S}_1 \widetilde{S}'_1 S, M_{\widetilde{S}_1} M_{\widetilde{S}'_1} M_S) \langle l'^{n'} \alpha'_1 S'_1 L'_1 M_{L'_1} M_{S'_1} | l'^{n'} \widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1 M_{\widetilde{L}'_1} M_{\widetilde{S}'_1} \rangle \\ & \quad \langle l^n \alpha_1 S_1 L_1 M_{L_1} M_{S_1} | \sum g_{rk} | l^n \widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1 M_{\widetilde{L}_1} M_{\widetilde{S}_1} \rangle \\ &= \delta(S_1 L_1, \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) \delta(\alpha'_1 S'_1 L'_1, \widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) \langle l^n \alpha_1 S_1 L_1 | \sum g_{rk} | l^n \widetilde{\alpha}_1 S_1 L_1 \rangle \end{aligned} \quad (17)$$

式中 $C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m)$ 是 Clebsch-Gordan 系数。

同理

$$I_2 = \delta(\alpha_1 S_1 L_1, \widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) \delta(S'_1 L'_1, \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) \quad (18)$$

$$\begin{aligned} & \langle l'^{n'} \alpha'_1 S'_1 L'_1 | \sum g_{np} | l'^{n'} \widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1 \rangle \\ I_3 = C^2 \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'} (\alpha'_1 S'_1 L'_1) SL | \\ & \sum_{j \geq n} g_{ij} A^{(N)} | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL \rangle \end{aligned} \quad (19)$$

上式中左矢对前 n 个粒子和后 n' 个电子分别反对称，右矢是全反对称波函数，算符 g_{ij} , $i = 1, 2, \dots, n$, $j = n+1, \dots, n+n'$ 的矩阵元都等于 $g_{nn+n'}$ 的矩阵元，因此

$$\begin{aligned} I_3 &= nn' C^2 \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'} (\alpha'_1 S'_1 L'_1) SL | \\ & g_{nn+n'} A^{(N)} | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL \rangle \\ &= nn' \sum_{Q_i} (-1)^{\delta_{Q_i}} \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'} (\alpha'_1 S'_1 L'_1) SL | \\ & g_{nn+n'} Q_i | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL \rangle \end{aligned}$$

由于 $g_{nn+n'}$ 只与 $\vec{r}_n, \vec{r}_{n+n'}$ 有关，要积分值不为零， Q_i 作用在 $|l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'} (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) SL\rangle$ 上必须使得前 $n-1$ 个电子的坐标保留在 $|l^n \widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1\rangle$ 中，后 $n'-1$ 个电子的坐标保留在 $|l'^{n'} \widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1\rangle$ 中，否则该项为零，因为这些电子的算符 h_0, l^2 作用到 I_3 的左矢和右矢上不能得到全相同值。显然 (1)， $(n, n+n')$ 是集合 $\{Q_i\}$ 中的元素，且满足上面的条件。由陪集性质知， $\{Q_i\}$ 中别的元素都不能满足这个条件。所以

$$\begin{aligned} I_3 &= nn' \sum_{\substack{\alpha_2 S_2 L_2 \\ \widetilde{\alpha}_2 \widetilde{S}_2 \widetilde{L}_2}} \sum_{\substack{\alpha'_2 S'_2 L'_2 \\ \widetilde{\alpha}'_2 \widetilde{S}'_2 \widetilde{L}'_2}} G(l^{n-1} \alpha_2 S_2 L_2 | l^n \alpha_1 S_1 L_1) \\ & G(l'^{n'-1} \alpha'_2 S'_2 L'_2 | l'^{n'} \alpha'_1 S'_1 L'_1) G(l^{n-1} \widetilde{\alpha}_2 \widetilde{S}_2 \widetilde{L}_2 | l^n \widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) \\ & G(l'^{n'-1} \widetilde{\alpha}'_2 \widetilde{S}'_2 \widetilde{L}'_2 | l'^{n'} \widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) \\ & \langle l^{n-1} (\alpha_2 S_2 L_2); l S_1 L_1; l'^{n'-1} (\alpha'_2 S'_2 L'_2); l' S'_1 L'_1; SL | \\ & g_{nn+n'} [1 - (n, n+n')] \\ & | l^{n-1} (\widetilde{\alpha}_2 \widetilde{S}_2 \widetilde{L}_2); l \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1; l'^{n'-1} (\widetilde{\alpha}'_2 \widetilde{S}'_2 \widetilde{L}'_2); l' \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1; SL \rangle \end{aligned} \quad (20)$$

记 $g'_{nn+n'} = g_{nn+n'} [1 - (n, n+n')]$ ，则 $g'_{nn+n'}$ 只与第 n 个和第 $n+n'$ 个电子的坐标有关。

定义

$$\begin{aligned} I_4 &= \langle l^{n-1} (\alpha_2 S_2 L_2); l S_1 L_1; l'^{n'-1} (\alpha'_2 S'_2 L'_2); l' S'_1 L'_1; SL | \\ & g'_{nn+n'} | l^{n-1} (\widetilde{\alpha}_2 \widetilde{S}_2 \widetilde{L}_2); l \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1; l'^{n'-1} (\widetilde{\alpha}'_2 \widetilde{S}'_2 \widetilde{L}'_2); l' \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1; SL \rangle \\ &= \sum_{L_A L_B S_A S_B} \sum_{L_C L_D S_C S_D} \begin{pmatrix} L_2 & l & L_1 \\ L'_2 & l' & L'_1 \\ L_A & L_B & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widetilde{L}_2 & l & \widetilde{L}_1 \\ \widetilde{L}'_2 & l' & \widetilde{L}'_1 \\ L_C & L_D & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_2 & \frac{1}{2} & S_1 \\ S'_2 & \frac{1}{2} & S'_1 \\ S_A & S_B & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widetilde{S}_2 & \frac{1}{2} & \widetilde{S}_1 \\ \widetilde{S}'_2 & \frac{1}{2} & \widetilde{S}'_1 \\ S_C & S_D & S \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& [(2L_1+1)(2L'_1+1)(2L_A+1)(2L_B+1)(2\tilde{L}_1+1)(2\tilde{L}'_1+1)(2L_C+1) \\
& (2L_D+1)(2S_1+1)(2S'_1+1)(2S_A+1)(2S_B+1)(2\tilde{S}_1+1) \\
& (2\tilde{S}'_1+1)(2S_C+1)(2S_D+1)]^{1/2} \\
& \langle l^{n-1}(a_2S_2L_2); l'^{n'-1}(a'_2S'_2L'_2)S_AL_A;l; l'S_BL_B; SL | \\
& g'_{nn+n'} | l^{n-1}(\tilde{a}_2\tilde{S}_2\tilde{L}_2); l'^{n'-1}(\tilde{a}'_2\tilde{S}'_2\tilde{L}'_2)S_CL_C; \\
& l; l'S_DL_D; SL \rangle \\
& = \sum_{\substack{L_AL_B \\ S_AS_B}} \sum_{\substack{L_CL_D \\ S_CS_D}} \delta(a_2S_2L_2, \tilde{a}_2\tilde{S}_2\tilde{L}_2) \delta(a'_2S'_2L'_2, \tilde{a}'_2\tilde{S}'_2\tilde{L}'_2) \\
& \delta(S_AL_A, S_CL_C) \delta(S_BL_B, S_DL_D) (2S_A+1)(2S_B+1)(2L_A+1) \\
& (2L_B+1) [(2S_1+1)(2S'_1+1)(2\tilde{S}_1+1)(2\tilde{S}'_1+1)(2L_1+1)(2\tilde{L}_1+1) \\
& (2L'_1+1)(2\tilde{L}'_1+1)]^{1/2} \\
& \begin{pmatrix} L_2 & l & L_1 \\ L'_2 & l' & L'_1 \\ L_A & L_B & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{L}_2 & l & \tilde{L}_1 \\ \tilde{L}'_2 & l' & \tilde{L}'_1 \\ L_C & L_D & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_2 & \frac{1}{2} & S_1 \\ S'_2 & \frac{1}{2} & S'_1 \\ S_A & S_B & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{S}_2 & \frac{1}{2} & \tilde{S}_1 \\ \tilde{S}'_2 & \frac{1}{2} & \tilde{S}'_1 \\ S_C & S_D & S \end{pmatrix} \\
& \langle l; l'S_BL_B | g'_{nn+n'} | l; l'S_BL_B \rangle
\end{aligned} \quad (21)$$

易证:

$$\begin{aligned}
& \langle l; l'S_BL_B | g'_{nn+n'} | l; l'S_BL_B \rangle \\
& = \langle ll'S_BL_B | g_{nn+n'} | ll'S_BL_B \rangle \\
& = \langle ll'S_BL_B | g_{12} | ll'S_BL_B \rangle
\end{aligned} \quad (22)$$

所以

$$\begin{aligned}
I_3 &= nn' \sum_{\substack{a_2S_2L_2 \\ a'_2S'_2L'_2}} G(l^{n-1}a_2S_2L_2 | l^n a_1S_1L_1) \\
& G(l'^{n'-1}a'_2S'_2L'_2 | l'^n \tilde{a}_1\tilde{S}_1\tilde{L}_1) G(l^{n-1}\tilde{a}_2\tilde{S}_2\tilde{L}_2 | l^n \tilde{a}_1\tilde{S}_1\tilde{L}_1) \\
& \cdot \sum_{L_AL_B} \sum_{S_AS_B} (2S_A+1)(2S_B+1) G(l'^{n'-1}a'_2S'_2L'_2 | l'^n \tilde{a}_1\tilde{S}_1\tilde{L}_1) \\
& (2L_A+1)(2L_B+1) [(2S_1+1)(2S'_1+1)(2\tilde{S}_1+1)(2\tilde{S}'_1+1) \\
& (2L_1+1)(2\tilde{L}_1+1)(2L'_1+1)(2\tilde{L}'_1+1)]^{1/2} \langle ll'S_BL_B | g_{12} | ll'S_BL_B \rangle \\
& \begin{pmatrix} L_2 & l & L_1 \\ L'_2 & l' & L'_1 \\ L_A & L_B & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_2 & l & \tilde{L}_1 \\ L'_2 & l' & \tilde{L}'_1 \\ L_A & L_B & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_2 & \frac{1}{2} & S_1 \\ S'_2 & \frac{1}{2} & S'_1 \\ S_A & S_B & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_2 & \frac{1}{2} & \tilde{S}_1 \\ S'_2 & \frac{1}{2} & \tilde{S}'_1 \\ S_A & S_B & S \end{pmatrix}
\end{aligned} \quad (23)$$

熟知 $\langle ll'S_BL_B | g_{12} | ll'S_BL_B \rangle$ 用Slater径向积分表示的表达式为:

$$\begin{aligned}
& \langle ll'S_BL_B | g_{12} | ll'S_BL_B \rangle \\
& = \sum_K [f_K(ll'L_B) F^K(ll') + g_K(ll'L_BS_B) G^K(ll')]
\end{aligned} \quad (24)$$

$$\text{其中} \quad f_K(l'l_B) = (-1)^{L_B}(2l+1)(2l'+1) \begin{pmatrix} l & K & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & K & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} l & l & K \\ l' & l' & L_B \end{matrix} \right\} \quad (25)$$

$$g_K(l'l_B S_B) = (-1)^{S_B}(2l+1)(2l'+1) \begin{pmatrix} l & K & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left\{ \begin{matrix} l & l' & K \\ l & l' & L_B \end{matrix} \right\} \quad (26)$$

把(24)式代入(23)式, 考虑到 $f_K(l'l_B)$, $F^K(l')$ 与 S_B 无关, (23)式可化为如下形式:

$$\begin{aligned} I_3 = & nn' \sum_K [F^K(l'l') \sum_{\substack{\alpha_2 S_2 L_2 \\ \alpha'_2 S'_2 L'_2}} G(l'^{n-1} \alpha_2 S_2 L_2 | l^n \alpha_1 S_1 L_1) \\ & G(l'^{n'-1} \alpha'_2 S'_2 L'_2 | l'^{n'} \alpha'_1 S'_1 L'_1) G(l'^{n-1} \alpha_2 S_2 L_2 | l^n \alpha_1 S_1 L_1) \\ & G(l'^{n'-1} \alpha'_2 S'_2 L'_2 | l'^{n'} \alpha'_1 S'_1 L'_1) \sum_{L_A L_B} (2L_A+1)(2L_B+1) \\ & [(2L_1+1)(2\tilde{L}_1+1)(2L'_1+1)(2\tilde{L}'_1+1)]^{1/2} \delta(S_1, \tilde{S}_1) \delta(S'_1, \tilde{S}'_1) \\ & f_K(l'l_B) \left\{ \begin{matrix} L_2 & l & L_1 \\ L'_2 & l' & L'_1 \\ L_A & L_B & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_2 & l & \tilde{L}_1 \\ L'_2 & l' & \tilde{L}'_1 \\ L_A & L_B & L \end{matrix} \right\} + G^K(l'l') \\ & \sum_{\substack{\alpha_2 S_2 L_2 \\ \alpha'_2 S'_2 L'_2}} G(l'^{n-1} \alpha_2 S_2 L_2 | l^n \alpha_1 S_1 L_1) G(l'^{n'-1} \alpha'_2 S'_2 L'_2 | l'^{n'} \alpha'_1 S'_1 L'_1) \\ & G(l'^{n-1} \alpha_2 S_2 L_2 | l^n \alpha_1 S_1 L_1) G(l'^{n'-1} \alpha'_2 S'_2 L'_2 | l'^{n'} \alpha'_1 S'_1 L'_1) \\ & \sum_{\substack{L_A L_B \\ S_A S_B}} \left\{ \begin{matrix} L_2 & l & L'_1 \\ L'_2 & l' & L'_1 \\ L_A & L_B & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_2 & l & \tilde{L}_1 \\ L'_2 & l' & \tilde{L}'_1 \\ L_A & L_B & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_2 & \frac{1}{2} & S_1 \\ S'_2 & \frac{1}{2} & S'_1 \\ S_A & S_B & S \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_2 & \frac{1}{2} & \tilde{S}_1 \\ S'_2 & \frac{1}{2} & \tilde{S}'_1 \\ S_A & S_B & S \end{matrix} \right\} g_K(l'l_B S_B) \\ & (2L_A+1)(2L_B+1)(2S_A+1)(2S_B+1)[(2S_1+1)(2S'_1+1)(2\tilde{S}_1+1)(2\tilde{S}'_1+1) \\ & (2L_1+1)(2\tilde{L}_1+1)(2L'_1+1)(2\tilde{L}'_1+1)]^{1/2} \quad (27) \end{aligned}$$

由于 l^n 组态的静电矩阵元用 Slater 径向积分表示的表达式为熟知的, 我们不再对 I_1 , I_2 做更多的讨论。

对于特例 $l^n l'$ 组态, $n'=1$, $l'^{n'-1}=l'^0$, $S'_2=0$, $L'_2=0$, $L'_1=l'$, $S'_1=\frac{1}{2}$, $\tilde{L}'_1=l'$, $\tilde{S}'_1=\frac{1}{2}$, $L_A=L_2$, $S_A=S_2$, 有

$$\begin{aligned} I_3 = & n \sum_{\alpha_2 S_2 L_2} G(l'^{n-1} \alpha_2 S_2 L_2 | l^n \alpha_1 S_1 L_1) G(l'^{n-1} \alpha_2 S_2 L_2 | l^n \alpha_1 S_1 L_1) \\ & \sum_{S_B L_B} (2L_B+1)(2S_B+1)(2L_2+1)(2S_2+1)2(2l'+1) \\ & [(2S_1+1)(2\tilde{S}_1+1)(2L_1+1)(2\tilde{L}_1+1)]^{1/2} \langle l'l' S_B L_B | g_{12} | l'l' S_B L_B \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \begin{pmatrix} L_2 & l & L_1 \\ 0 & l' & l' \\ L_2 & L_B & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_2 & \frac{1}{2} & S_1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ S_2 & S_B & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_2 & \frac{1}{2} & \widetilde{S}_1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ S_2 & S_B & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_2 & l & \widetilde{L}_1 \\ 0 & l' & l' \\ L_2 & L_B & L \end{pmatrix} \\
& = n \sum_{\alpha_2 S_2 L_2} \sum_{\alpha_1 S_1 L_1} G(l^{n-1} \alpha_2 S_2 L_2 || l^n \alpha_1 S_1 L_1) G(l^{n-1} \alpha_2 S_2 L_2 || l^n \widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) \\
& \quad (2L_B+1)(2S_B+1)[(2S_1+1)(2L_1+1)(2\widetilde{S}_1+1)(2\widetilde{L}_1+1)]^{1/2} \\
& \quad \begin{pmatrix} L & l' & L_1 \\ l & L_2 & L_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & l' & \widetilde{L}_1 \\ l & L_2 & L_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S & \frac{1}{2} & S_1 \\ \frac{1}{2} & S_2 & S_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S & \frac{1}{2} & \widetilde{S}_1 \\ \frac{1}{2} & S_2 & S_B \end{pmatrix} \\
& \quad \langle l' S_B L_B | g_{12} | l' S_B L_B \rangle \tag{28}
\end{aligned}$$

这正是文献[5]中所给出的结果。

对于 $l^2 l'^2$ 组态, Chisholm^[7]给出了多重态的主、附亲态比系数, 应该指出的是文献[7]中的 A 只能取 I_1 , B 只能取 I_2 , 它们并不是任意的。按此方法算得的静电能矩阵元与我们所给公式中 $n=2$ 、 $n'=2$ 时所得结果一致。

由此可见, 我们给出的结果比起文献[5,7]中给出关于两个非闭合壳层的结果更为普遍, 它们只是我们结果的特例。

3. $l^n l' n' l' n'$ 组态的静电能矩阵元

与前相似有

$$\begin{aligned}
& \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1) l^n (\alpha'_1 S'_1 L'_1) S' L' l^n n' (\alpha''_1 S''_1 L''_1) S L | G \\
& \quad | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) l^n (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) \widetilde{S}' \widetilde{L}' l^n n' (\widetilde{\alpha}''_1 \widetilde{S}''_1 \widetilde{L}''_1) S L \rangle \\
& = \sqrt{\frac{(n+n'+n'')!}{(n+n')! n''!}} \langle l^n (\alpha_1 S_1 L_1) l^n (\alpha'_1 S'_1 L'_1) S' L'; l^n n' (\alpha''_1 S''_1 L''_1) S L | \\
& \quad \left(\sum_{r < k \leq n+n'} g_{rk} + \sum_{p > m > n+n'} g_{mp} + \sum_{\substack{i \leq n+n' \\ j > n+n'}} g_{ij} \right) | l^n (\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) l^n n' (\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) \\
& \quad \widetilde{S}' \widetilde{L}' l^n n' (\widetilde{\alpha}''_1 \widetilde{S}''_1 \widetilde{L}''_1) S L \rangle \\
& = I_1 + I_2 + I_3 \tag{29}
\end{aligned}$$

$\sum_{r < k \leq n+n'} g_{rk}$ 是前 $n+n'$ 个电子之间的静电相互作用能算符, I_1 是它的矩阵元;

$\sum_{p > m > n+n'} g_{mp}$ 是后 n'' 个电子之间的静电相互作用能算符, I_2 是它的矩阵元;

$\sum_{\substack{i \leq n+n' \\ j > n+n'}} g_{ij}$ 是前 $n+n'$ 个电子与后 n'' 个电子之间的静电相互作用能, I_3 是它的矩阵元。

$$I_1 = \langle l^n(\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'}(\alpha'_1 S'_1 L'_1) S' L'; l''^{n''}(\alpha''_1 S''_1 L''_1) S L |$$

$$\sum_{r < k \leq n+n'} g_{rk} \sum_{Q_i} (-1)^{\delta_{Q_i}} Q_i | l^n(\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) l'^{n'}(\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) \widetilde{S}' \widetilde{L}';$$

$$l''^{n''}(\widetilde{\alpha}''_1 \widetilde{S}''_1 \widetilde{L}''_1) S L \rangle \quad (30)$$

其中 $Q_i(S_n \otimes S_{n'} \otimes S_{n''})$ 是相对于 $S_n \otimes S_{n'} \otimes S_{n''}$ 的陪集。

$\sum_{r < k \leq n+n'} g_{rk}$ 与后 n'' 个粒子的坐标无关, 如果 Q_i 使得后 n'' 个电子的坐标中的任何一个, 不妨设为第 f 个电子的坐标, 置换到 $l^n(\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) l'^{n'}(\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) \widetilde{S}' \widetilde{L}'$ 中, 对 r_f 积分不是 $\langle l'' m'' | l' m' \rangle$ 就是 $\langle l'' n'' | l m_1 \rangle$ 。这两个积分恒为零。所以, Q_i 对应的积分项为零。集合 $\{Q_i\}$ 中只 (1) 对应的项不为零。因此

$$I_1 = \delta(\alpha''_1 S''_1 L''_1, \widetilde{\alpha}''_1 \widetilde{S}''_1 \widetilde{L}''_1) \delta(S' L', \widetilde{S}' \widetilde{L}') \delta(l^n(\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'}(\alpha'_1 S'_1 L'_1) S' L' |$$

$$\sum_{r < k \leq n+n'} g_{rk} | l^n(\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) l'^{n'}(\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) S' L' \rangle \quad (31)$$

$l^n l'^{n'}$ 组态的静电能矩阵元我们已经得出, 把它代入上式就可得到 I_1 。

同理 $I_2 = \delta(S' L', \widetilde{S}' \widetilde{L}') \delta(\alpha_1 S_1 L_1, \widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) \delta(\alpha'_1 S'_1 L'_1, \widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1)$

$$\delta(S''_1 L''_1, \widetilde{S}''_1 \widetilde{L}''_1) \langle l''^{n''} \alpha''_1 S''_1 L''_1 | \sum_{p > m > n+n'} g_{mp} | l''^{n''} \alpha''_1 S''_1 L''_1 \rangle \quad (32)$$

$\sum_{\substack{i \leq n+n' \\ j > n+n'}} g_{ij}$ 仍然对前 $n+n'$ 个电子交换对称, 因此

$$A^{(n+n')} \sum_{\substack{i \leq n+n' \\ j > n+n'}} g_{ij} = \sum_{\substack{i \leq n+n' \\ j > n+n'}} g_{ij} A^{(n+n')}$$

$$I_3 = I_4 + I_5 \quad (33)$$

其中

$$I_4 = \sqrt{\frac{(n+n'+n'')!}{n! n'! n''!}} \langle l^n(\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'}(\alpha'_1 S'_1 L'_1) S' L'; l''^{n''}(\alpha''_1 S''_1 L''_1) S L |$$

$$\sum_{i_1 \leq n} g_{i_1 j} | l^n(\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) l'^{n'}(\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) \widetilde{S}' \widetilde{L}' l''^{n''}(\widetilde{\alpha}''_1 \widetilde{S}''_1 \widetilde{L}''_1) S L \rangle \quad (34)$$

$$I_5 = \sqrt{\frac{(n+n'+n'')!}{n! n'! n''!}} \langle l^n(\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'}(\alpha'_1 S'_1 L'_1) S' L'; l''^{n''}(\alpha''_1 S''_1 L''_1) S L |$$

$$\sum_{n < i_2 \leq n+n'} g_{i_2 j} | l^n(\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1) l'^{n'}(\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1) \widetilde{S}' \widetilde{L}' l''^{n''}(\widetilde{\alpha}''_1 \widetilde{S}''_1 \widetilde{L}''_1) S L \rangle \quad (35)$$

与前一一样的方法可得:

$$I_5 = n' n'' \langle l^n(\alpha_1 S_1 L_1); l'^{n'}(\alpha'_1 S'_1 L'_1) S' L'; l''^{n''}(\alpha''_1 S''_1 L''_1) S L |$$

$$g'_{n+n', n+n'+n''} | l^n(\widetilde{\alpha}_1 \widetilde{S}_1 \widetilde{L}_1); l'^{n'}(\widetilde{\alpha}'_1 \widetilde{S}'_1 \widetilde{L}'_1); l''^{n''}(\widetilde{\alpha}''_1 \widetilde{S}''_1 \widetilde{L}''_1) S L \rangle \quad (36)$$

$$g'_{n+n', n+n'+n''} = g_{n+n', n+n'+n''} [1 - (n+n', n+n'+n'')]$$

$g'_{n+n', n+n'+n''}$ 只与第 $n+n'$ 和第 $n+n'+n''$ 个电子坐标有关。

$$\begin{aligned}
I_5 = & n' n'' \sum_{L' S' \tilde{L}'} \left\{ \begin{matrix} L_1 L_1' L' \\ L_1'' L L'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_1 S_1' S' \\ S_1'' S S'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \tilde{S}_1 \tilde{S}_1' \tilde{S}' \\ \tilde{S}_1'' \tilde{S} \tilde{S}'' \end{matrix} \right\} \\
& \left\{ \begin{matrix} \tilde{L}_1 \tilde{L}_1' \tilde{L}' \\ \tilde{L}_1'' \tilde{L} \tilde{L}'' \end{matrix} \right\} [(2L' + 1)(2L'' + 1)(2S' + 1)(2S'' + 1)(2\tilde{L}' + 1)(2\tilde{L}'' + 1) \\
& (2\tilde{S}' + 1)(2\tilde{S}'' + 1)]^{1/2} \langle l^n(a_1 S_1 L_1); l'^{n'}(a_1' S_1' L_1'); l''^{n''}(a_1'' S_1'' L_1'') \\
& S'' L''; SL | g^{n+n'+n''+n''} | l^n(\tilde{a}_1 \tilde{S}_1 \tilde{L}_1); l'^{n'}(\tilde{a}_1' \tilde{S}_1' \tilde{L}_1'); l''^{n''} \\
& (\tilde{a}_1'' \tilde{S}_1'' \tilde{L}_1'') \tilde{S}'' \tilde{L}''; SL \rangle \\
& (-1)^{L_1 + L_1' + L_1'' + L + S_1 + S_1' + S_1'' + S + \tilde{S}_1 + \tilde{S}_1' + \tilde{S}_1'' + S + \tilde{L}_1 + \tilde{L}_1' + \tilde{L}_1'' + L} \\
= & n' n'' \delta(a_1 S_1 L_1, \tilde{a}_1 \tilde{S}_1 \tilde{L}_1) (-1)^{\tilde{L}_1' - L_1' + \tilde{L}_1'' + \tilde{S}_1' - L_1' - S_1' + \tilde{S}_1'' - S_1''} \\
& [(2L' + 1)(2\tilde{L}' + 1)(2S' + 1)(2\tilde{S}' + 1)]^{1/2} \sum_{L' S'} (2L'' + 1)(2S'' + 1) \\
& \left\{ \begin{matrix} L_1 L_1' L' \\ L_1'' L L'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_1 S_1' S' \\ S_1'' S S'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \tilde{S}_1 \tilde{S}_1' \tilde{S}' \\ \tilde{S}_1'' \tilde{S} \tilde{S}'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 \tilde{L}_1' \tilde{L}' \\ \tilde{L}_1'' L L'' \end{matrix} \right\} \\
& \langle l'^{n'}(a_1' S_1' L_1'); l''^{n''}(a_1'' S_1'' L_1'') S'' L'' | g_{n+n', n+n'+n''} \\
& [1 - (n+n', n+n'+n'')] | l'^{n'}(\tilde{a}_1' \tilde{S}_1' \tilde{L}_1'); l''^{n''}(\tilde{a}_1'' \tilde{S}_1'' \tilde{L}_1'') S'' L'' \rangle \quad (37)
\end{aligned}$$

应用(27)式就可得到 I_5 的表达式。

根据3j符号的对称关系可得

$$\begin{aligned}
I_4 = & (-1)^{S_1 + L_1 + S_1' + L_1' - S' - L' + \tilde{S}_1 + \tilde{L}_1 + \tilde{S}_1' + \tilde{L}_1' - \tilde{S}' - \tilde{L}'} \\
& \sqrt{\frac{(n+n'+n'')!}{n! n'! n''!}} \langle l'^{n'}(a_1' S_1' L_1'); l^n(a_1 S_1 L_1) S' L'; l''^{n''}(a_1'' S_1'' L_1'') SL | \\
& \sum g_{111} | l'^{n'}(\tilde{a}_1' \tilde{S}_1' \tilde{L}_1') l^n(\tilde{a}_1 \tilde{S}_1 \tilde{L}_1) \tilde{S}' \tilde{L}' l''^{n''}(\tilde{a}_1'' \tilde{S}_1'' \tilde{L}_1'') \tilde{S} L \rangle \\
= & n n'' \delta(a_1' S_1' L_1', \tilde{a}_1' \tilde{S}_1' \tilde{L}_1') (-1)^{2S_1' + 2L_1' - S' - L' - \tilde{S}' - \tilde{L}'} \\
& (-1)^{2\tilde{S}_1 + \tilde{S}_1' - S_1' + \tilde{L}_1'' - L_1''} [(2L' + 1)(2S' + 1)(2\tilde{L}' + 1)(2\tilde{S}' + 1)]^{1/2} \\
& \sum_{L' S'} (2L'' + 1)(2S'' + 1) \left\{ \begin{matrix} L_1' L_1 L' \\ L_1'' L L'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_1' S_1 S' \\ S_1'' S S'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \tilde{S}_1' \tilde{S}_1 \tilde{S}' \\ \tilde{S}_1'' \tilde{S} \tilde{S}'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1' \tilde{L}_1' \tilde{L}' \\ \tilde{L}_1'' L L'' \end{matrix} \right\} \\
& \langle l^n(a_1 S_1 L_1); l''^{n''}(a_1'' S_1'' L_1'') S'' L'' | g_{n, n+n'+n''} [1 - (n, n+n'+n'')] \\
& | l^n(\tilde{a}_1 \tilde{S}_1 \tilde{L}_1); l''^{n''}(\tilde{a}_1'' \tilde{S}_1'' \tilde{L}_1'') S'' L'' \rangle \quad (38)
\end{aligned}$$

4. 结 束 语

我们讨论了 $l^n l'^{n'}$ 和 $l^n l'^{n'} l''^{n''}$ 组态的静电能矩阵元,推导出它们的明显表达式。显然看出,应用同样方法还可以毫无困难地得出更复杂的 $l^n l'^{n'} l''^{n''}$...组态的静电能矩

阵元。同时我们还证明了文献[5—7]中给出的结果是我们结果的几个特例。

在我们的表达式中,只含有单电子主亲态比系数和 $6j$ 符号、 $9j$ 符号。当组态中非闭合壳层数目增加时,只不过增加几个 $6j$ 符号,计算起来比较容易。因此,我们的方法优于Chisholm等^[6,7]提出的附亲态比系数法。

我们已经完全解决了复杂原子在 LS 耦合下的谱项计算问题,而其结果是出乎意料地简单。

致 谢

衷心感谢我的导师赵伊君教授、张志杰副教授的热情指导,以及况蕙孙教授、白铭复副教授、陈健华助理研究员对本文提出的修改意见。

参 考 文 献

- [1] 钱学森,物理力学讲义,科学出版社(1962).
- [2] W.J.Bond, Jr. et al., Atomic Theory of Gas Dynamics, Addison-Wesley (1965).
- [3] C.W.Nielson and G.F.Koster, Spectroscopic Coefficients for the p^n , d^n and f^n Configuration, M.I.T.(1963).
- [4] J.C.Slater, Quantum Theory of Atomic Structure, Vol.2, McGraw-Hill(1960).
- [5] E.U.Condon and H.Odabasi, Atomic Structure, Combridge(1980).
- [6] C.D.H.Chisholm, A.Dalgarno and F.R.Jnnes, Adv.Atom.Molec.Phys. 5, 297(1969).
- [7] C. D. H. Chisholm, Group Theoretical Techniques in Quantum Chemistry, Academic(1976).

A Method for Calculating the Atomic Electrostatic Energy Matrix Elements while the Electronic Configuration Contains Two or More Nonclosed Shells

Sun Jun-qiang

Abstract

By using the technique of Racah algebra and antisymmetrizer, the

atomic electrostatic energy matrix elements for electronic configuration

$l_1^{n_1} l_2^{n_2} \dots l_f^{n_f}$ in the LS coupling scheme are obtained. There are only 6- j , 9- j symbols and one-partical substantive coefficients of fractional parentage in the expressions of these elements. Therefore, the atomic electrostatic energy can be evaluated more easily.

This method can be used to calculate the energy levels of atoms and ions with higher atomic number, which are compositions of ablation vapor sometimes.