

# 类锂体系( $Z = 21-30$ )基态 $1s^2 2s$ 电离能 和相对论项能的理论计算\*

葛自明<sup>1)</sup> 王治文<sup>2)B)</sup> 周雅君<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> 华东理工大学理学院物理系, 上海 200237)

<sup>2)</sup> 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130023)

<sup>3)</sup> 辽宁师范大学物理系, 大连 110629)

(2003 年 3 月 12 日收到, 2003 年 4 月 9 日收到修改稿)

使用全实加关联方法和里兹(Ritz)变分方法计算了类锂体系( $Z = 21-30$ )基态  $1s^2 2s$  的非相对论能量和波函数, 包括动能修正、电子-电子接触项、轨道-轨道相互作用项以及 Darwin 项的相对论修正和质量极化项由全实加关联波函数的一阶微扰给出, 量子电动力学修正 QED(quantum electronic dynamic)由有效核电荷方法和类氢公式计算; 给出了中等核电荷的高电离类锂体系基态的电离能、相对论效应的项能(term energy), 并将计算结果与实验数据进行了比较, 表明 FCPC 方法对于较高核电荷类锂体系结构的理论计算仍然十分有效.

关键词: 类锂体系, 全实加关联, 电离能, 项能

PACC: 3130, 3110, 3270

## 1. 引 言

原子与分子中电子关联效应的研究, 是原子分子领域的前沿课题<sup>[1]</sup>; 近年来, 随着软 x 射线激光、等离子体物理技术以及天体物理和航天技术等学科的发展, 人们迫切需要相关的高电离离子体系原子结构的精确数据. 对于具有  $1s^2$  离子实结构的类锂体系, 由于  $1s^2$  离子实与价电子的关联效应比较大, 精确的理论计算具有很大难度; 传统的组态相互作用方法(configuration interaction, CI)使得能量和波函数的收敛比较慢. 全实加关联方法(full core plus correlation, FCPC)是 Chung 首次用于计算锂等电子序列从 Li I 到 Ne VIII  $1s^2 2s$  基态的电离能<sup>[2]</sup>, 理论值与实验值的偏差在  $1\text{cm}^{-1}$  以下; Wang 和 Chung 用 FCPC 方法对该系统激发态进行了精确计算, 理论结果与实验数据符合得相当好, 理论值与实验值的偏差大约在  $1\text{cm}^{-1}$  左右<sup>[3-6]</sup>. 本文使用 FCPC 方法计算中等核电荷( $Z = 21-30$ )高电离类锂原子体系基态  $1s^2 2s$  的非相对论能量、相对论修正以及量子电动力学修正(quantum electronic dynamic)给出了类锂体系原子

结构基态的总能量、电离能及相对论效应修正的项能.

## 2. 理论方法

全实加关联方法的主要物理思想是预先确定足够好的  $1s^2$  离子实波函数, 并将其作为三电子体系波函数中单独的一项, 离子实的弛豫及其他可能的电子关联效应由另一项足够大的关联波函数来描述. 在 LS 耦合表象中, 三电子体系的总的波函数选为

$$\Psi(1\ 2\ 3) = A \left[ \Phi_{1s^2}(1\ 2, \ ) \sum_i d_i r_3^i e^{-\beta r_3} \chi(3) + \sum_i C_i \Phi_{\kappa(i), \kappa(i)}(1\ 2\ 3, \ ) \right], \quad (1)$$

其中  $A$  为波函数反对称化算符,  $\Phi_{1s^2}(1\ 2)$  表示足够好的全实波函数,  $\Phi_{\kappa(i), \kappa(i)}(1\ 2\ 3)$  表示离子实的弛豫及其他可能的电子关联效应.

三电子体系的非相对论 Hamiltonian 表达式为<sup>[1]</sup> (本文使用原子质量单位 a. u.)

$$H_0 = \sum_{i=1}^3 \left[ -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i,j=1}^3 \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}}. \quad (2)$$

\* 国家自然科学基金(批准号: 10174029)资助的课题.

$1s^2$  离子实和三电子体系的非相对论能量由里兹 (Ritz) 变分法求得

$$\delta E_{\text{upper}} = \delta H_0 = \delta \frac{\Psi | H_0 | \Psi}{\Psi | \Psi}, \quad (3)$$

同时确定了波函数中的线性分量和非线性分量. 为了得到尽可能准确的非相对论能量, 考虑来自于更高角动量分量 (higher  $l$ ) 对能量的贡献是必要的, 这可根据  $1s^2$  离子实的变分能量相对于精确值 (Drake) 偏差的外推得到

$$E_{\text{nonre}}(1s^2 2s) = E_{\text{upper}}(1s^2 2s) + \Delta E_{\text{higher-}l}(1s^2) + \Delta E_{\text{higher-}l}(1s^2 2s), \quad (4)$$

其中  $E_{\text{upper}}(1s^2 2s)$ ,  $\Delta E_{\text{higher-}l}(1s^2)$  和  $\Delta E_{\text{higher-}l}(1s^2 2s)$  分别为三电子体系的变分能量、 $1s^2$  离子实项数不足引起的修正和高角动量分量的修正,  $E_{\text{nonre}}(1s^2 2s)$  为体系的非相对论能量. 相对论的能量修正包括动能修正、Darwin 项、电子-电子的 Contact 项、电子间轨道和轨道相互作用以及质量极化修正等, 由一级微扰理论给出, 其具体表达式见文献 [7]. 为了获得高精度的理论计算结果, 本文还使用有效核电荷方法和类氢公式计算了价电子的量子电动力学修正 QED<sup>[8]</sup>.

$$\Delta E_{\text{QED}} = \frac{4Z_{\text{eff}}^4 \alpha^3}{3\pi n^3} \left\{ \frac{19}{30} - 2\text{li}(\alpha Z_{\text{eff}}) - \text{li}[K(n, \rho)] \right\}, \quad (5)$$

其中  $\alpha$  为精细结构常数,  $Z_{\text{eff}}^4$  为类氢离子的有效电荷, Bethe 对数值  $K(n, \rho)$  取自文献 [9],  $n = 2$ ,  $\Delta E_{\text{QED}}$  为价电子  $2s$  的量子电动力学修正. 则  $1s^2$  离子实和三电子体系原子结构的总能量  $E_{\text{tot}}$  为

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{nonre}} + \Delta E_{\text{re}}, \quad (6)$$

其中  $\Delta E_{\text{re}}$  一级微扰得到的能量的相对论修正, 三电子体系基态  $1s^2 2s$  的电离能  $E_{\text{IP}}$  由  $1s^2$  离子实和三电子体系总能量的差给出

$$E_{\text{IP}} = E_{\text{tot}}(1s^2 1S) - E_{\text{tot}}(1s^2 2s^2 S) - \Delta E_{\text{QED}}. \quad (7)$$

### 3. 计算结果与讨论

在我们的计算中,  $1s^2$  离子实波函数  $\Phi_{1s^2}$  共选了 7 个分波计 222 项,  $1s^2 2s$  三电子体系组态波函数中表示价电子效应的部分选了 8 项, 表示离子实的弛豫 (relaxation) 以及其他可能的电子关联 (correlation) 效应的附加 CI 波函数  $\Phi_{i(k)(l)}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) 选了 13

个分波共 662 项. 为了进行收敛性的比较, 对各离子本文所选 FCPC 波函数的项数相同, 见表 1. 相应的里德堡常数取自文献 [9]. 离子实项数不足引起的偏差在电离能的计算中具有较好的相消效应, 从而给出了高精度的理论计算结果, 同时又大大地减少了计算量.

由方程 (3) 可求得  $1s^2$  离子实 222 项波函数、三电子体系的 670 项波函数以及全实加关联的变分能量. 表 1 给出了  $1s^2$  离子实和三电子  $1s^2 2s$  的非相对论能量、各 CI 波函数的项数以及各分波对非相对论变分能量的贡献. 从表 1 中可以看出价电子与  $1s^2$  离子实的关联效应比较大, 来自于高角动量分量对能量的贡献使得能量和波函数收敛比较慢.

由基态  $1s^2 2s$  的 FCPC 变分能量、 $1s^2$  离子实项数不足引起的修正和高角动量分量的修正可得到三电子体系的非相对论能量  $E_{\text{nonre}}$ ; 全实加关联波函数的一级微扰可得到离子实和三电子体系的相对论修正; 由非相对论能量、相对论修正和量子电动力学修正  $\Delta E_{\text{QED}}$  可计算原子态的总能量  $E_{\text{tot}}$ . 表 2 给出了  $1s^2$  离子实的非相对论 FCPC 变分能量、相对论的动能修正、Darwin 项、电子-电子接触项、轨道-轨道相互作用项以及质量极化修正 (mass polarization) 的项能 (term energy) 和总能量的计算结果.  $1s^2$  离子实项数不足引起的能量修正和高角动量分量的能量修正的计算结果列于表 3, 同时列出的还有三电子体系各项相对论修正的项能及价电子  $2s$  的量子电动力学修正  $\Delta E_{\text{QED}}$  的计算结果. 其中, 质量极化项的影响相对较小, 且主要由元素决定, 本文取  $^{23}\text{Na}$ ,  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{27}\text{Al}$ ,  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{32}\text{S}$ ,  $^{35}\text{Cl}$ ,  $^{39}\text{K}$ ,  $^{40}\text{Ar}$ ,  $^{40}\text{Ca}$ ; 相对论动能修正、Darwin 项随离子核电荷  $Z$  的变化十分显著, 远远超过其他相对论修正项的变化, 这是因为相对论动能量与有效核电荷  $Z$  密切相关, 而中等核电荷原子的  $Z$  相对较大.

三电子体系基态  $1s^2 2s$  非相对论能量的 FCPC 计算结果列于表 4, 由非相对论能量、相对论项能和价电子  $2s$  的量子电动力学修正通过计算可得到  $1s^2 2s$  基态的电离能, 表 4 还列出了  $1s^2 2s$  基态电离能的 FCPC 计算结果, 并与实验数据进行了比较. 从表 4 中的比较可以看出, 对于中等核电荷数具有  $1s^2$  离子实的类锂体系, 除个别离子例外, 电离能的 FCPC 理论计算结果普遍比实验数据低, 图 1 给出了理论值与实验值的偏差随核电荷数  $Z$  的变化规律.

表 1 类锂体系 ( $Z = 21-30$ )  $1s^2$  离子实和  $1s^2 2s$  全实加关联波函数收敛性及各分波的非相对论能量

角动量各分波 组态及项数		$-\Delta E/a.u.$				
		$Z = 21$	23	25	28	30
(0 0)	49	428.00057693	514.75055323	609.50053471	766.62551055	881.37549689
(1 1)	42	0.02608762	0.02610576	0.02615538	0.02618707	0.02623685
(2 2)	36	0.00372847	0.00373578	0.00375484	0.00376955	0.00377793
(3 3)	30	0.00100709	0.00100951	0.00101593	0.00102087	0.00102369
(4 4)	25	0.00037061	0.00037151	0.00037426	0.00037616	0.00037741
(5 5)	20	0.00016199	0.00016244	0.00016364	0.00016458	0.00016508
(6 6)	20	0.00008147	0.00008149	0.00008232	0.00008279	0.00008307
Total	222	428.03201419	514.78204748	609.53207707	766.65711155	881.40713092
core + 2s	8	475.04826563	572.00249890	677.95675783	853.76318362	982.21748396
((0 0) 0)	67	0.00082548	0.00083787	0.00084694	0.00085820	0.00086752
((0 1) 1)	161	0.00502234	0.00507116	0.00511273	0.00514604	0.00518103
((0 2) 2)	125	0.00054230	0.00054848	0.00055320	0.00056910	0.00056760
((0 3) 3)	95	0.00013441	0.00013551	0.00023611	0.00013243	0.00014267
((0 4) 4)	49	0.00004724	0.00004775	0.00004808	0.00005016	0.00005035
((0 5) 5)	49	0.00002059	0.00002088	0.00002106	0.00002188	0.00002196
((0 6) 6)	49	0.00001013	0.00001040	0.00001050	0.00001085	0.00001091
((0 1) 1)*	13	0.00000163	0.00000173	0.00000177	0.00000200	0.00000186
((0 2) 2)*	13	0.00000225	0.00000219	0.00000215	0.00000192	0.00000257
((1 2) 1)	10	0.00000078	0.00000063	0.00000054	0.00000115	0.00000050
((0 0) 0)*	11	0.00000043	0.00000040	0.00000131	0.00000044	0.00000038
((1 0) 1)	10	0.00000021	0.00000019	0.00000023	0.00000047	0.00000024
((2 3) 1)	10	0.00000009	0.00000007	0.00000001	0.00000005	0.00000004
Total	670	475.05487348	572.00917615	677.96349245	853.76998831	982.22433160

\* 在这些组态中，“离子实”的两个电子耦合自旋为 1 的三重态。

表 2 类锂体系 ( $Z = 21-30$ )  $1s^2$  离子实的非相对论能量、相对论修正和质量极化项的项能(单位 a.u.)

$Z$	变分能量	$\langle H_1 + H_2 \rangle$	$\langle H_3 \rangle$	$\langle H_4 \rangle$	$\langle H_{MP} \rangle$	总能量
21	-428.03201419	-2.4209537	0.0565281	-0.0017765	0.0000324	-430.39818389
22	-470.40703162	-2.9249416	0.0652515	-0.0019559	0.0000319	-473.26864572
23	-514.78204748	-3.1476138	0.0748321	-0.0021440	0.0000315	-517.85514168
24	-561.15706243	-4.1646428	0.0853070	-0.0023408	0.0000322	-565.23870683
25	-609.53207707	-4.9147993	0.0967173	-0.0025462	0.0000318	-614.35267347
26	-659.90708972	-5.7620409	0.1090996	-0.0027601	0.0000325	-665.56275862
27	-712.28210136	-6.7144141	0.1224986	-0.0029828	0.0000321	-718.87696756
28	-766.65711155	-7.7802321	0.1369490	-0.0032140	0.0000339	-774.30357475
29	-823.03212176	-8.9681735	0.1524978	-0.0034540	0.0000324	-831.85121906
30	-881.40713092	-10.2872400	0.1691787	-0.0037025	0.0000330	-891.52886172

表 3 类锂体系(  $Z = 21-30$  )基态  $1s^2 2s$  总能量的离子实修正、高  $l$  的贡献及相对论修正和质量极化项的项能(单位 a.u.)

$Z$	离子实修正	高 $l$ 的贡献	$\langle H_1 + H_2 \rangle$	$\langle H_3 \rangle$	$\langle H_4 \rangle$	$\langle H_{MP} \rangle$
21	0.0002401	0.0000299	-2.7394147	0.0614477	-0.0019239	0.0000374
22	0.0002413	0.0000305	-3.3129034	0.0709653	-0.0021193	0.0000368
23	0.0002425	0.0000308	-3.9720571	0.0814214	-0.0023241	0.0000397
24	0.0002432	0.0000309	-4.7252893	0.0928565	-0.0025384	0.0000372
25	0.0002427	0.0000316	-5.5808067	0.1053099	-0.0027626	0.0000367
26	0.0002435	0.0000312	-6.5471901	0.1188334	-0.0029959	0.0000376
27	0.0002440	0.0000313	-7.6341482	0.1334709	-0.0032385	0.0000371
28	0.0002455	0.0000322	-8.8513579	0.1492617	-0.0034905	0.0000392
29	0.0002459	0.0000318	-10.2082180	0.1662544	-0.0037521	0.0000375
30	0.0002466	0.0000324	-11.7155740	0.1844999	-0.0040221	0.0000382

表 4 类锂体系(  $Z = 21-30$  )基态  $1s^2 2s$  的变分能量、总能量、电离能及其他实验和理论结果(单位  $\text{cm}^{-1}$ )

$Z$	非相对论 能量/a.u.	QED 修正/ $\text{cm}^{-1}$	相对论 修正/a.u.	总能量 (a.u.)	电离能计 算结果/ $\text{cm}^{-1}$	电离能实 验结果/ $\text{cm}^{-1}$
21	475.0551435	5055.3	2.6798535	477.7299417	10387940.6	10388200 <sup>a</sup> 10389000 <sup>b</sup>
22	522.4072953	5822.8	3.2440205	525.6454930	11495204.8	11501000 <sup>c</sup> 11494000 <sup>b</sup>
23	572.0094495	6638.1	3.8929235	575.8957349	12659675.2	12660000 <sup>d</sup> 12665000 <sup>e</sup> 12668000 <sup>f</sup>
24	623.8616067	7495.1	4.6349340	628.4890454	13881644.7	13887700 <sup>e</sup> 13884000 <sup>f</sup>
25	677.9637668	8386.3	5.4782226	683.4336032	15161306.9	15162000 <sup>g</sup> 15160000 <sup>e</sup>
26	734.3159308	9303.1	6.4313149	740.7379427	16498830.5	16320000 <sup>g</sup> 16500000 <sup>e</sup>
27	792.9180964	10235.3	7.5038786	800.4117397	17894591.0	17897000 <sup>g</sup>
28	853.7702660	11171.5	8.7055474	862.4646419	19348691.7	19351000 <sup>g</sup>
29	916.8724356	12098.5	10.0456782	926.9060153	20861880.5	20870000 <sup>g</sup>
30	982.2246106	13002.0	11.5350580	993.7466666	22436822.0	

<sup>a</sup>文献 [10], <sup>b</sup>文献 [11], <sup>c</sup>文献 [12], <sup>d</sup>文献 [13], <sup>e</sup>文献 [14], <sup>f</sup>文献 [15], <sup>g</sup>文献 [16].

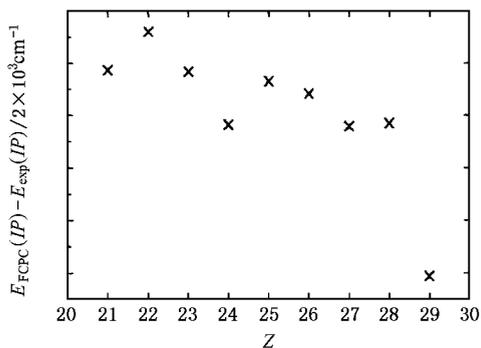


图 1 类锂体系(  $Z = 21-30$  )基态  $1s^2 2s$  电离能的 FCPC 理论值与实验值的偏差随核电荷数  $Z$  的变化规律,实验数据见表 4 中的参考文献。

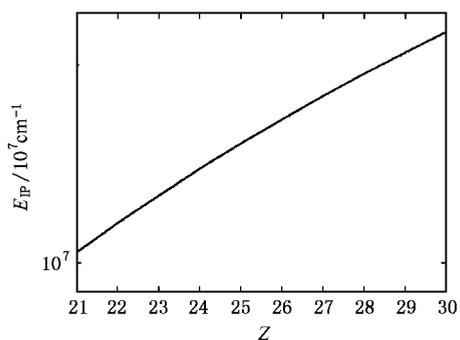


图 2 类锂体系(  $Z = 21-30$  )基态  $1s^2 2s$  的电离能的 FCPC 理论计算结果随核电荷数  $Z$  的变化规律

对于  $Z < 26$  的情况,  $1s^2 2s$  电离能的 FCPC 理论值与实验值符合得较好, 偏差约在几百  $\text{cm}^{-1}$ , 一般小于实验给出的误差范围, 相对偏差约为  $1 \times 10^{-4}$ . 对于  $Z = 21$  的 Sc XIX, FCPC 理论计算结果与实验数据的偏差最小, 为  $-295.4 \text{cm}^{-1}$ ;  $Z = 23$  的 XXI, 理论值与实验值的偏差为  $-324.8 \text{cm}^{-1}$ ;  $Z = 24$  的 Cr XXII, 理论值与实验值的偏差比较大, 为  $-2355.3 \text{cm}^{-1}$ ;  $Z = 25$  的 Mn XXIII, 理论值与实验数据的偏差为  $-693.1 \text{cm}^{-1}$  范围; 只有  $Z = 22$  的 Ti XX, 理论值与实验值的偏差不仅较大, 为  $1204.8 \text{cm}^{-1}$ , 而且偏差是正的, 关于这一点, 本文还不能给予很好的解释.

对于  $Z \geq 26$  的情况, 电离能的 FCPC 理论值与实验值的偏差较大, 此时基态电离能也很大, 偏差较大的主要原因是随着核电荷数  $Z$  的增大, 三电子体系基态  $1s^2 2s$  的相对论能量和总能量显著增大(见表 3) 相对论修正的一级微扰以及量子电动力学修正 QED 的近似计算不足以给出高精度的理论计算结果; 另一方面, 中等核电荷高电离类锂体系的实验测量相对比较困难, 实验给出的数据误差范围也较大, 由 Sc XIX 的  $10^2 \text{cm}^{-1}$  到 Mn XXIII 的  $10^3 \text{cm}^{-1}$ , 最后到 Zn XXVIII 的  $10^4 \text{cm}^{-1}$ ; 而且不同文献中电离能 EIP

的实验值之间亦存在较大的差异. 对于  $Z = 26$  的 Fe XXIV, 电离能的 FCPC 理论值与实验值的偏差为  $-1169.5 \text{cm}^{-1}$ ,  $Z = 27$  的 Co XXV 和  $Z = 28$  的 Ni XXVI, 偏差分别为  $-2409.5 \text{cm}^{-1}$  和  $-2308.3 \text{cm}^{-1}$ ; 尽管此时偏差较大, 相对偏差约为  $1 \times 10^{-4}$ . 对于  $Z = 29$  的 Cu XXVII, FCPC 理论值与实验值的偏差最大, 为  $-8119.5 \text{cm}^{-1}$ , 相对偏差约为  $4 \times 10^{-4}$ , 理论值仍在实验的误差范围内.

图 2 给出电离能的 FCPC 理论计算结果随核电荷数  $Z$  的变化规律, 符合等电子序列所遵循的物理规律, FCPC 方法无论是对激发态激发能的理论计算, 还是精细结构劈裂的理论计算, 与实验数据均符合较好<sup>[17]</sup>. 随着核电荷数  $Z$  的增大, 理论值与实验值的偏差具有增大的趋势, 理论值仍在实验数据的误差范围内, 由此可以得出结论: 对于中等核电荷数 ( $Z = 21-30$ ) 类锂体系原子结构的理论计算, 全实加关联 FCPC 方法仍然能够给出比较理想的理论结果.

作者向北卡州立大学物理系 Kwong T. Chung 博士给予的支持和帮助表示衷心的感谢.

- [1] Chung K T 1991 *Phys. Rev. A* **44** 5421
- [2] Chung K T 1992 *Phys. Rev. A* **45** 7766
- [3] Wang Z W, Zhu X W and Chung K T 1992 *Phys. Rev. A* **46** 6914
- [4] Wang Z W, Zhu X W and Chung K T 1993 *Phys. Ser.* **47** 65
- [5] Wang Z W and Chung K T 1994 *J. Phys. B* **27** 855
- [6] Ge Z M and Wang Z W 1998 *Journal of the Korean Physical Society* **32** 380
- [7] Ge Z M, Wang Z W and Zhou Y J *et al* 2003 *Chin. Phys.* **12**
- [8] Bethe H A and Salpeter E E 1957 *Quantum and Mechanics of One- and Two- Electron Atoms* (Springer-Verlag, Berlin)
- [9] Drake G W 1988 *Can. J. Phys.* **66** 586
- [10] Kaufman V and Sugar 1988 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **17** 1679
- [11] Wiese W L and Fuhr J R 1975 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **4** 263
- [12] Corliss C and Sugar J 1979 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **8** 1  
Corliss C and Sugar J 1982 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **11** 135
- [13] Shirai T and Nakagaki T 1992 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **21** 273
- [14] Younger S M *et al* 1978 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **7** 495
- [15] Sugar J and Corliss C 1978 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **7** 1191  
Sugar J and Corliss C 1977 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **6** 317
- [16] Shirai T *et al* 1994 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **23** 179; 1990 **19** 127; 1992 **21** 23  
Shirai T *et al* 1987 *Atomic Data and Nucl. Data* **37** 235  
Shirai T *et al* 1991 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **20** 1
- [17] Ge Z M, Zhou Y J, Lu Z W and Wang Z W, 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2773 (in Chinese) [葛自明、吕志伟、王治文、周雅君 2002 物理学报 **51** 2773]

# Theoretical calculation of ionization potential and term energy of the ground states $1s^2 2s$ of lithium-like systems from $Z = 21$ to $30$ \*

Ge Zi-Ming<sup>1)</sup> Wang Zhi-Wen<sup>2)B)</sup> Zhou Ya-Jun<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>( Department of Physics ,East China University of Science and Technology , Shanghai 200237 ,China )

<sup>2)</sup>( Institute of Atomic and Molecular Physics , Jilin University , Changchun 130023 ,China )

<sup>3)</sup>( Department of Physics ,Liaoning Normal University , Dalian 110629 ,China )

( Received 12 March 2003 ; revised manuscript received 9 April 2003 )

## Abstract

In the paper , the full-core plus correlation ( FCPC ) and the minimizing the expectation value of the Hamiltonian method is extended to calculate the non-relativistic energies and the wave functions of  $1s^2 2s$  states for the lithium-like systems from  $Z = 21$  to  $30$ . The mass-polarization and the relativistic correction included the kinetic-energy correction , the Darwin term , the electron-electron contact term , and the orbit-orbit interaction are calculated perturbatively as first-order correction. The contribution from quantum electrodynamic ( QED ) is also included by using the effective nuclear charge formula. The ionization potential and term energies of the ground states  $1s^2 2s$  are given and compared with other 's theoretical calculation and experimental results. It is shown that the FCPC methods are also effective to theoretical calculation of the ionic structure for high nuclear ion of lithium-like systems.

**Keywords** : lithium-like systems , full core plus correlation , ionization energy , term-energy

**PACC** : 3130 , 3110 , 3270

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10174029 ).