第 57 卷 第 10 期 2008 年 10 月
1000-3290/2008/57(10)/6074-07

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.57,No.10,October,2008

确定等价电子杨盘基的等概率比对方法

胡昆明†

(商丘师范学院物理与信息工程系,商丘 476000)

(2008 年 2 月 15 日收到;2008 年 7 月 7 日收到修改稿)

给出了等价电子正则杨盘 $T_{ig}^{[\lambda]}$ 的基本对称算子、完全对称算子概念,同时给出了这些对称算子作用于任一 Slater 函数 ϕ_i 所产生的根态、生成态概念.由正交归一化杨盘 $T_{ie}^{[\lambda]}$ 的纵置换算子 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 的构造规则,给出了 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 中存在的对称算子和确定 $T_{ie}^{[\lambda]}$ 的等概率比对方法,从而基本避免了牵涉到许多算子的极其复杂的代数,给出了求解 N 值较大的电子系统杨盘基问题的新方法.

关键词:正则杨盘,对称算子,根态,等概率比对方法

PACC:0365,0220

1. 引 言

文献[1]中指出,计算原子的 l^N 组态波函数的传统杨盘方法是基于置换群的使用方法,该方法的主要问题在于计算中会出现牵涉到许多算子的极其复杂的代数,包括计算 n!项之和.这对高阶群是十分困难的,即传统置换群方法不足以解决 N 值较大的电子系统的杨盘基问题.文献[2]对传统杨盘方法进行改进,规定杨盘的杨算符仅对 Slater 函数中的空间量子态有置换作用.在此规定下,给出了杨盘的杨算符的约化理论和约化方法,使得置换算子的个数比传统置换群给出的有很大简化,并由杨盘置换链给出了确定任一正交归一化电子杨盘基的 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 的纵因子积的方法,该方法进一步极大的简化了杨算符的个数.尽管如此,在按文献[2]中(25)式计算 $A_{ie}^{[\lambda]}S_i^{[\lambda]}\Phi_i^{[\lambda]}$ 时,对于 $S_i^{[\lambda]}\Phi_i^{[\lambda]}$ 给出的每一项结果,总是从左至右依次计算 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 中各置换算符对该项结果的置换作用,即需要对 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 中的每一个置换算符都要进行相应的计算程序,当组态($l_+^n\ l_-^m$)中的 n,m 数值都较大时,相应的计算量还是不小的.本文对文献[2]的这种计算方法进行重大改进,指出了完全对称纵置换算符对杨盘 Slater 基核作用所满足的等概率置换规律,由此规律给出了确定斜交杨盘 $T_{ig}^{[\lambda]}$ 的等概率比对方法,该方法完全避免了 $A_{ig}^{[\lambda]}$ 中各置换算符对 Slater 基核 $S_i^{[\lambda]}\Phi_i^{[\lambda]}$ 中诸 Slater 函数的具体运算过程.在文献[2]中由杨盘置换链关系给出的 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 的纵因子积的基础上,由两相邻置换关系的杨盘的纵因子积相差的纵置换因子给出了两个杨盘间纵置换算符的差别,由此纵置换算符的差别和两杨盘间满足的置换关系给出了确定正交杨盘基的阶梯计算方法,该方法可由已知 $T_{ie}^{[\lambda]}$ 确定出有相邻置换链关系的未知 $T_{je}^{[\lambda]}$,因而能够方便的确定 n,m 数值都较大时组态($l_+^n\ l_-^m$)中的电子杨盘基.

2. 基本对称算子,根态,生成态

对任意电子组态($l_+^n\ l_-^m$),我们总能够按 m 个“ - ”号在($n+m$)个数字上的一定分布规律给出电子组态($l_+^n\ l_-^m$)对应的($n+m$)!/n!m!个 Slater 函数 ϕ_i,记这些 ϕ_i 的集合为 $\{\phi_i\}_{[\lambda]}$.例如电子组态($l_+^4\ l_-^2$)的 15 个 Slater 函数 ϕ_i 的集合[2]为 $\{\phi_i\}_{[2^2 1^2]}$,依次表示为

$$\phi_1 = |\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}\overset{-}{5}\overset{-}{6}\rangle,$$

$$\phi_2 = |\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{-}{4}\overset{-}{5}\overset{+}{6}\rangle,$$

$$\phi_3 = |\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{-}{3}\overset{-}{4}\overset{+}{5}\overset{+}{6}\rangle$$

$$\phi_4 = |\overset{+}{1}\overset{-}{2}\overset{-}{3}\overset{+}{4}\overset{+}{5}\overset{+}{6}\rangle,$$

$$\phi_5 = |\overset{-}{1}\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}\overset{+}{5}\overset{+}{6}\rangle,$$

† E-mail:sqsyhkm@126.com

$$\phi_6 = |\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{-}{4}\overset{+}{5}\overset{-}{6}\rangle,$$

$$\phi_7 = |\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{-}{3}\overset{+}{4}\overset{-}{5}\overset{+}{6}\rangle,$$

$$\phi_8 = |\overset{+}{1}\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{-}{4}\overset{+}{5}\overset{+}{6}\rangle,$$

$$\phi_9 = |\overset{-}{1}\overset{+}{2}\overset{-}{3}\overset{+}{4}\overset{+}{5}\overset{+}{6}\rangle,$$

$$\phi_{10} = |\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{-}{3}\overset{+}{4}\overset{+}{5}\overset{-}{6}\rangle,$$

$$\phi_{11} = |\overset{+}{1}\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}\overset{-}{5}\overset{+}{6}\rangle,$$

$$\phi_{12} = |\overset{-}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{-}{4}\overset{+}{5}\overset{+}{6}\rangle,$$

$$\phi_{13} = |\overset{+}{1}\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}\overset{+}{5}\overset{-}{6}\rangle,$$

$$\phi_{14} = |\overset{-}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}\overset{-}{5}\overset{+}{6}\rangle,$$

$$\phi_{15} = |\overset{-}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}\overset{+}{5}\overset{-}{6}\rangle.$$

任一电子杨盘 $T_i^{[\lambda]}$ 的 Slater 基核 $S_i^{[\lambda]}\Phi_i^{[\lambda]}$ 中含有 2^m 个不同的ϕ_i [2] ,这个数目恰好等于任取 $t(0 \leqslant t \leqslant m)$ 个“ - ”号在右列 m 个数字上的不同分布个数的总和. 例如,$T_9^{[2^2 1^2]}$ 右列 2 个数字为 5,6,$S_9^{[2^2 1^2]}\Phi_9^{[2^2 1^2]}$ 中含有 2^2 个不同的 ϕ_i [2] 分别为

$$-\phi_1 = -|\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}\overset{-}{5}\overset{-}{6}\rangle,$$

$$\phi_{15} = |\overset{-}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}\overset{+}{5}\overset{-}{6}\rangle,$$

$$\phi_{11} = |\overset{+}{1}\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}\overset{-}{5}\overset{+}{6}\rangle,$$

$$-\phi_5 = -|\overset{-}{1}\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}\overset{+}{5}\overset{+}{6}\rangle.$$

对任一 $A_{ig}^{[\lambda]}$,其算子中最多含有 $T_i^{[\lambda]}$ 左列 n 个数字,则 $A_{ig}^{[\lambda]}$ 对 $T_i^{[\lambda]}$ 任一 Slater 函数 ϕ_i 作用时只能使其中这 n 个数字发生置换,即使相应的 n 个单电子态受到作用,而 $A_{ig}^{[\lambda]}$ 不含有的那些 m 个数字对应的单电子态保持不变.例如,$A_{9g}^{[2^2 1^2]}$ 由 $T_9^{[2^2 1^2]}$ 左列的 4 个数字 1,2,3,4 所构成,$A_{9g}^{[2^2 1^2]}$ 作用于 $S_9^{[2^2 1^2]}\Phi_9^{[2^2 1^2]}$ 时,$\phi_1, \phi_{15}, \phi_{11}, \phi_5$ 中的数字 5,6 对应的电子态不变,而只能使数字 1,2,3,4 对应的单电子态可能发生变化.例如,$A_{9g}^{[2^2 1^2]}\phi_1 = 12\phi_1$,而 ϕ_{15} 中的 $\overset{-}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}$ 则可能变化为 $\overset{+}{1}\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}$,$\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{-}{3}\overset{+}{4}$,$\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{-}{4}$,$\phi_5$ 中的 $\overset{-}{1}\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}$ 则可能变化为 $\overset{+}{1}\overset{-}{2}\overset{-}{3}\overset{+}{4}$,$\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{-}{3}\overset{-}{4}$,$\overset{-}{1}\overset{+}{2}\overset{-}{3}\overset{+}{4}$,$\overset{+}{1}\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{-}{4}$,$\overset{-}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{-}{4}$.显然,可以将上述 4 个单电子态间的数字置换给出的变化,变换为 4 个数字不再置换,而是自旋状态个数最少的态‘ - ’在 4 个数字上的不同分布所致.即 w 个数字间的置换,若置换对象中自旋状态‘ - ’的个数为 c ,则最多能给出的相应 Slater 函数的个数为组合数 C_w^c. 上例中 $C_4^0 = 1, C_4^1 = 4$, $C_4^2 = 6$. 由于 w 个数字间的置换作用于 ϕ_i ,能给出 C_w^c 个不同 ϕ_i 的纵置换算子的个数最少为 C_w^c 个.本文称这 C_w^c 个算子为基本对称算子,简称基算子.相对于 ϕ_{15},能够给出那 4 个态的基算子为

$${}_1\Omega = E - (12) - (13) - (14),$$

相对于 ϕ_5 能够给出那 6 个态的基算子为

$${}_2\Omega = E - (13) + (13)(24) - (23) - (14) - (24).$$

显然,基算子是相对于确定 ϕ_k 中若干个确定的数字而言的,对同一 ϕ_k 中的相同个数的不同数字,其基算子不同.需要注意到,${}_1\Omega\phi_{15}$ 给出的 4 个 ϕ_i 分别为 $\phi_{15}, \phi_{13}, \phi_{10}, \phi_6$,它们具有相同的电子态 $\overset{+}{5}\overset{-}{6}$;再注意到,15 个 Slater 函数 $\{\phi_i\}_{[2^2 1^2]}$ 中,具有 $\overset{+}{5}\overset{-}{6}$ 电子态的 ϕ_i 也只有这 4 个.显然,基算子 ${}_1\Omega$ 对 ϕ_{15} 的作用结果,完全可以用 ${}_1\Omega$ 中不含有的数字 5,6 在 ϕ_{15} 中的电子态 $\overset{+}{5}\overset{-}{6}$ 与 $\{\phi_i\}_{[2^2 1^2]}$ 比较对照而得出.因此,我们称 $\overset{+}{5}\overset{-}{6}$ 为 ${}_1\Omega\phi_{15}$ 的根态,$\phi_{15}, \phi_{13}, \phi_{10}, \phi_6$ 称为根态的生成态.这就是说,ϕ_k 的根态是 ϕ_k 中与算符作用无关的那些数字组成的电子态的集合,根态的生成态就是 $\{\phi_i\}_{[\lambda]}$ 中含有与根态完全相同的单电子态的那些 ϕ_i,在已知根态后,可将根态与 $\{\phi_i\}_{[\lambda]}$ 比较对照而确定生成态,并称该方法为确定生成态的比对法.

3.完全对称算子、等概率比对方法

设 $\{a\}_i^{[\lambda]}$ 是 $T_{ig}^{[\lambda]}$ 的任一纵置换算子的集合,集合中含有 w 个不同数字,对应这些数字间的置换,任一 $\phi_i \in \{\phi_i\}_{[\lambda]}$ 都有确定的 C_w^c 个基算子.若 $\{a\}_i^{[\lambda]}$ 中的这些数字构成的算子与这 C_w^c 个基算子同态,即存在多一对应关系,则称 $\{a\}_i^{[\lambda]}$ 为完全对称算子,并记为 Ω_i. 显然,当存在 k 一对应关系时,Ω_i 中算子的个数为 $C_w^c \cdot k$. 由文献[2]中(23)式分析可知,$T_9^{[2^2 1^2]}$ 的 $A_{9g}^{[2^2 1^2]}$ 是 $\phi_1, \phi_{15}, \phi_{11}, \phi_5 \in \{\phi_i\}_{[2^2 1^2]}$ 的完全对称算子,存在的 k 一对应关系分别为 $k = 12,3,3,2$,分别对应 $C_4^0 = 1, C_4^1 = 4, C_4^1 = 4, C_4^2 = 6$;对文献[2]中(22)式分析知,$A_{1g}^{[2^2 1^2]}$ 具有与 $A_{9g}^{[2^2 1^2]}$ 完全相同的对称性质.事实上,任一 $T_i^{[\lambda]}$ 的$A_{ig}^{[\lambda]}$ 都是该杨盘的纵置换算子 $A_i^{[\lambda]}A_{iR}^{[\lambda]}$ 约化的结果,都是 $\phi_i \in$

$\{\phi_i\}_{[\lambda]}$ 的完全对称算子,这是电子杨盘的一个基本对称特性.设 ϕ_i 的完全对称算子 Ω_i 中算子个数为 s,则总有

$$s = C_n^c \cdot k. \tag{1}$$

由上述分析知,$A_{ig}^{[\lambda]}$ 作用于任一 $\phi_i \in \{\phi_i\}_{[\lambda]}$ 能给出 C_n^c 个 ϕ_j,即

$$A_{ig}^{[\lambda]}\phi_i = k(\phi_i + \phi_j + \cdots\phi_l). \tag{2}$$

同时,这 C_n^c 个 ϕ_j 对应同一个根态,对不同的 φ_i,根态又都不相同.一组 C_n^c 个 ϕ_j 与 $A_{ig}^{[\lambda]}\phi_i$ 的根态是一一对应关系,换句话说,由 $A_{ig}^{[\lambda]}\phi_i$ 的根态就能找到一组 C_n^c 个 ϕ_j,并由(1)式给出(2)式中诸 ϕ_j 的系数.

由 $A_{ig}^{[\lambda]}\phi_i$ 的根态寻找一组 C_n^c 个 ϕ_j 的方法是,将 $A_{ig}^{[\lambda]}\phi_i$ 的根态与 $\{\phi_i\}_{[\lambda]}$ 中诸 ϕ_j 比对,具有相同根态的诸 ϕ_j 一定有 C_n^c 个,并将其代入(2)式.当 ϕ_i 跑遍 $T_i^{[\lambda]}$ 的 Slater 基核内所有 2^m 个 Slater 项时,也就找到了 $T_{ig}^{[\lambda]} = A_{ig}^{[\lambda]}S_i^{[\lambda]}\Phi_i^{[\lambda]}$,由此确定 $T_{ig}^{[\lambda]}$ 的方法称为等概率比对方法.由此等概率比对方法确定的 $T_{1g}^{[2^2 1^2]}$,$T_{9g}^{[2^2 1^2]}$ 分别与文献[2]中(22),(23)式相同.

4. 求解 $T_{je}^{[\lambda]}$ 的置换链方法

当 $T_j^{[\lambda]} = R_{ji}T_i^{[\lambda]}$ 时,由确定 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 的纵置换因子的规则[2]知,$A_{je}^{[\lambda]}$ 比较 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 多一个相应的纵置换因子,设为 $E-(\alpha\gamma)$,则有

$$\begin{aligned} A_{je}^{[\lambda]} &= R_{j,i}A_{ie}^{[\lambda]} \\ &= (\mu\gamma)_{j,i}(E-(\alpha\beta))(E-(\rho\mu)) \\ &= (E-(\alpha\beta))(E-(\alpha\gamma))(E-(\rho\gamma)), \end{aligned} \tag{3}$$

式中显示出了置换 $R_{j,i}$ 的全部运算性质.性质 1 将 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 置换算符中的数字 μ 置换为 γ,将数字 γ 置换为 μ.性质 2 在 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 的纵置换因子中的适当位置处插入一个纵置换因子 $(E-(\alpha\gamma))$,确保 $A_{je}^{[\lambda]}$ 是其纵因子积.

设组态 $(l_+^n\ l_-^m)$ 中 $m \geqslant 2$,则 $A_{je}^{[\lambda]}$ 中比较 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 多出了由 $(\mu\gamma)_{j,i}$ 给出的与对换算符 $-(\alpha\gamma)$ 相关的若干个有效置换算符

$$\begin{aligned} \{-(\alpha\gamma)\}_{j,i} &= -(\alpha\gamma) + (\alpha\beta)(\alpha\gamma) \\ &= [E-(\alpha\beta)][-(\alpha\gamma)]. \end{aligned} \tag{4}$$

若令 $(\mu\gamma)'_{j,i}A_{ie}^{[\lambda]}$ 仅表示将 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 中置换算符的数字 μ,γ 互换,于是有

$$A_{je}^{[\lambda]} = (\mu\gamma)'_{j,i}A_{ie}^{[\lambda]} + \{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}, \tag{5}$$

则

$$\begin{aligned} T_{je}^{[\lambda]} &= A_{je}^{[\lambda]}S_j^{[\lambda]}\Phi_j^{[\lambda]} \\ &= [(\mu\gamma)'_{j,i}A_{ie}^{[\lambda]} + \{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}]S_j^{[\lambda]}\Phi_j^{[\lambda]}, \end{aligned} \tag{6}$$

因为[2]

$$S_j^{[\lambda]}\Phi_j^{[\lambda]} = (\mu\gamma)_{j,i}S_i^{[\lambda]}\Phi_i^{[\lambda]}, \tag{7}$$

$$\begin{aligned} &[(\mu\gamma)'_{j,i}A_{ie}^{[\lambda]}]S_j^{[\lambda]}\Phi_j^{[\lambda]} \\ &= [(\mu\gamma)'_{j,i}A_{ie}^{[\lambda]}][(\mu\gamma)_{j,i}S_i^{[\lambda]}\Phi_i^{[\lambda]}] \\ &= (\mu\gamma)'_{j,i}[A_{ie}^{[\lambda]}S_i^{[\lambda]}\Phi_i^{[\lambda]}] \\ &= (\mu\gamma)_{j,i}T_{ie}^{[\lambda]}, \end{aligned} \tag{8}$$

其中的 $(\mu\gamma)'_{j,i}$ 与 $(\mu\gamma)_{j,i}$ 意义完全相同,则有

$$T_{je}^{[\lambda]} = (\mu\gamma)_{j,i}T_{ie}^{[\lambda]} + \{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}S_j^{[\lambda]}\Phi_j^{[\lambda]}. \tag{9}$$

上式表明,在同一置换链中,两个有相邻置换关系的正交杨盘基间存在着确定的变换关系,利用该变换关系可以将 $T_{ie}^{[\lambda]}$ 进行置换变换 $(\mu\gamma)_{j,i}$ 后,再用算符 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 对 $T_j^{[\lambda]}$ 的 Slater 基核进行运算,两运算之和即为 $T_{je}^{[\lambda]}$.由于 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i} \in A_{je}^{[\lambda]}$,且仅是与对换算符 $-(\alpha\gamma)$ 相关的若干个有效置换算符,其个数比较 $A_{je}^{[\lambda]}$ 要少得多,而 $(\mu\gamma)_{j,i}T_{ie}^{[\lambda]}$ 的置换运算具有同一规律性,且其中有半数的运算只需改变项的符号,Slater 函数并不改变.因此,由(9)式的方法求解 $T_{je}^{[\lambda]}$ 要比较文献[2]中(25)式给出的方法要大为简化.另外,按文献[2]求解 $A_{je}^{[\lambda]}$,需将 $A_{je}^{[\lambda]}$ 的纵因子积展开,并与 $A_{jg}^{[\lambda]}$ 对照选取,显然,还需确定 $A_{jg}^{[\lambda]}$,而本文(9)式的方法完全不需要 $A_{jg}^{[\lambda]}$,因而也省略了确定 $A_{jg}^{[\lambda]}$ 的过程.我们称(9)式方法为求解 $T_{je}^{[\lambda]}$ 的阶梯计算方法.

5. 由 $A_{ie}^{[\lambda]}$,$A_{je}^{[\lambda]}$ 确定 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 的方法及 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 的特性

由上述 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 的定义和(4)式知,将 $A_{je}^{[\lambda]}$ 的纵因子积向着对换算符 $-(\alpha\gamma)$ 的 $k(1 \leqslant k \leqslant m)$ 元正序积[2]展开,并记展开式为 $A_{je}^{[\lambda]}[-(\alpha\gamma)]$,之后,需对正序积形式的算符进行有效算符'资格'的验证,才能得到有效算符的集合 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$.

文献[2]给出了 a 算符的正序积概念,现在分析 a 算符的正序积一定是有效算符的条件.

a 算符的正序积是消去算符的鉴别规则为:因有效算符的任一轮换结构内不能含有该 $T_j^{[\lambda]}$ 的 $\{l^+\}$ 中两个或两个以上的数字,即有效算符的任一轮换结构内最多含有一个 $\{l^+\}$ 中的数字[2].则正序积算符中若含有两个或两个以上的 $\{l^+\}$ 中的

数字时，需对该算符进行有效算符'资格'的验证. 基本的验证方法为，将该算符由正序积形式变换为相应数字的轮换结构形式，从而易于验证. 例如，对于确定的 $T_j^{[\lambda]}$，设 $\varepsilon,\mu\in\{d^+\}$，对二元正序积 $(\chi\varepsilon)(\eta\mu)$ 算符，若 $\chi=\eta$ 时，$(\chi\varepsilon)(\eta\mu)=(\chi\mu\varepsilon)$ 必为消去算符；若 $\chi<\eta$ 时，则三元正序积 $(\chi\eta)(\chi\varepsilon)(\eta\mu)=(\chi\varepsilon\eta\mu)$ 也为消去算符. 由此可给出 a 算符正序积为消去算符的鉴别规则：a 算符的 $k(k\leqslant m)$ 元正序积中，若含有 $T_j^{[\lambda]}$ 的 $\{d^+\}$ 中 2 个及 2 个以上数字分别给出的 a 算符，当且仅当这 $\{d^+\}$ 中任 2 个数字分别给出的 a 算符对应的另外 2 个数字相等，或者恰巧组成了正序积中的 a 算符时，该正序积算符为第二类消去算符.

设数字 $i<j<k$ 是 $T_i^{[\lambda]}$ 左列数字，且 $-(ik)$，$-(jk)$ 都是 $T_i^{[\lambda]}$ 的 a 算符，但由 a 算符的正序积定义知，这两个 a 算符不能构成正序积算符，因为它们的'正序积算符"$(ik)(jk)=(ikj)=(ij)(ik)$ 是个与另一正序积算符 $(ij)(ik)$ 置换作用相同的重复算符. 本文定义这类不能构成正序积算符的重复算符为第三类消去算符.

显然，可给出 a 算符的正序积是重复算符的鉴别规则：在若干 a 算符给出的一个正序积形式中，若发现有两个非直接相乘的 a 算符因子 $-(ik)$，$-(jk)$，则由 a 算符的正序积定义和下文给出的 $A_{je}^{[\lambda]}[-(\alpha\gamma)]$ 展开规则知，因子 $-(jk)$ 必因算符间的对易关系而可与 $-(ik)$ 直接相乘，则此正序积必为重复算符. 具体例子见下文(22)式. 由上述两条鉴别规则，可由 $A_{je}^{[\lambda]}[-(\alpha\gamma)]$ 直接得到 $A_{je}^{[\lambda]}$ 的 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$，即不需要与 $A_{jg}^{[\lambda]}$ 中的那些算符比较对照.

例如由文献[2]中例 4 诸 $A_{je}^{[2^21^2]}$ 可得

$$
\begin{aligned}
\{-(34)\}_{2,1} &= -(34),\ \{-(35)\}_{3,2}\\
&= -(35),\ \{-(12)\}_{4,1}\\
&= -(12),\\
\{-(24)\}_{5,4} &= -(24)+(12)(24)\\
&= [E-(12)][-(24)],\\
\{-(25)\}_{6,5} &= [E-(12)][-(25)],\ \{-(13)\}_{7,5}\\
&= [E-(12)][-(13)],\\
\{-(25)\}_{8,7} &= [E-(12)-(13)][-(25)],\\
\{-(14)\}_{9,8} &= [E-(12)-(23)][-(14)].
\end{aligned}
\tag{10}
$$

需要注意的是，由(9)式计算诸 $T_{je}^{[\lambda]}$ 时，在整个计算过程中，对得出的诸 $T_{je}^{[\lambda]}$ 的各项系数不得变更，只有整个阶梯计算过程结束，才能因归一化而化简各项系数. 例如已计算出

$$
\begin{aligned}
T_{7e}^{[2^21^2]} = (&-6\phi_2+2\phi_3-2\phi_4-2\phi_5\\
&+2\phi_7+2\phi_8-2\phi_9+2\phi_{11}\\
&+2\phi_{12}+2\phi_{14}),
\end{aligned}
$$

又知

$$
\begin{aligned}
T_8^{[2^21^2]} &= (65)_{8,7}T_7^{[2^21^2]},\\
S_8\Phi_8 &= \phi_6-\phi_8-\phi_{15}+\phi_5,\\
\{-(25)\}_{8,7}S_8\Phi_8 &= [E-(12)-(13)][-(25)]\\
&\quad\times(\phi_6-\phi_8-\phi_{15}+\phi_5)\\
&= [E-(12)-(13)]\\
&\quad\times(\phi_6-\phi_2-\phi_{15}+\phi_{14})\\
&= 3\phi_6-3\phi_2-\phi_{15}-\phi_{13}-\phi_{10}\\
&\quad+\phi_{14}+\phi_{11}+\phi_7,\\
(65)_{8,7}T_{7e}^{[2^21^2]} &= (6\phi_6-2\phi_3+2\phi_4\\
&\quad+2\phi_5-2\phi_{10}-2\phi_8+2\phi_9\\
&\quad-2\phi_{13}-2\phi_{12}-2\phi_{15}),
\end{aligned}
\tag{11}
$$

由(9)式可得

$$
\begin{aligned}
T_{8e}^{[2^21^2]} = \frac{1}{\sqrt{144}}(&-3\phi_2-2\phi_3+2\phi_4\\
&+2\phi_5+9\phi_6+\phi_7-2\phi_8+2\phi_9-3\phi_{10}\\
&+\phi_{11}-2\phi_{12}-3\phi_{13}+\phi_{14}-3\phi_{15}).
\end{aligned}
$$

显然，由阶梯方法计算的 $T_{8e}^{[2^21^2]}$ 同文献[2]，由计算过程知，该方法要比(25)式给出的计算方法简便.

同时，(11)式显示出，$[E-(12)-(13)]$ 作用于 $[-(25)]S_8\Phi_8$ 中任一 ϕ_k 的结果完全符合(2)式右端的描述，这说明，相对于 ϕ_6,ϕ_2，$[E-(12)-(13)]$ 是完全对称算子，相对于 ϕ_{15},ϕ_{14}，$[E-(12)-(13)]$ 是基算子. 因此，可以将 $\{-(25)\}_{8,7}$ 记为

$$\{-(25)\}_{8,7}=\Omega_{8,7}[-(25)],$$

其中 $\Omega_{8,7}=[E-(12)-(13)]$. 事实上，(10)式中的 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 都可以表示为 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}=\Omega_{j,i}[-(\alpha\gamma)]$，其中，$\Omega_{2,1}=\Omega_{3,2}=\Omega_{4,1}=E$，$\Omega_{5,4}=\Omega_{6,5}=\Omega_{7,5}=[E-(12)]$，$\Omega_{9,8}=[E-(12)-(23)]$. 这表明，对正交杨盘 $T_{je}^{[2^21^2]}$，由置换链关系给出的诸 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 都可以分解为对称算子 $\Omega_{j,i}$ 与 $[-(\alpha\gamma)]$ 的乘积形式. 因此，(9)式中右边第二项 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}S_j^{[\lambda]}\Phi_j^{[\lambda]}$ 的计算可写为

$$\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}S_j^{[\lambda]}\Phi_j^{[\lambda]}=\Omega_{j,i}[-(\alpha\gamma)]S_j^{[\lambda]}\Phi_j^{[\lambda]}. \tag{12}$$

显然，对于 $\Omega_{j,i}\phi_z(\phi_z\in[-(\alpha\gamma)]S_j^{[\lambda]}\Phi_j^{[\lambda]})$ 的计

算，依然可以按等概率比对法进行运算．设 $\Omega_{j,i}$ 中含有 z 个算符，这 z 个算符由 w 个不同数字组成，这 w 个数字在 ϕ_z 上对应的‘－’号的个数为 c，则 $\Omega_{j,i}$ 作用于 ϕ_z 能给出 C_w^c 个 ϕ_j，这 C_w^c 个 ϕ_j 可由 $\Omega_{j,i}\phi_z$ 的根态与 $\{\phi_i\}_{[\lambda]}$ 比较对照得到．即有

$$\Omega_{j,i}\phi_z = k(\phi_i + \phi_j + \cdots\phi_l),\ k = z/C_w^c, \tag{13}$$

(12)，(13)式显示了 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 区别于 $A_{je}^{[\lambda]}$ 的对称性质，除去 $j = d_{[\lambda]}$，其余的 $A_{je}^{[\lambda]}$ 都已不是基本对称算子或完全对称算子，而 $\Omega_{j,i} \in \{-(\alpha\gamma)\}_{j,i} \in A_{je}^{[\lambda]}$ 却依然是．这个性质是应用(9)式处理杨盘基 $T_{ie}^{[2^21^2]}$ 时发现的，但任意杨盘基 $T_{ie}^{[\lambda]}$ 的 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 都具有该性质，因为 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i} \in A_{je}^{[\lambda]} \in A_{jg}^{[\lambda]}$ 都是不可约化算子的集合．

当然，在 $\Omega_{j,i}$ 中算符个数较少时，可逐个算符运算，且只需关注‘－’号在数字上的相应变化，就可在 $\{\phi_i\}_{[\lambda]}$ 表中直接给出运算结果．例如(11)式 $\Omega_{8,7}$ 中只有 3 个算符，就可由 $\{\phi_i\}_{[2^21^2]}$ 表分别进行 3 个算符的运算．由(9)式计算诸 $T_{je}^{[2^21^2]}$ 的结果同文献[2]．

6. 用等概率比对方法确定诸杨盘基 $T_{ie}^{[21^2]}$

由文献[2]知，当 $[\lambda] = [2\,1^2]$ 时，$d_{[2\,1^2]} = 3$，即

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1} 4 \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} 4 \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 4 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} 3 \\ \cline{1-1}\end{array}$$

$$T_1^{[2\,1^2]} \qquad\qquad T_2^{[2\,1^2]} \qquad\qquad T_3^{[2\,1^2]}$$

组态的 Slater 基函数 $\{\phi_i\}_{[2\,1^2]}$ 为

$$\varphi_1 = |\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{-}{4},$$

$$\varphi_2 = |\overset{+}{1}\overset{+}{2}\overset{-}{3}\overset{+}{4},$$

$$\varphi_3 = |\overset{+}{1}\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4},$$

$$\varphi_4 = |\overset{-}{1}\overset{+}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}.$$

$T_3^{[2\,1^2]}$ 的 Slater 基核为 $S_3^{[2\,1^2]}\Phi_3^{[2\,1^2]} = \varphi_1 - \varphi_4$，由文献[2]中(18)式知，$A_{3g}^{[2\,1^2]}$ 中含有 3 个算符，又 $A_{3g}^{[2\,1^2]}$ 不含数字 4，则 $A_{3g}^{[2\,1^2]}$ 相对于 φ_1，φ_4 的根态分别为 $\overset{-}{4}$，$\overset{+}{4}$，由等概率比对方法知，根态 $\overset{-}{4}$ 的生成态为 φ_1，而 $\overset{+}{4}$ 的生成态为 φ_2，φ_3，φ_4，由(1)，(2)式可得

$$T_{3g}^{[2\,1^2]} = \frac{1}{\sqrt{12}}(3\varphi_1 - \varphi_2 - \varphi_3 - \varphi_4), \tag{14}$$

又 3 个 $T_i^{[2\,1^2]}$ 中存在 1 个杨盘置换链，i 值依次为 1，2，3，诸杨盘的置换变换关系依次为 $T_2^{[2\,1^2]} = (32)_{2,1}T_1^{[2\,1^2]}$，$T_3^{[2\,1^2]} = (43)_{3,2}T_2^{[2\,1^2]}$．由(3)式可得

$$\begin{aligned} A_{2e}^{[2\,1^2]} &= (32)_{2,1}A_{1e}^{[2\,1^2]} \\ &= (32)_{2,1}E = [E - (12)], \end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned} A_{3e}^{[2\,1^2]} &= (43)_{3,2}A_{2e}^{[2\,1^2]} \\ &= (43)_{3,2}[E - (12)] \\ &= [E - (12)][E - (13)], \end{aligned} \tag{16}$$

因 $m = 1$，由 $A_{je}^{[\lambda]}$ 确定 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 的方法可知

$$\begin{aligned} &\{-(12)\}_{2,1} = -(12), \\ &\{-(13)\}_{3,2} = -(13). \end{aligned} \tag{17}$$

易得，$T_{1e}^{[2\,1^2]} = S_1\Phi_1 = \varphi_3 - \varphi_4$，$S_2\Phi_2 = (32)_{2,1}S_1\Phi_1 = -\varphi_2 + \varphi_4$，$(32)_{2,1}T_{1e}^{[2\,1^2]} = -\varphi_2 + \varphi_4$，$\{-(12)\}_{2,1}S_2\Phi_2 = -(12)S_2\Phi_2 = -\varphi_2 + \varphi_3$，由(9)式可得 $T_{2e}^{[2\,1^2]} = -2\varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4$．同理，由(9)式可得 $T_{3e}^{[2\,1^2]} = T_{3g}^{[2\,1^2]}$．则归一化的

$$T_{1e}^{[2\,1^2]} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_3 - \varphi_4),$$

$$T_{2e}^{[2\,1^2]} = \frac{1}{\sqrt{6}}(-2\varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4), \tag{18}$$

显然有 $\langle T_{ie}^{[2\,1^2]} | T_{je}^{[2\,1^2]}\rangle = \delta_{ij}, i, j = 1,2,3$．(14)—(18)式表明，应用等概率比对方法完全确定了诸杨盘基 $T_{ie}^{[2\,1^2]}$，这显示了(1)，(2)，(9)，(12)，(13)式对于任意组态 $(l_+^n\ l_-^m)$ 杨盘基的普适性．

7. 算子 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i} \in A_{je}^{[\lambda]} \in T_{je}^{[\lambda]} \in (l_+^n\ l_-^m)$ 中算符个数与 (n,m) 的关系

设展开式 $A_{je}^{[\lambda]}[-(\alpha\gamma)]$ 中算符个数为 z'，将展开式中 k 元正序积形式的算符个数记为 z'_k，则有

$$z' = z'_1 + z'_2 + \cdots + z'_m = \sum_{k=1}^{m} z'_k. \tag{19}$$

设纵因子积中的因子个数即 a 算符个数为 K，则 $z'_1 = 1$，即 $-(\alpha\gamma)$ 一个算符，

$$z'_2 = (K - 1),$$

$$z'_k = \sum_{i=k-2}^{K-k+1}(K - 1 - i)$$

$$= \frac{(K-1)(K-2k+4)}{2}, k \geqslant 3. \tag{20}$$

再对 $A_{je}^{[\lambda]}[-(\alpha\gamma)]$ 中每一个算符按有效算符鉴别规则进行‘资格’验证，之后得到 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$，其中算符个数

$$z = z_1 + z_2 + \cdots + z_m = \sum_{k=1}^{m} z_k, \tag{21}$$

式中 z_k 分别表示 k 元正序积形式的有效算符的个数.

例如，设某 $T_{je}^{[\lambda]} \in (l_+^5 \ l_-^3)$ 的纵因子积为

$$\begin{aligned} A_{je}^{[\lambda]} = &(E-(12))(E-(13))(E-(14)) \\ &(E-(15))(E-(23))(E-(24)) \\ &(E-(25))(E-(34))(E-(35)), \end{aligned} \tag{22}$$

且比较置换链中相邻的较小杨盘 $T_{ie}^{[\lambda]}$ 多一个纵置换因子 $(E-(15))$，其中数字 $4,5 \in \{d^+\}$. 由(22)式知，式中 a 算符个数 $K = 9$，又 $m = 3$，则由(20)式知，由(22)式给出的 $A_{je}^{[\lambda]}[-(\alpha\gamma)]$ 中的 $z_2' = 8, z_3' = 28$，$z' = 37$，经过有效算符‘资格’验证后，得到

$$\begin{aligned} \{-(15)\}_{j,i} = &(E-(12)-(13)-(23) \\ &-(24)-(34)+(12)(13)+(12)(23) \\ &+(12)(34)+(13)(24) \\ &+(23)(24)+(23)(34))[-(15)] \\ = &\Omega_{j,i}[-(15)]. \end{aligned} \tag{23}$$

显然有，$z_1 = 1, z_2 = 5, z_3 = 6, z = 12$. 易证，上式中 $\Omega_{j,i}$ 满足(13)式的 $k = z/C_w^c$. 将诸 z_k 与 z'_k 相比较知，当 $k \geqslant 2$ 时，z_k' 个正序积算符中，存在大量消去算符和重复算符.

为叙述方便，给出如下定义：两个 a 算符 $-(\chi\varepsilon)$，$-(\eta\mu)$ 的大小，若 $\chi < \eta$ 或 $\chi = \eta, \varepsilon < \mu$，则称 $-(\chi\varepsilon) < -(\eta\mu)$. 两个 $k(2 \leqslant k \leqslant m)$ 元正序积算符的大小，由左至右依次比较正序积算符里的 a 算符，a 算符小者则正序积算符小. 若干个 $k(1 \leqslant k \leqslant m)$ 元正序积算符按由小到大的顺序排列称为算符的正序排列. 显然任一纵因子积中 a 算符的排列都是正序排列.

做展开式 $A_{je}^{[\lambda]}[-(\alpha\gamma)]$ 时应遵照如下展开规则：1)首先作出所有的有效二元正序积算符，并将这些算符正序排列，所得集合记为 $\{\varepsilon_2\}$. 显然，$\{\varepsilon_2\}$ 是求作三元正序积算符的基础. 2)将 $\{\varepsilon_2\}$ 中每一个二元正序积算符里的 $a \notin [-(\alpha\gamma)]$ 算符与其右面的每一个二元正序积算符组成可能的有效三元正序积算符，并同样正序排列，该集合记为 $\{\varepsilon_3\}$. 显然，$\{\varepsilon_{k-1}\}$ 是求作 $k(1 \leqslant k \leqslant m)$ 元正序积算符的基础. 3)将 $\{\varepsilon_{k-1}\}$ 中每一个 $(k-1)$ 元正序积算符里的最小 $a \notin [-(\alpha\gamma)]$ 算符依次与那些最小 $a \notin [-(\alpha\gamma)]$ 算符不同的较大 $(k-1)$ 元正序积算符作正序积，可依次作出有效 $k(2 \leqslant k \leqslant m)$ 元正序积算符集合 $\{\varepsilon_k\}$. $\{\varepsilon_2\}$，$\{\varepsilon_3\}$ 算符的正序排列例子见(23)式.

在实际展开过程中，对易于判定的非有效算符则不予写出. 显然 z 与数字 K, m 的大小有关，与 K 个 a 算符中含有 $\{d^+\}$ 里的数字个数有关，与 K 个 a 算符中能给出重复算符的 a 算符个数有关.

因子个数 K 与 $T_{je}^{[\lambda]}$ 在置换链中的位次序号 e 的关系[2]为：$K = e - 1$. 例如，(16)式给出的 $K = 3 - 1 = 2$. 显然，e 数值越大，则 K 数值越大. 而 $e_{\max}$ 数值取决于杨图 $[\lambda] = [2^m 1^{n-m}]$ 的维数即杨盘的个数 $d_{[\lambda]}$. 例如 $[\lambda] = [21^2]$ 时，$d_{[\lambda]} = 3$，$e_{\max} = 3$；$[\lambda] = [2^2 1^2]$ 时，$d_{[\lambda]} = 9$，$e_{\max} = 6$. 显然，对组态 $(l_+^n \ l_-^m)$，$n, m \leqslant 2l + 1$，n, m 数值越大，则由 $[\lambda] = [2^m 1^{n-m}]$ 给出的 $T_{ie}^{[\lambda]}$ 的个数 $d_{[\lambda]}$ 越多[3]，则 $e_{\max}$ 数值越大，而 $K_{\max}$ 也越大. 此时，若 $T_{je}^{[\lambda]}$ 的位次序号 e 较大，则其纵因子积中的 a 算符个数 K 值较大，因而展开式中给出的诸算子个数 $z_k(2 \leqslant k \leqslant m)$ 值较大及 z_k 的个数较多，使得 z 值较大. 显然，当 z 值较大时，由(12)式知，$\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 给出的 $\Omega_{j,i}$ 中算符个数较多，因而，应用(13)式即等概率比对法确定 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i} S_j^{[\lambda]} \Phi_j^{[\lambda]}$，比较用众多算符对 $S_j^{[\lambda]} \Phi_j^{[\lambda]}$ 做复杂而烦琐的具体置换运算要简便得多. 等概率比对法只有在 $\Omega_{j,i}$ 中算符个数较多时才显示出优越性，因此，特别适用于 n, m 值都较大时的杨盘基的计算.

8. 结　　论

比较文献[2]，本文进一步揭示了电子杨盘基 $T_{ig}^{[\lambda]}$ 中纵置换算符 $A_{ig}^{[\lambda]}$ 的对称性意义，即 $A_{ig}^{[\lambda]}$ 是完全对称算子. 当由文献[2]给出的正交归一化电子杨盘的纵置换算符的构造规则构造出 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 时，除 $A_{d_{[\lambda]} e}^{[\lambda]}$ 外，其余诸 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 都已不是完全对称算子，但本文又在满足置换链关系的诸 $A_{ie}^{[\lambda]}$ 中找到了含有对称算子 $\Omega_{j,i}$ 的算符 $\{-(\alpha\gamma)\}_{j,i}$，从而给出了由(9)式所表示的求解正交归一化电子杨盘基的阶梯计算方法，在具体计算过程中又可根据对称算子的性质采用等概率比对方法. 同时，本文还利用文献[2]给

出的 a 算符的正序积概念，由算符集合 $\{\_(\alpha\gamma)\}_{j,i}$ 中提取出公因子算符 $[\_(\alpha\gamma)]$，这些都极大的简化了杨盘基 $T_{je}^{[\lambda]}$ 的计算过程.显然，对于 n，m 值都较大时的杨盘基的计算，本文给出的方法将会显示出巨大的优越性，更易于解决 N 值较大的电子系统的杨盘基问题，文献[4]已指出等价电子杨盘基与其波函数之间的变换性质为幺正变换，显然，由此电子杨盘方法能够方便的给出诸如文献[5—10]中处理原子问题时所需要的满足泡利原理的多电子体系的波函数.

[1] Harter W G，Patterson C W 1976 *Phys*. *Rev*. A **13** 1067

[2] Hu K M，Wang J B 2007 *Acta Phys*. *Sin*. **56** 1253 (in Chinese) [胡昆明、王建波 2007 物理学报 **56** 1253]

[3] Ma Z Q 1998 *Group Theory in Physics* (Beijing: Science Press) p350 (in Chinese) [马中骐 1998 物理学中的群论(北京:科学出版社)第350页]

[4] Hu K M 2005 *Acta Phys*. *Sin*. **54** 4524 (in Chinese) [胡昆明 2005 物理学报 **54** 4524]

[5] Gu B，Jin N Q，Wang Z P，Zeng X H 2005 *Acta Phys*. *Sin*. **54** 4648 (in Chinese) [顾 斌、金年庆、王志萍、曾祥华 2005 物理学报 **54** 4648]

[6] Li X M，Chen J H 1999 *Acta Phys*. *Sin*. **48** 1953 (in Chinese) [李晓梅、陈健华 1999 物理学报 **48** 1953]

[7] Li J，Dong C Z，Xie L Y 2006 *Acta Phys*. *Sin*. **55** 655 (in Chinese) [李 杰、董晨钟、颉录有 2006 物理学报 **55** 655]

[8] Dong C Z，Xie L Y，Wang J J，Jiang J 2005 *Chin*. *Phys*. **14** 1108

[9] Yuan P，Liu X S，Xie L Y，Zhang Y J，Dong C Z 2003 *Chin*. *Phys*. **12** 271

[10] Zhang S Y 1984 *Acta Phys*. *Sin*. **33** 86 (in Chinese) [张思远 1984 物理学报 **33** 86]

The equal probability comparison method of determining the equivalent-electron Young basis

Hu Kun-Ming†

(*Physics and Information Enqineering Department*，*Shangqiu Normal College*，*Shangqiu* 476000，*China*)

(Received 15 February 2008；revised manuscript received 7 July 2008)

Abstract

The concepts of the basic symmetric operator and complete symmetric operator of the equivalent-electron regular Young tableau $T_{ig}^{[\lambda]}$ are presented，and the concepts of the root state and generative state generated by these symmetric operators acting on each Slater function ϕ_i are also given. Based on the establishment rules of the vertical permutation operator $A_{ig}^{[\lambda]}$ of the orthogonal normalization Young tableau $T_{ie}^{[\lambda]}$，the symmetric operators in $A_{ie}^{[\lambda]}$ and the equiprobability comparison method for solving $T_{ie}^{[\lambda]}$ are presented，which can avoid the complicated algebra involving many operators. Finally，a new method for sloving the Young basis of the electron system with a large N is presented.

Keywords：regular Young tableau，symmetric operator，root state，equal probability comparison method

PACC：0365，0220

† E-mail：sqsyhkm@126.com