

原子激发态的二体电子关联变分计算*

范永昌 李名生 李白文

(中国科学院武汉物理研究所)

1987 年 6 月 11 日收到

本文将 Wilets 等人提出并由作者加以改进的二体电子关联变分方法推广到多电子原子一般激发态结构的计算. 对 He 原子及其等电子系列 $(1s)(nl)$ 电子组态的激发单重态 n^1L 、三重态 n^3L , Be 原子及其等电子系列 $(1s)^2(2s)(nl)^3L$ 和 B 原子 $(1s)^2(2s)^2(nl)^2L$ 等激发态进行了计算. 结果表明: 这种方法的波函数结构简单, 便于应用. 不仅计算量小, 而且在计算精度上也与远为复杂的 CI 和 $1/Z$ 微扰展开等方法的结果十分相近.

一、引 言

随着等离子体物理、天体物理以及受控核聚变技术的迅速发展, 对原子激发态和高离化态精确数据的需要日益迫切^[1-3]. 许多重要的物理量如: 振子强度、能级的超精细结构、电磁极化率等用 HF 自洽场方法常常不能给出满意的计算结果. 在许多情况下, HF 方法中略去了的电子间的库仑关联效应对这些物理量的计算精度有着决定性的影响. 因此, 正确地引入电子关联是原子结构精确计算的中心问题, 目的是得到精度高应用方便的原子基态和激发态的波函数.

60 年代以来, 随着高速大容量电子计算机的出现, 电子关联的计算有了很大的发展. 人们由变分原理和微扰论两个基本途径出发, 提出了各种不同的关联计算方法, 取得了一定的成功. 但大多数关联方法仅能对较轻原子的基态进行有效的计算, 虽然 CI 和 $1/Z$ 微扰展开等方法可以用于激发态的计算^[4-9], 但一般计算量都很大, 而且波函数结构复杂, 应用不太方便. 这些方法对不同原子的不同激发态及同一原子的不同激发态, 在组态函数的选择和处理上也有较大的差异, 通用性较差. 因此寻求一种波函数的构造更为简单, 计算更为经济且具有较大通用性的原子激发态的关联计算方法成为目前原子结构研究中亟待解决的重要课题之一.

80 年代初, Wilets 等人提出了一种颇具特点的研究电子关联的变分方法^[10]. 后来我们把这种方法作了发展, 进一步考虑了电子关联的自旋相关性和动量相关性. 并对 He, Li, Be, B 等原子的基态及由单一 Slater 行列式表示的 Li 原子的简单激发态进行了关联变分计算^[11-14], 取得了令人满意的结果. 本文的目的是将这种方法推广到原子一般激发态的研究, 并且对 He, Be, B 等原子激发态的多重能级结构作了计算. 结果表明: 这种方法在原子激发态的精确计算中, 由于采用的波函数结构简单, 因而应用方便. 计算量

* 国家自然科学基金资助的课题.

大为减少,而且具有较大的通用性,计算精度也与 CI 及 $1/Z$ 展开等方法接近.

二、二体电子关联变分法

二体电子关联变分方法的详细理论和推导可参见文献 [10, 11]. 在此仅对应用于激发态计算时的特点作一简单介绍.

电子关联变分方法的原子激发态精确波函数取为

$$\Psi = Q\Phi_0(LS). \quad (1)$$

其中 $\Phi_0(LS)$ 为所求原子激发态的零级近似波函数. 对于一般激发态而言, $\Phi_0(LS)$ 由激发电子组态的单电子自旋轨道构成的行列式波函数耦合得到. L, S 为电子的总轨道与自旋角动量. Q 为对交换电子坐标对称的关联算符,且可按一体,二体,……, N 体关联函数展开.

$$Q = C_0 + \sum_i f_1(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2!} \sum_{i \neq j} f_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \frac{1}{3!} \sum_{i \neq j \neq k} f_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \quad (2)$$

当 $\Phi_0(LS)$ 选为 HF 波函数时,如果只考虑二体关联,则关联算符可以简化为

$$Q \approx C_0 + \frac{1}{2!} \sum_{i \neq j} f_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (3)$$

不失一般性,二体关联函数 $f_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ 可展开为可分离的函数形式.

$$f_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta} u_\alpha(\mathbf{r}_i) u_\beta(\mathbf{r}_j). \quad (4)$$

其中 $C_{\alpha\beta}$ 为双线性参数, u_α, u_β 的具体选取在下节讨论. 若定义 $C_A = C_{\alpha\beta}$; $A = \{\alpha, \beta\}$, 则有

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{AA'} C_A C_{A'} H_{AA'}, \quad (5a)$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{AA'} C_A C_{A'} N_{AA'}. \quad (5b)$$

其中的 C_A 已经包括了 (3) 式中的 C_0 项. $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$ 的变分导致标准的本征方程为

$$\sum_{A'} C_{A'} (H_{AA'} - E N_{AA'}) = 0. \quad (6)$$

解此方程,即可求得原子体系的总能量. 在求能量本征值的过程中,也就同时求得了系数 $\{C_A\}$, 由此可以获得关联波函数,进而可以进行其它物理量的计算. 需要指出的是,应用变分原理给出能量上限的结论,对于原子的激发态计算,只有当该激发态的波函数与其下各个原子态的精确波函数相互正交才能严格成立. 由于实际所能获得的其下各个态的波函数都不是严格的精确解,因此,相互正交的要求只需近似地满足. 考虑到 $\Phi_0(LS)$ 是激发态精确解的一个很好的近似,我们由实现各个激发态零级近似波函数 $\Phi_0(LS)$ 的严格正交,来保证所求激发态精确波函数的相互近似正交要求. 后续的计算表明这种考虑是可行的.

三、数值计算

二体电子关联变分用于 He, Be, B 原子激发态的具体计算可分为两步进行, 即零级波函数 $\Phi_0(LS)$ 的计算和将 $\Phi_0(LS)$ 作用于关联算符后的关联变分计算.

1. 零级波函数 $\Phi_0(LS)$ 的确定

激发态零级波函数 $\Phi_0(LS)$ 的确定是整个关联变分计算的起点, $\Phi_0(LS)$ 选择的优劣对整个计算的最终结果有着直接的影响. 我们把 $\Phi_0(LS)$ 取为某种形式的解析函数, 并且使 Φ_0 给出最接近 HF 方法的结果.

对 He 原子 $(1s)(nl)^4^3L$, Be 原子 $(1s)^2(2s)(nl)^3L$ 和 B 原子 $(1s)^2(2s)^2(nl)^2L$ 激发态, 所取得零级波函数的形式分别为

$$\begin{aligned}\Phi_0((1s)(nl)^4L) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \det | \phi_{1s}\alpha, \phi_{nl}\beta | - \det | \phi_{1s}\beta, \phi_{nl}\alpha | \}, \\ \Phi_0((1s)(nl)^3L) &= \det | \phi_{1s}\alpha, \phi_{nl}\alpha |, \\ \Phi_0((1s)^2(2s)(nl)^3L) &= \det | \phi_{1s}\alpha, \phi_{1s}\beta, \phi_{2s}\alpha, \phi_{nl}\alpha |, \\ \Phi_0((1s)^2(2s)^2(nl)^2L) &= \det | \phi_{1s}\alpha, \phi_{1s}\beta, \phi_{2s}\alpha, \phi_{2s}\beta, \phi_{nl}\alpha |.\end{aligned}\quad (7)$$

(7)式右边各项为单电子自旋轨道构成的行列式函数, 其中 α, β 分别相应于自旋磁量子数为 $+1$ 和 -1 的本征态. 单电子轨道 $\phi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(Q, \phi)$ 的径向部分取为 Slater 轨道展开的解析形式.

$$R_{nl}(r) = \sum_{M,N} A(nl, M, N) e^{-\mu(M)r} r^{N-1}, \quad (8)$$

并要求满足下面的正交归一化条件:

$$\langle R_{n'l'} | R_{nl} \rangle = \delta_{nn'}. \quad (9)$$

由(7)和(9)式可以看出: 同一光谱项中不同激发态的零级波函数 $\Phi_0(LS)$ 间是彼此严格正交的. 计算中对于一个具有相同对称性的激发态系列, 由低态向高态进行. 在较高激发态的计算中, 没有占据电子的空轨道保持固定, 仅需调节占据电子的轨道参数, 并使该轨道与空轨道保持正交. 同时在轨道的选择上兼顾考虑了易于处理和保证一定的精度. 对 He, Be, B 原子的全部计算均采用了下面的简单形式的轨道.

$$\begin{aligned}s \text{ 电子: } R_{1s}(r) &= A(1s, 1, 1) e^{-\mu_s(1)r}, \\ R_{2s}(r) &= A(2s, 1, 1) e^{-\mu_s(1)r} + A(2s, 2, 1) e^{-\mu_s(2)r},\end{aligned}\quad (10)$$

$$R_{3s}(r) = \sum_{N=1}^3 A(3s, 3, N) e^{-\mu_s(3)r} r^{N-1},$$

$$\begin{aligned}p \text{ 电子: } R_{2p}(r) &= A(2p, 1, 2) e^{-\mu_p(1)r}, \\ R_{3p}(r) &= \sum_{N=2}^3 A(3p, 2, N) e^{-\mu_p(2)r} r^{N-1},\end{aligned}\quad (11)$$

$$R_{4p}(r) = \sum_{N=2}^4 A(3p, 3, N) e^{-\mu_p(3)r} r^{N-1}.$$

$$d \text{ 电子: } R_{3d}(r) = A(3d, 1, 3) e^{-\mu_d(1)r} r^2,$$

$$R_{4d}(r) = \sum_{N=3}^4 A(4d, 2, N) e^{-\mu_d(2)r} r^{N-1}. \quad (12)$$

由于上述简单轨道的采用,全部系数 $\{A(nl, M, N)\}$ 由(9)式完全确定,仅指数因子 $\{\mu_l(M)\}$ 为可调参数,在无关联计算中,使 $E_0 = \langle \Phi_0(LS) | \hat{H} \Phi_0(LS) \rangle$ 取极小值的一组非线性参数 $\{\mu_l(M)\}$ 可作为下一步关联变分计算优化过程的初值.

2. 关联变分计算

对 He, Be, B 三个原子的不同激发态,二体关联函数均取下面同一的简单解析形式:

$$f_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \sum_{NN'L} C_{NN'L}^L \exp[-\mu(r_i + r_j)] r_i^{N+L} r_j^{N'+L} \sum_M Y_{LM}(\hat{r}_i) Y_{LM}^*(\hat{r}_j). \quad (13)$$

其中 N, N', L 为关联函数的展开幂次, Y_{LM} 是反映角向关联的球谐函数, $C_{NN'L}^L$ 与 C_A 对应,由方程(6)的求解给出. 指数参数 μ 由对能量本征值求极小值确定.

由于 Φ_0 是原子激发态的一个很好的近似,因此关联变分计算中可保持 Φ_0 固定,仅对关联函数中的指数参数 μ 优化. 但是计算中发现,关联变分优化过程中允许 $\Phi_0(LS)$ 中的参数 $\{\mu_l(M)\}$ 与关联函数中的参数 μ 同为可调,计算结果更佳. 这表明引入关联后,会对电子轨道引起修正,波函数作为一个整体更为接近体系的严格解. 当 $\Phi_0(LS)$ 中的参数 $\{\mu_l(M)\}$ 改变时,会使 $\Phi_0(LS)$ 之间的正交性受到破坏. 但是计算表明: 在一般情况下 $\{\mu_l(M)\}$ 的稍许改变对 $\Phi_0(LS)$ 之间的正交性影响很小. 仅对个别较高的激发态, Φ_0 中的参数释放会使 Φ_0 与其下各态零级波函数正交性变差,出现所谓“能量塌陷”的情形,这时 $\Phi_0(LS)$ 中的参数就必须完全固定,才能得到正确的结果. 例如本文 He 原子的 4^3P 态就属这种情形.

关联变分参数的优化过程是很费计算机时的,为了节省机时,在本文的计算中先在(13)式中取 $N=1, L=1$ 进行优化,对于 $N>1, L>1$ 时的计算均采用 $N=1, L=1$ 时的最优参数. 这样做的依据是: 当 N, L 较大时,能量 E 对参数的依赖关系变弱,参数的微小改变对最终结果影响甚微.

四、结果与讨论

对 He, Be, B 原子及部分等电子系列激发态的计算结果由表 1 至表 6 给出¹⁾. 为了比较,表中同时列出了 CI 和 $1/Z$ 展开等方法的计算结果.

由表 2 至表 6 所计算的结果可以看出,二体电子关联变分计算具有较高的精度. 在表 2 中列出了 He 原子的 12 个激发态计算结果,其中 Accad^[15] 等人采用 Pekeris 型关联波函数的精确计算,对 2^3S 态波函数展开项高达 1076 项,其余各态均用了 560 项. CI 方法 I 和 CI 方法 II 的结果分别由 Weiss^[15] 和 Green^[4] 作出. 前者的计算采用了 52—54 个组态波函数,后者采用了 50 个以上的组态波函数. 本文的计算是在关联函数展开到 $N=3, L=2$ 相应于 31 个展开项的情况下作出的. 比较可见,本文结果与 Accad 等人的精确计算结果之差在 $5 \times (10^{-4} - 10^{-5})$ a. u. 以内. 与 Weiss 和 Green 的两种不同组

1) 限于篇幅,波函数参数值未在表中列出.

表 1 He 原子 $(1s)(2s)^3S$ 态能量的关联计算

N/L	0	1	2
0	-2.173819	-2.174425	-2.174455
1	-2.174156	-2.175028	-2.175070
2	-2.174232	-2.175132	-2.175176
3	-2.174256	-2.175161	-2.175207

表 2 He 原子激发态能量计算结果的比较 ($-E$ 为原子单位)

原子态	HF 方法 ^[16]	CI 方法(一) ^[17]	CI 方法(二) ^[17]	Accad ^[17]	本文计算	实验值 ^[18]
2 ³ S	2.174250	2.17523	2.175214	2.175229	2.175207	2.17526
2 ¹ P	2.122464	2.12384	2.123782	2.123843	2.123583	2.12387
2 ³ P	2.131434	2.13316	2.133128	2.133164	2.132871	2.13320
3 ³ S	2.068480	2.06869	2.068683	2.068689	2.068710	2.06872
3 ¹ P	2.054740	2.05513	2.055125	2.055146	2.055130	2.05517
3 ³ P	2.057590	2.05807	2.058068	2.058081	2.057966	2.05811
3 ¹ D	2.05555	2.05562	2.055615	—	2.055612	2.05565
3 ³ D	2.05557	2.05564	2.055630	—	2.055632	2.05566
4 ¹ P	2.030890	2.03095	2.031059	2.031070	2.031047	2.03110
4 ³ P	2.032080	2.03220	2.032317	2.032324	2.032314	2.03235
4 ¹ D	2.031240	—	2.031277	—	2.031275	2.03131
4 ³ D	2.031260	—	2.031286	—	2.031287	2.03132

注: 对 He 原子, 在关联能修正的计算中, 将 Accad 等人的计算结果取作精确非相对论能量。

表 3 类 He 原子激发态 $(1s)(2s)^3S$ 态能量计算结果的比较

Z	1/Z 展开 ^[9]	CI 方法 ^[17]	Accad ^[17]	本文计算	实验值 ^[18]
2	-2.173988	-2.17523	-2.175229	-2.175207	-2.17526
3	-5.110247	-5.11073	-5.110677	-5.110686	-5.11109
4	-9.296912	-9.29717	-9.297891	-9.297112	-9.29838
5	-14.733740	-14.73390	-14.736515	-14.73383	-14.7373
6	-21.420649	-21.42076	-21.427117	-21.42068	-21.4287
7	-29.357604	-29.35768	-29.370298	-29.35761	-29.3725
8	-38.544589	-38.54464	-38.567316	-38.54457	-38.5736
9	-48.981592	-48.98164	-49.019064	-48.981510	-49.0302
10	-60.668609	-60.66865	-60.726645	-60.668591	-60.7659

态波函数的 CI 方法的结果十分接近。表 3 给出了 He 原子等电子系列 2³S 态的能量关联计算, 整个系列的计算值与远为复杂的 CI 方法及 1/Z 微扰展开方法的结果符合得很好。

Be 原子的 7 个激发态及 3³D 态的等电子系列的计算结果分别列于表 4 和表 5。由于 Hibbert^[8], Glass^[9] 等人所用 CI 方法的计算没有考虑内壳电子的关联, 因而其计算结果只较 HF 方法略有改进。本文的计算对 Be 原子激发态的关联修正是十分显著的。计算值与实验值之差在 0.015a. u. 左右, 关联能修正达 75% 以上。Be 原子 3³D 态及其等电子系列的关联能修正在 64—79% 以内。由表 5 可见, Be 原子等电子系列激发态的能量计

表 4 Be 原子激发态能量计算结果的比较

原子态	HF 方法 ^[17]	CI 方法 ^[18]	本文计算	精确非相对论能量*
2 ³ P	-14.51132	-14.51840	-14.55308	-14.56630
3 ³ S	-14.37712	-14.38230	-14.41809	-14.42914
3 ³ P	-14.34883	-14.35100	-14.38669	-14.39857
3 ³ D	-14.33416	-14.33690	-14.37360	-14.38370
4 ³ P	—	—	-14.35246	-14.36595
4 ³ D	—	—	-14.34492	-14.35687
4 ³ F	—	—	-14.34340	-14.35551

* 精确非相对论能量由能量的实验值 E_{exp} 减去能量的相对论效应修正值 ΔE_{rel} 得出。实验值取自文献[18]。相对论效应修正值由 Clementi 的计算给出。对 Be 原子基态, $\Delta E_{\text{rel}} = -0.0022 \text{ a.u.}$ 。

表 5 类 Be 原子激发态 $(1s)^2(2s)(3d)^3D$ 态能量计算结果的比较

Z	HF 方法 ^[17]	CI 方法(一) ^[17]	CI 方法(二) ^[18]	本文计算	精确非相对论能量*
4	-14.33416	—	-14.33690	-14.37360	-14.38370
5	—	—	-23.61361	-23.64467	-23.65243
6	-35.24460	-35.2549	-35.25480	-35.28384	-35.30131
7	-49.24659	-49.2591	-49.25910	-49.28309	-49.30345

* 计算中,实验值 E_{exp} 由文献[18]能级表算出,类 Be 原子的相对论效应修正值由 Clementi 的计算给出,分别为 Be: $\Delta E_{\text{rel}} = -0.002 \text{ a.u.}$; B⁺: $\Delta E_{\text{rel}} = -0.006165 \text{ a.u.}$; C²⁺: $\Delta E_{\text{rel}} = -0.014078 \text{ a.u.}$; N³⁺: $\Delta E_{\text{rel}} = 0.027975 \text{ a.u.}$ 。

表 6 B 原子激发态能量计算结果的比较

原子态	HF 方法 ^[17]	CI 方法 ^[18]	本文计算	精确非相对论能量*
3 ³ S	-24.35960	-24.41570	-24.42103	-24.46888
3 ³ P	-24.31626	-24.37700	-24.38379	-24.42981
3 ³ D	-24.29376	-24.34950	-24.35790	-24.40177
4 ² P	-24.27761	—	-24.34275	-24.38802
4 ² D	-24.26953	—	-24.33144	-24.37797
4 ² F	—	—	-24.33479	-24.37779

* 计算中,实验值与相对论效应修正值的出处与上表相同。 $\Delta E_{\text{rel}} = -0.00603 \text{ a.u.}$ 。

算结果随 Z 的增加逐渐变差,其原因在于随 Z 的增大核对核外电子的吸引增强,核外电子更趋于集结在核的附近。因此二体关联变分方法中略去了的多体关联效应相应地增大。

表 6 中给出了 B 原子 6 个激发态的计算结果。本文的结果是在关联函数展开到 $N = 3, L = 2$ 相应于 31 个展开项下作出的。尽管如此,其计算精度仍超过或接近 Weiss 采用 35 个组态函数的 CI 方法的计算结果,关联能修正接近 60%。

在我们的计算中,由于采用了同一形式的关联函数 $f_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$, 使计算程序具有较大的通用性,仅需对 $\Phi_0(LS)$ 中少数几个轨道参数稍加调整,就可用于不同原子和不同激发态的计算,且均可给出与 CI 方法相近精度的结果。此外,最终的结果对构成 $\Phi_0(LS)$ 的轨道选择要求也不苛刻。由简单的轨道构成的 $\Phi_0(LS)$ 作为计算的起点,关联计算仍能给出较好的结果。值得注意的是,计算结果与关联函数 $f_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ 的展开项的选择密切

相关, 仅当展开项中同时包含径向和角向修正函数时, 才能给出最佳的关联修正计算结果. 这种重要的特征由表 1 可以看出: 在 $N=2, L=0$ 和 $N=1, L=1$ 两种情况下, 关联函数的展开均为 7 项, 前者的关联能修正非常微弱, 后者迅速地增加到 80%, 已获得关联能的绝大部分. 其原因是, 当 $L=0$ 时, 未引入角向关联, 波函数近似地保持着中心场的特征, 因而关联计算不会比 HF 方法有较大的改善. 当 $L>0$ 时, 引入了角向关联, 突破了中心场的限制, 在一定程度上反映了真实的关联效应, 因而关联修正显著. 同时由表 1 可见: 当 $N=3, L=2$ 关联函数包括 31 个展开项时, 能量计算值已达 $-2.175207a.u.$, 关联能修正达 97.8%. 表明二体关联变分计算随展开项的增加而迅速收敛.

作者对 Wilets 教授和张承修教授的指导以及蒋天新的协助表示感谢.

- [1] R. Tousey, *Quant. J. R. Astron. Soc.*, **5**(1964), 123.
- [2] K. Bockasten, R. Hallin, K. B. Johansson and P. Tsui, *Phys. Rev. Lett.*, **8**(1964), 181.
- [3] D. E. Blacwell, *Quant. J. R. Astron. Soc.*, **16**(1975), 361.
- [4] L. C. Green, E. K. Kolohin and N. C. Johnson, *Phys. Rev.*, **A139**(1965), 373.
- [5] A. W. Weiss, *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **A71**(1967), 163.
- [6] A. W. Weiss, *Phys. Rev.*, **188**(1969), 119.
- [7] R. Glass, *J. Phys. B*, **12**(1979), 1633.
- [8] A. Hibbert, *J. Phys. B*, **9**(1976), 2805.
- [9] R. E. Knight and C. W. Scherr, *Rev. Mod. Phys.*, **35**(1963), 431.
- [10] L. Wilets, E. M. Henley and A. M. Martensson, *J. Phys. B*, **13**(1980), 2335.
- [11] Li Baiwen, R. Goldflam, E. Henley and L. Wilets, *J. Phys. B*, **17**(1984), 1445.
- [12] 李白文、李名生, 物理学报, **35**(1986), 1055.
- [13] 李名生、李白文, 原子与分子物理学报, **3**(1986), 89.
- [14] Li Baiwen, 10th International Conference on Atomic Physics, (Tokyo, Japan, 1986).
- [15] Y. Accad, C. L. Pekeris and B. Schiff, *Phys. Rev.*, **183**(1971), 78.
- [16] E. R. Davison, *J. Chem. Phys.*, **42**(1965), 4199.
- [17] H. Pfenning, R. Steele and E. Treffitz, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, **5**(1965), 335.
- [18] C. E. Moore, Atomic Energy Levels Vol. I (NBS Washington) (1971).

TWO-BODY CORRELATION FOR THE EXCITED STATES OF THE ATOMS

FAN YONG-CHANG LI MING-SHENG LI BAI-WEN

(Wuhan Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The variational approach to two-body correlations in atoms proposed by Wilets et al. and developed by present authors is applied to treat the correlations of excited states of the atoms. The $(1s)(nl)^{1,3}L$ excited states of helium isoelectronic sequence, the $(1s)^2(2s)(nl)^2L$ states of beryllium isoelectronic sequence and the $(1s)^2(2s)^2(nl)^2L$ states of boron have been calculated.

The results show that these correlation wave functions have simple structure and are feasible in calculation application. The accuracy of our method is very close to those of more complicated CI and $1/Z$ perturbation expansion methods.