第 22 卷 第 1 期　　物 理 学 报　　Vol. 22, No. 1
1966 年 1 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　Jan., 1966

f^4—f^7 的波函数*

譚維翰　畢无忌　支婷婷　聶勛全　許炳活
崔承甲　趙振洲　李荣華　唐帮福　房貴春

提　　要

本文用算子 L^+, S^+, Q, R 求得了 f^{4-7} 的波函数．并讨论了通过表象变换计算库仑能、自旋轨道作用和晶场，以及使希土离子能量矩阵对角化的方案．

一、引　　言

复杂原子光谱理论的发展，大致有两个阶段．Condon 和 Shortley 的经典著作[1] 很好的总结了第一阶段，第二阶段则以 Racah 的工作为代表[2—5]．复杂原子光谱及晶体光谱的核心问题之一，是如何表示多电子体系的波函数，以及如何进一步计算库仑能、自旋轨道作用、晶场矩阵元．

最初，多电子体系的波函数是直接通过 Slater 行列式的线性组合来表示[6]．自旋和轨道角动量及其投影与能量算符(不包括自旋作用)可对易，因此很自然的采用"LS"表象来表述波函数．求波函数的方法很多[1,6]，主要有下降算子法、正交法、投影算子法．在求波函数及矩阵元时，引进了"Wigner 系数"，又得到了带有普遍意义的可分离变数求矩阵元的结果．例如:

$$\langle \alpha jm | T | \alpha' j+1\ m \rangle = (\alpha\, j \vdots T \vdots \alpha' j+1) \sqrt{(j+1)^2 - m^2}\,\mathbf{k},$$

前面因子只与量子数 $(\alpha j,\ \alpha' j+1)$ 有关，后面因子与量子数 $(j,\ m)$ 有关．

这些结果后来被 Racah 发展为张量算子理论，并引进了"约化矩阵"与"Racah"系数等表示张量及其标积的矩阵元，这些是第一阶段结果的重要发展．但最关键的一步还是 Racah 引进了母系系数，将 l^n 的波函数用 l^{n-1} 与 l 的波函数来表示，并与 Condon-Shortley 的计算体系很明显的区别开来．Racah 对 f^n 能谱的分类是用群论方法解决的，他引进了算子 Q 与 R，并定义了子群 $O^+(2l+1)$ 与 G_2 $(Su(2l+1) \supset O^+(2l+1) \supset G_2 \supset O^+(3))$．除少数特例外，基本上解决了分类问题．在极大多数情况下，一组量子数$(Q,\ R,\ L,\ M_L,\ S,\ M_S)$ 对应于一个状态，只有少数情形，一组量子数对应两个状态．Racah 的工作影响很大，后来 Judd, Runciman, Wybourne 等人所做的大量工作[7—17]都是沿着 Racah 方向进行的．

我们认为 Condon-Shortley 的计算体系，特别是在"LS"表象中的波函数用 Slater 行列式的线性组合来表示，并不比 Racah 母系系数法更复杂[6]．关键只在如何求出"LS"表象的波函数．用正交法或投影算子法是太困难了．但是如果用上升算子 L^+, S^+ 并同时考

* 1964 年 12 月 4 日收到．

虑 Q, R 算子，则可求得一个包含多变数的多元一次联立方程组．变数的总数很多，但每一方程中所包含的个数不多，因此解起来并不过分困难，当然工作量还是很大的．在这基础上进一步计算各种矩阵元是不困难的，只要采取适当的表象变换就可以了．本文在叙述了波函数的计算方法与结果后，便讨论了应用表象变换计算各种矩阵元以及受晶场作用的希土离子能量矩阵对角化的方法．

二、波函数的求法与結果

求波函数是用 L^+, S^+, Q, R 四个算子作用于波函数的方法，并且只求其中 M_L,M_S 为最大的波函数（因为 M_L, M_S 较小的波函数可用下降算子 L^-, S^- 作用在 M_L, M_S 最大的波函数上求得）．设 M_L, M_S 最大的波函数为

$$|W, U, L, L, S, S\rangle = a_1A_1 + a_2A_2 + \cdots + a_NA_N, \tag{1}$$

其中 $a_1, a_2, \cdots, a_N$ 为待定系数，$A_1, A_2, \cdots, A_N$ 为 Slater 行列式函数．求波函数就归结为求系数 $a_1, a_2, \cdots, a_N$，建立这些系数间的方程是依据

$$L^+|W, U, L, L, S, S\rangle = 0, \tag{2}$$

$$S^+|W, U, L, L, S, S\rangle = 0, \tag{3}$$

$$Q|W, U, L, L, S, S\rangle = Q_0(W)|W, U, L, L, S, S\rangle, \tag{4}$$

$$R|W, U, L, L, S, S\rangle = R_0(W, U)|W, U, L, L, S, S\rangle, \tag{5}$$

其中 Q_0 与 R_0 可以按 Racah[5]的公式计算（见附表 1）．在具体建立方程的计算中，需要知道上述四个算子对 Slater 行列式函数的作用．L^+, S^+ 作用在单个 f 电子上为

$$L^+|m_lm_s\rangle = \hbar\sqrt{(3 - m_l)(3 + m_l + 1)}|m_l + 1\ m_s\rangle, \tag{6}$$

$$S^+|m_lm_s\rangle = \hbar\sqrt{(\tfrac{1}{2} - m_s)(\tfrac{1}{2} + m_s + 1)}|m_l\ m_s + 1\rangle. \tag{7}$$

Q, R 作用在一对 f 电子上为

$$Q|m_l^1m_s^1, m_l^2m_s^2\rangle = \sum\langle\overline{m}_l^1\overline{m}_s^1, \overline{m}_l^2\overline{m}_s^2|Q|m_l^1m_s^1, m_l^2m_s^2\rangle|\overline{m}_l^1\overline{m}_s^1, \overline{m}_l^2\overline{m}_s^2\rangle, \tag{8}$$

$$R|m_l^1m_s^1, m_l^2m_s^2\rangle = \sum\langle\overline{m}_l^1\overline{m}_s^1, \overline{m}_l^2\overline{m}_s^2|R|m_l^1m_s^1, m_l^2m_s^2\rangle|\overline{m}_l^1\overline{m}_s^1, \overline{m}_l^2\overline{m}_s^2\rangle. \tag{9}$$

Q, R 的矩阵元可以通过 Q, R 的定义及 $|f^2\,{}^1S\rangle$, $|f^2\,{}^3F\rangle$ 求得．Racah 对 Q, R 的定义为

$$\langle f^2LM|Q|f^2LM\rangle = (2l + 1)\delta(L, 0), \tag{10}$$

$$\langle f^2LM|R|f^2LM\rangle = 6\delta(L, 3). \tag{11}$$

由此定义可得

$$\begin{aligned}
&\langle\overline{m}_l^1\overline{m}_s^1, \overline{m}_l^2\overline{m}_s^2|Q|m_l^1m_s^1, m_l^2m_s^2\rangle \\
&= \sum_{LM}\langle\overline{m}_l^1\overline{m}_s^1, \overline{m}_l^2\overline{m}_s^2|f^2LM\rangle\langle f^2LM|Q|f^2LM\rangle\langle f^2LM|m_l^1m_s^1, m_l^2m_s^2\rangle \\
&= \sum_{LM}\langle\overline{m}_l^1\overline{m}_s^1, \overline{m}_l^2\overline{m}_s^2|f^2LM\rangle(2l + 1)\delta(L, 0)\langle f^2LM|m_l^1m_s^1, m_l^2m_s^2\rangle \\
&= 7\langle\overline{m}_l^1\overline{m}_s^1, \overline{m}_l^2\overline{m}_s^2|f^2\,{}^1S\rangle\langle f^2\,{}^1S|m_l^1m_s^1, m_l^2m_s^2\rangle,
\end{aligned} \tag{12}$$

其中 $\langle\overline{m}_l^1\overline{m}_s^1, \overline{m}_l^2\overline{m}_s^2|f^2\,{}^1S\rangle$, $\langle f^2\,{}^1S|m_l^1m_s^1, m_l^2m_s^2\rangle$ 分别表示波函数 $|f^2\,{}^1S\rangle$ 中 Slater 行列式函数 $|\overline{m}_l^1\overline{m}_s^1, \overline{m}_l^2\overline{m}_s^2\rangle$, $|m_l^1m_s^1, m_l^2m_s^2\rangle$ 的系数．由式(12)求出 Q 的矩阵元，列于附表 2．同样由 R 的定义和 $|f^2\,{}^3F\rangle$ 求出 R 的矩阵元，也列于附表 2.

用 L^+ 算子作用于式(1)，根据(2)比较 Slater 行列式函数的系数，可得如下方程组：

$$\sum_i \alpha_i^j a_i = 0 \quad j = 1, 2, 3 \cdots \tag{13}$$

其中系数 α_i^j 根据式(6)求得．例如求 f^2 的波函数 $|^1G_{(20)}^{(200)}40\rangle$，这时所涉及的 Slater 行列式函数有

$$M_L = 4, \quad M_S = 0 : {}^1G_1(3^+1^-), \quad {}^1G_2(2^+2^-), \quad {}^1G_3(1^+3^-).$$
$$M_L = 5, \quad M_S = 0 : {}^1H_1(3^+2^-), \quad {}^1H_2(2^+3^-).$$

设

$$|^1G_{(20)}^{(200)}40\rangle = g_1{}^1G_1 + g_2{}^1G_2 + g_3{}^1G_3, \tag{14}$$

用 L^+ 作用在式(14)二端得

$$\begin{aligned} &L^+(g_1{}^1G_1 + g_2{}^1G_2 + g_3{}^1G_3) \\ &= \hbar(\sqrt{10}\, g_1 + \sqrt{6}\, g_2){}^1H_1 + \hbar(\sqrt{6}\, g_2 + \sqrt{10}\, g_3){}^1H_2 = 0. \end{aligned}$$

于是

$$\left.\begin{aligned} \sqrt{10}\, g_1 + \sqrt{6}\, g_2 = 0, \\ \sqrt{6}\, g_2 + \sqrt{10}\, g_3 = 0. \end{aligned}\right\} \tag{15}$$

上式我们称之为"L^+ 方程"亦即式(13)．加上归一化条件

$$g_1^2 + g_2^2 + g_3^2 = 1, \tag{16}$$

即可求出 $g_1 = \sqrt{\frac{3}{11}},\ g_2 = -\sqrt{\frac{5}{11}},\ g_3 = \sqrt{\frac{3}{11}}$.

在这个简单的例子中，只用"L^+ 方程"和归一化条件就求出了波函数．在一般情况下，我们还必须考虑"S^+ 方程"以及"Q 方程"和"R 方程"，它们分别依据式(3)，(4)，(5)并利用式(7)和附表 1 与附表 2 求得．L^+, S^+, Q, R 方程组，一般给出 $(N-1)$ 个关于系数 $a_1, a_2, \cdots, a_N$ 的独立方程，加上归一化条件，就可以确定 $a_1, a_2, \cdots, a_N$，从而由式(1)得到欲求的波函数．

有少数的情况，两个波函数具有相同的 Q, R, L, M_L, S, M_S，这时 L^+, S^+, Q, R 方程组只给出 $(N-2)$ 个独立方程，加上归一化条件，共有 $(N-1)$ 个方程．我们任意给定 $a_1, a_2, \cdots, a_N$ 中的一个系数，解 $(N-1)$ 个方程，求得波函数 a，然后再作出与 a 正交的波函数 b．

求得的波函数都是用正交法加以验证的，即

$$\langle W, U, L, L, S, S | W', U', L', L', S', S' \rangle = \delta_{LL'}\delta_{SS'}\delta_{WW'}\delta_{UU'}. \tag{17}$$

我们用这个方法求得了 f^2, f^3[22] 和 f^4—f^7 的全部波函数．限于篇幅，在这里只列出 f^4 的波函数(见附表 3 和附表 4)．

三、表象变换与受晶場作用的希土离子能級的計算問題

计算库仑能、自旋轨道作用、晶场矩阵元时，在各自的本征表象中是方便的．亦即库仑能在"LS"表象中计算，自旋轨道作用在"LJ"表象中计算，晶场在"$L\Gamma$"表象中计算等．(不同 L 间有自旋轨道作用，不同 L 间也有晶场作用，但当库仑能比自旋轨道作用大很多，"LJ"可近似的认为是自旋轨道作用的本征表象，同样"$L\Gamma$"也可近似的认为是晶场的本征表象．)各表象间通过幺正变换联系起来．

在上述三种能量中，以库仑能为最強，故能级先按库仑能分裂．在"LS"表象中求库

仑能按如下方法进行是很方便的. 设 A 为某一个 $M\ = L_0$, $M_S = S_0$ 的 Slater 行列式函数,我们可以很容易将 A 用“LS”表象中的波函数展

$$A = a_0|L_0, L_0, S_0, S_0\rangle + \sum_{L,S} a_{LS}|L, L_0, S, S_0\rangle, \tag{18}$$

其中 a_0 为 $|L_0, L_0, S_0, S_0\rangle$ 中 A 的系数, a_{LS} 为 $|L, L_0, S, S_0\rangle$ 中 A 的系数, $L \geqslant L_0$, $S \geqslant S_0$(等号不同时成立). 由式(18)求库仑能

$$H_{L_0S_0} = \langle L_0, L_0, S_0, S_0|\sum \frac{e^2}{r_{ij}}|L_0, L_0, S_0, S_0\rangle = \frac{1}{a_0^2}\left[H_{AA} - \sum_{L,S} a_{LS}^2 H_{LS}\right], \tag{19}$$

当由高的 L, S 开始顺次计算时, 仅需在已有结果的基础上添加一项 H_{AA}, 就使计算简化了. 例如求 $H_{^2I} = \langle f^3\,{}^2I|\sum\frac{e^2}{r_{ij}}|f^3\,{}^2I\rangle$. 取 $M_L = 6$, $M_S = \frac{1}{2}$ 的一个 Slater 行列式函数 ${}^2I_3(3^+0^+3^-)$, 可以求得

$${}^2I_3 = \frac{1}{2}|{}^2L\rangle - \frac{3}{\sqrt{28}}|{}^2K\rangle + \sqrt{\frac{3}{7}}|{}^2I\rangle,$$

则

$$H_{^2I} = \frac{7}{3}\left[H_{^2I_3{}^2I_3} - \frac{1}{4}H_{^2L} - \frac{9}{28}H_{^2K}\right]. \tag{20}$$

已经求得

$$H_{^2L} = 3F_0 - 63F_4 - 18F_6,$$
$$H_{^2K} = 3F_0 - 40F_2 + F_4 + 38F_6,$$

又求得

$$H_{^2I_3{}^2I_3} = 3F_0 - 15F_2 - 18F_4 - 123F_6,$$

代入式(20)得

$$H_{^2I} = 3F_0 - 5F_2 - 6F_4 - 305F_6.$$

自旋轨道作用宜于在“LJ”表象给出, 但波函数是在“LS”表象中求得的, 故应将“LJ”表象转换到“LS”表象进行计算. 由“LS”表象到“LJ”表象的转换系数,即 Wigner 系数,可查表[18]求得.

对晶场的计算, 按 Wigner-Eckart 定理[19], 我们只需利用已经求得的波函数计算 Y_2^0, Y_4^0, Y_6^0 的约化矩阵就可以了.

关于受晶场作用的希土离子的能量矩阵的对角化问题. 我们认为对希土而言, 因自旋轨道作用很强 ($\delta_f \sim 800$—1000cm^{-1}), 而晶场作用很弱(如立方场 $D_q \sim 100\text{cm}^{-1}$), 能级首先是按“$LJ$”表象分裂的,加上晶场后, 又分裂成“$J\Gamma$”表象. 图 1 示出了 ${}^2F$ 能级经立方场和自旋轨道作用的分裂情况.

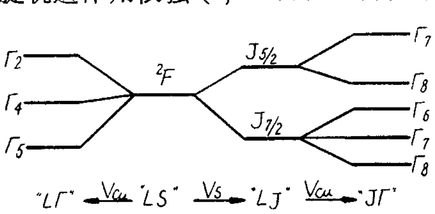

图 1

为利用“LS”表象中的波函数计算晶场矩阵元,应将“$J\Gamma$”表象表示为“$L\Gamma$”表象. 变换过程如下: 首先由“$J\Gamma$”表象变换到“LJ”表象[20,21],然后由“LJ”表象变换到“LS”表象, 最后由“LS”表象变换到“$L\Gamma$”表象[20], 从而求得从“$J\Gamma$”表象到“$L\Gamma$”表象的转换系数[22].

采用“$J\Gamma$”表象计算希土离子的能级分裂时, 不同 J 间的晶场作用是可以忽略的,但相同 J 不同 L, S 的状态间的相互作用是要考虑的. 作为一个例子, 我们曾计算了 CaF_2,

SrF_2 中掺 Nd^{3+} 的基态分裂[22]。

附　表　1

W, S, V 对应关系表[5]

W	S	V	S	V
(000)	0	0	7/2	7
(100)	1/2	1	3	6
(110)	1	2	5/2	5
(200)	0	2	5/2	7
(111)	3/2	3	2	4
(210)	1/2	3	2	6
(211)	1	4	3/2	5
(220)	0	4	3/2	7
(221)	1/2	5	1	6
(222)	0	6	1/2	7

Q_0 值表

V	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6	f^7
0	7		12		15	
1		6		10		12
2	0		5		8	
3		0		4		6
4			0		3	
5				0		2
6					0	
7						0

R_0 值表1)

U \ S	f^2		f^3		f^4			f^5			f^6				f^7			
	1	0	3/2	1/2	2	1	0	5/2	3/2	1/2	3	2	1	0	7/2	5/2	3/2	1/2
(00)	12	14	18	21	24	28	30	30	35	38	36	42	46	48	42	49	54	57
(10)	6	8	12	15	18	22	24	24	29	32	30	36	40	42	36	43	48	51
(11)	0	2	6	9	12	16	18	18	23	26	24	30	34	36	30	37	42	45
(20)		0	4	7	10	14	16	16	21	24	22	28	32	34	28	35	40	43
(21)				0	3	7	9	9	14	17	15	21	25	27	21	28	33	36
(30)					0	4	6	6	11	14	12	18	22	24	18	25	30	33
(22)							0	0	5	8	6	12	16	18	12	19	24	27
(31)									3	6	4	10	14	16	10	17	22	25
(40)										2	0	6	10	12	6	13	18	21

1) 表中所列 R_0 值是当 $Q_0=0$ 时的结果，当 $Q_0\neq 0$ 时，需再减掉 $2Q_0$。

附　表　2

Q 矩阵

	(3^+-3^-)	(2^+-2^-)	(1^+-1^-)	(0^+0^-)	(-1^+1^-)	(-2^+2^-)	(-3^+3^-)
(3^+-3^-)	1	−1	1	−1	1	−1	1
(2^+-2^-)	−1	1	−1	1	−1	1	−1
(1^+-1^-)	1	−1	1	−1	1	−1	1
(0^+0^-)	−1	1	−1	1	−1	1	−1
(-1^+1^-)	1	−1	1	−1	1	−1	1
(-2^+2^-)	−1	1	−1	1	−1	1	−1
(-3^+3^-)	1	−1	1	−1	1	−1	1

R 矩阵

$$\begin{array}{c|cc|} & (3^+0^+) & (2^+1^+) \\ \hline (3^+0^+) & 2 & -2\sqrt{2} \\ (2^+1^+) & -2\sqrt{2} & 4 \\ \hline \end{array} \qquad \begin{array}{c|cc|} & (3^+-1^+) & (2^+0^+) \\ \hline (3^+-1^+) & 4 & -2\sqrt{2} \\ (2^+0^+) & -2\sqrt{2} & 2 \\ \hline \end{array} \qquad \begin{array}{c|cc|} & (3^+-2^+) & (1^+0^+) \\ \hline (3^+-2^+) & 4 & -2\sqrt{2} \\ (1^+0^+) & -2\sqrt{2} & 2 \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{c|ccc|} & (3^+-3^+) & (2^+-2^+) & (1^+-1^+) \\ \hline (3^+-3^+) & 2 & 2 & -2 \\ (2^+-2^+) & 2 & 2 & -2 \\ (1^+-1^+) & -2 & -2 & 2 \\ \hline \end{array} \qquad \begin{array}{c|cccc|} & (3^+0^-) & (2^+1^-) & (1^+2^-) & (0^+3^-) \\ \hline (3^+0^-) & 1 & -\sqrt{2} & \sqrt{2} & -1 \\ (2^+1^-) & -\sqrt{2} & 2 & -2 & \sqrt{2} \\ (1^+2^-) & \sqrt{2} & -2 & 2 & -\sqrt{2} \\ (0^+3^-) & -1 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 1 \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{c|cccc|} & (3^+-1^-) & (2^+0^-) & (0^+2^-) & (-1^+3^-) \\ \hline (3^+-1^-) & 2 & -\sqrt{2} & \sqrt{2} & -2 \\ (2^+0^-) & -\sqrt{2} & 1 & -1 & \sqrt{2} \\ (0^+2^-) & \sqrt{2} & -1 & 1 & -\sqrt{2} \\ (-1^+3^-) & -2 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 2 \\ \hline \end{array} \qquad \begin{array}{c|cccc|} & (3^+-2^-) & (1^+0^-) & (0^+1^-) & (-2^+3^-) \\ \hline (3^+-2^-) & 2 & -\sqrt{2} & \sqrt{2} & -2 \\ (1^+0^-) & -\sqrt{2} & 1 & -1 & \sqrt{2} \\ (0^+1^-) & \sqrt{2} & -1 & 1 & -\sqrt{2} \\ (-2^+3^-) & -2 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 2 \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{c|cccccc|} & (3^+-3^-) & (2^+-2^-) & (1^+-1^-) & (-1^+1^-) & (-2^+2^-) & (-3^+3^-) \\ \hline (3^+-3^-) & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ (2^+-2^-) & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ (1^+-1^-) & -1 & -1 & & & 1 & 1 \\ (-1^+1^-) & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ (-2^+2^-) & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ (-3^+3^-) & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}$$

附表 3 f^4 的 Slater 行列式函数及 Y_2^0, Y_4^0, Y_6^0, V_s 矩阵元

(Y_2^0, Y_4^0, Y_6^0, V_s 的单位分别为: $\frac{1}{15}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}$, $\frac{1}{33}\sqrt{\frac{9}{4\pi}}$, $\frac{1}{85.8}\sqrt{\frac{13}{4\pi}}$, δ_f)

Slater 行列式函数	Y_2^0	Y_4^0	Y_6^0	V_s
$^5I_1$ $(3^+2^+1^+0^+)$	2	3	10	3
$^5H_1$ $(3^+2^+1^+-1^+)$	1	−2	−25	$\frac{5}{2}$
$^5G_1$ $(3^+2^+1^+-2^+)$	−2	−10	−4	2
$^5G_2$ $(3^+2^+0^+-1^+)$	2	3	10	2
$^5F_1$ $(3^+2^+1^+-3^+)$	−7	0	−11	$\frac{3}{2}$
$^5F_2$ $(3^+2^+0^+-2^+)$	−1	−5	31	$\frac{3}{2}$
$^5F_3$ $(3^+1^+0^+-1^+)$	5	11	−11	$\frac{3}{2}$
$^5D_1$ $(3^+2^+0^+-3^+)$	−6	5	24	1
$^5D_2$ $(3^+2^+-1^+-2^+)$	−2	−10	−4	1
$^5D_3$ $(3^+1^+0^+-2^+)$	2	3	10	1
$^5D_4$ $(2^+1^+0^+-1^+)$	10	1	−4	1
$^5P_1$ $(3^+2^+-1^+-3^+)$	−7	0	−11	$\frac{1}{2}$
$^5P_2$ $(3^+1^+0^+-3^+)$	−3	13	3	$\frac{1}{2}$

Slater 行列式函数	Y_2^0	Y_4^0	Y_6^0	V_s
$^5P_3$ $(3^+1^+-1^+-2^+)$	1	−2	−25	$\frac{1}{2}$
$^5P_4$ $(2^+1^+0^+-2^+)$	7	−7	17	$\frac{1}{2}$
$^5S_1$ $(3^+2^+-2^+-3^+)$	−10	−8	10	0
$^5S_2$ $(3^+1^+-1^+-3^+)$	−4	8	−32	0
$^5S_3$ $(2^+1^+0^+-3^+)$	2	3	10	0
$^5S_4$ $(3^+0^+-1^+-2^+)$	2	3	10	0
$^5S_5$ $(2^+1^+-1^+-2^+)$	6	−12	−18	0
$^3M_1$ $(3^+2^+1^+3^-)$	−7	0	−11	$\frac{3}{2}$
$^3L_1$ $(3^+2^+1^+2^-)$	−2	−10	−4	2
$^3L_2$ $(3^+2^+0^+3^-)$	−6	5	24	1
$^3K_1$ $(3^+2^+1^+1^-)$	1	−2	−25	$\frac{5}{2}$
$^3K_2$ $(3^+2^+0^+2^-)$	−1	−5	31	$\frac{3}{2}$
$^3K_3$ $(3^+2^+-1^+3^-)$	−7	0	−11	$\frac{1}{2}$

续

Slater 行列式函数	Y_2^0	Y_4^0	Y_6^0	V_s
$^3K_4(3^+1^+0^+3^-)$	-3	13	3	$\frac{1}{2}$
$^3I_1(3^+2^+1^+0^-)$	2	3	10	3
$^3I_2(3^+2^+0^+1^-)$	2	3	10	2
$^3I_3(3^+2^+-1^+2^-)$	-2	-10	-4	1
$^3I_4(3^+1^+0^+2^-)$	2	3	10	1
$^3I_5(3^+2^+-2^+3^-)$	-10	-8	10	0
$^3I_6(3^+1^+-1^+3^-)$	-4	8	-32	0
$^3I_7(2^+1^+0^+3^-)$	2	3	10	0
$^3H_1(3^+2^+1^+-1^-)$	1	-2	-25	$\frac{7}{2}$
$^3H_2(3^+2^+0^+0^-)$	3	8	45	$\frac{5}{2}$
$^3H_3(3^+2^+-1^+1^-)$	1	-2	-25	$\frac{3}{2}$
$^3H_4(3^+1^+0^+1^-)$	5	11	-11	$\frac{3}{2}$
$^3H_5(3^+2^+-2^+2^-)$	-5	-18	17	$\frac{1}{2}$
$^3H_6(3^+1^+-1^+2^-)$	1	-2	-25	$\frac{1}{2}$
$^3H_7(2^+1^+0^+2^-)$	7	-7	17	$\frac{1}{2}$
$^3H_8(3^+2^+-3^+3^-)$	-15	2	3	$-\frac{1}{2}$
$^3H_9(3^+1^+-2^+3^-)$	-7	0	-11	$-\frac{1}{2}$
$^3H_{10}(3^+0^+-1^+3^-)$	-3	13	3	$-\frac{1}{2}$
$^3H_{11}(2^+1^+-1^+3^-)$	1	-2	-25	$-\frac{1}{2}$
$^3G_1(3^+2^+1^+-2^-)$	-2	-10	-4	4
$^3G_2(3^+2^+0^+-1^-)$	2	3	10	3
$^3G_3(3^+2^+-1^+0^-)$	2	3	10	2
$^3G_4(3^+1^+0^+0^-)$	6	16	24	2
$^3G_5(3^+2^+-2^+1^-)$	-2	-10	-4	1
$^3G_6(3^+1^+-1^+1^-)$	4	6	-46	1
$^3G_7(2^+1^+0^+1^-)$	10	1	-4	1
$^3G_8(3^+2^+-3^+2^-)$	-10	-8	10	0
$^3G_9(3^+1^+-2^+2^-)$	1	-2	-25	0
$^3G_{10}(3^+0^+-1^+2^-)$	2	3	10	0
$^3G_{11}(2^+1^+-1^+2^-)$	6	-12	-18	0
$^3G_{12}(3^+1^+-3^+3^-)$	-12	10	-18	-1
$^3G_{13}(3^+0^+-2^+3^-)$	-1	-5	31	-1
$^3G_{14}(2^+1^+-2^+3^-)$	1	-2	-25	-1
$^3G_{15}(2^+0^+-1^+3^-)$	2	3	10	-1
$^3F_1(3^+2^+1^+-3^-)$	-7	0	-11	$\frac{9}{2}$
$^3F_2(3^+2^+0^+-2^-)$	-1	-5	31	$\frac{7}{2}$
$^3F_3(3^+2^+-1^+-1^-)$	1	-2	-25	$\frac{5}{2}$
$^3F_4(3^+1^+0^+-1^-)$	5	11	-11	$\frac{5}{2}$
$^3F_5(3^+2^+-2^+0^-)$	-1	-5	31	$\frac{3}{2}$
$^3F_6(3^+1^+-1^+0^-)$	5	11	-11	$\frac{3}{2}$
$^3F_7(2^+1^+0^+0^-)$	11	6	31	$\frac{3}{2}$
$^3F_8(3^+2^+-3^+1^-)$	-7	0	-11	$\frac{1}{2}$
$^3F_9(3^+1^+-2^+1^-)$	1	-2	-25	$\frac{1}{2}$
$^3F_{10}(3^+0^+-1^+1^-)$	5	11	-11	$\frac{1}{2}$
$^3F_{11}(2^+1^+-1^+1^-)$	9	-4	-39	$\frac{1}{2}$
$^3F_{12}(3^+1^+-3^+2^-)$	-7	0	-11	$-\frac{1}{2}$
$^3F_{13}(3^+0^+-2^+2^-)$	-1	-5	31	$-\frac{1}{2}$

Slater 行列式函数	Y_2^0	Y_4^0	Y_6^0	V_s
$^3F_{14}(2^+1^+-2^+2^-)$	3	-20	3	$-\frac{1}{2}$
$^3F_{15}(2^+0^+-1^+2^-)$	7	-7	17	$-\frac{1}{2}$
$^3F_{16}(3^+0^+-3^+3^-)$	-11	15	17	$-\frac{3}{2}$
$^3F_{17}(2^+1^+-3^+3^-)$	-7	0	-11	$-\frac{3}{2}$
$^3F_{18}(3^+-1^+-2^+3^-)$	-7	0	-11	$-\frac{3}{2}$
$^3F_{19}(2^+0^+-2^+3^-)$	-1	-5	31	$-\frac{3}{2}$
$^3F_{20}(1^+0^+-1^+3^-)$	5	11	-11	$-\frac{3}{2}$
$^3D_1(3^+2^+0^+-3^-)$	-6	5	24	4
$^3D_2(3^+2^+-1^+-2^-)$	-2	-10	-4	3
$^3D_3(3^+1^+0^+-2^-)$	2	3	10	3
$^3D_4(3^+2^+-2^+-1^-)$	-2	-10	-4	2
$^3D_5(3^+1^+-1^+-1^-)$	4	6	-46	2
$^3D_6(2^+1^+0^+-1^-)$	10	1	-4	2
$^3D_7(3^+2^+-3^+0^-)$	-6	5	24	1
$^3D_8(3^+1^+-2^+0^-)$	2	3	10	1
$^3D_9(3^+0^+-1^+0^-)$	6	16	24	1
$^3D_{10}(2^+1^+-1^+0^-)$	10	1	-4	1
$^3D_{11}(3^+1^+-3^+1^-)$	-4	8	-32	0
$^3D_{12}(3^+0^+-2^+1^-)$	2	3	10	0
$^3D_{13}(2^+1^+-2^+1^-)$	6	-12	-18	0
$^3D_{14}(2^+0^+-1^+1^-)$	10	1	-4	0
$^3D_{15}(3^+0^+-3^+2^-)$	-6	5	24	-1
$^3D_{16}(2^+1^+-3^+2^-)$	-2	-10	-4	-1
$^3D_{17}(3^+-1^+-2^+2^-)$	-2	-10	-4	-1
$^3D_{18}(2^+0^+-2^+2^-)$	4	-15	38	-1
$^3D_{19}(1^+0^+-1^+2^-)$	10	1	-4	-1
$^3D_{20}(3^+-1^+-3^+3^-)$	-12	10	-18	-2
$^3D_{21}(2^+0^+-3^+3^-)$	-6	5	24	-2
$^3D_{22}(2^+-1^+-2^+3^-)$	-2	-10	-4	-2
$^3D_{23}(1^+0^+-2^+3^-)$	2	3	10	-2
$^3P_1(3^+2^+-1^+-3^-)$	-7	0	-11	$\frac{7}{2}$
$^3P_2(3^+1^+0^+-3^-)$	-3	13	3	$\frac{7}{2}$
$^3P_3(3^+2^+-2^+-2^-)$	-5	-18	17	$\frac{5}{2}$
$^3P_4(3^+1^+-1^+-2^-)$	1	-2	-25	$\frac{5}{2}$
$^3P_5(2^+1^+0^+-2^-)$	7	-7	17	$\frac{5}{2}$
$^3P_6(3^+2^+-3^+-1^-)$	-7	0	-11	$\frac{3}{2}$
$^3P_7(3^+1^+-2^+-1^-)$	1	-2	-25	$\frac{3}{2}$
$^3P_8(3^+0^+-1^+-1^-)$	5	11	-11	$\frac{3}{2}$
$^3P_9(2^+1^+-1^+-1^-)$	9	-4	-39	$\frac{3}{2}$
$^3P_{10}(3^+1^+-3^+0^-)$	-3	13	3	$\frac{1}{2}$
$^3P_{11}(3^+0^+-2^+0^-)$	3	8	45	$\frac{1}{2}$
$^3P_{12}(2^+1^+-2^+0^-)$	7	-7	17	$\frac{1}{2}$
$^3P_{13}(2^+0^+-1^+0^-)$	11	6	31	$\frac{1}{2}$
$^3P_{14}(3^+0^+-3^+1^-)$	-3	13	3	$-\frac{1}{2}$
$^3P_{15}(2^+1^+-3^+1^-)$	1	-2	-25	$-\frac{1}{2}$
$^3P_{16}(3^+-1^+-2^+1^-)$	1	-2	-25	$-\frac{1}{2}$
$^3P_{17}(2^+0^+-2^+1^-)$	7	-7	17	$-\frac{1}{2}$

续

Slater行列式函数	Y_2^0	Y_4^0	Y_6^0	V_s	Slater行列式函数	Y_2^0	Y_4^0	Y_6^0	V_s
$^3P_{18}(1^+0^+-1^+1^-)$	13	9	−25	$-\frac{1}{2}$	$^1K_4\ (3^+1^+2^-1^-)$	1	−2	−25	$\frac{1}{2}$
$^3P_{19}(3^+-1^+-3^+2^-)$	−7	0	−11	$-\frac{3}{2}$	$^1K_5\ (3^+0^+3^-1^-)$	−3	13	3	$-\frac{1}{2}$
$^3P_{20}(2^+0^+-3^+2^-)$	−1	−5	31	$-\frac{3}{2}$	$^1K_6\ (2^+1^+3^-1^-)$	1	−2	−25	$-\frac{1}{2}$
$^3P_{21}(2^+-1^+-2^+2^-)$	3	−20	3	$-\frac{3}{2}$	$^1K_7\ (3^+-1^+3^-2^-)$	−7	0	−11	$-\frac{3}{2}$
$^3P_{22}(1^+0^+-2^+2^-)$	7	−7	17	$-\frac{3}{2}$	$^1K_8\ (2^+0^+3^-2^-)$	−1	−5	31	$-\frac{3}{2}$
$^3P_{23}(3^+-2^+-3^+3^-)$	−15	2	3	$-\frac{5}{2}$	$^1I_1\ (3^+2^+3^--2^-)$	−10	−8	10	2
$^3P_{24}(2^+-1^+-3^+3^-)$	−7	0	−11	$-\frac{5}{2}$	$^1I_2\ (3^+2^+2^--1^-)$	−2	−10	−4	2
$^3P_{25}(1^+0^+-3^+3^-)$	−3	13	3	$-\frac{5}{2}$	$^1I_3\ (3^+1^+3^--1^-)$	−4	8	−32	1
$^3P_{26}(1^+-1^+-2^+3^-)$	1	−2	−25	$-\frac{5}{2}$	$^1I_4\ (3^+2^+1^-0^-)$	2	3	10	2
$^3S_1\ (3^+2^+-2^+-3^-)$	−10	−8	10	3	$^1I_5\ (3^+1^+2^-0^-)$	2	3	10	1
$^3S_2\ (3^+1^+-1^+-3^-)$	−4	8	−32	3	$^1I_6\ (3^+0^+3^-0^-)$	−2	18	38	0
$^3S_3\ (2^+1^+0^+-3^-)$	2	3	10	3	$^1I_7\ (2^+1^+3^-0^-)$	2	3	10	0
$^3S_4\ (3^+2^+-3^+-2^-)$	−10	−8	10	2	$^1I_8\ (3^+0^+2^-1^-)$	2	3	10	0
$^3S_5\ (3^+1^+-2^+-2^-)$	−2	−10	−4	2	$^1I_9\ (2^+1^+2^-1^-)$	6	−12	−18	0
$^3S_6\ (3^+0^+-1^+-2^-)$	2	3	10	2	$^1I_{10}(3^+-1^+3^-1^-)$	−4	8	−32	−1
$^3S_7\ (2^+1^+-1^+-2^-)$	6	−12	−18	2	$^1I_{11}(2^+0^+3^-1^-)$	2	3	10	−1
$^3S_8\ (3^+1^+-3^+-1^-)$	−4	8	−32	1	$^1I_{12}(3^+-2^+3^-2^-)$	−10	−8	10	−2
$^3S_9\ (3^+0^+-2^+-1^-)$	2	3	10	1	$^1I_{13}(2^+-1^+3^-2^-)$	−2	−10	−4	−2
$^3S_{10}(2^+1^+-2^+-1^-)$	6	−12	−18	1	$^1I_{14}(1^+0^+3^-2^-)$	2	3	10	−2
$^3S_{11}(2^+0^+-1^+-1^-)$	10	1	−4	1	$^1H_1\ (3^+2^+3^--3^-)$	−15	2	3	$\frac{5}{2}$
$^3S_{12}(3^+0^+-3^+0^-)$	−2	18	38	0	$^1H_2\ (3^+2^+2^--2^-)$	−5	−18	17	$\frac{5}{2}$
$^3S_{13}(2^+1^+-3^+0^-)$	2	3	10	0	$^1H_3\ (3^+1^+3^--2^-)$	−7	0	−11	$\frac{3}{2}$
$^3S_{14}(3^+-1^+-2^+0^-)$	2	3	10	0	$^1H_4\ (3^+2^+1^--1^-)$	1	−2	−25	$\frac{5}{2}$
$^3S_{15}(2^+0^+-2^+0^-)$	8	−2	52	0	$^1H_5\ (3^+1^+2^--1^-)$	1	−2	−25	$\frac{3}{2}$
$^3S_{16}(1^+0^+-1^+0^-)$	14	14	10	0	$^1H_6\ (3^+0^+3^--1^-)$	−3	13	3	$\frac{1}{2}$
$^3S_{17}(3^+-1^+-3^+1^-)$	−4	8	−32	−1	$^1H_7\ (2^+1^+3^--1^-)$	1	−2	−25	$\frac{1}{2}$
$^3S_{18}(2^+0^+-3^+1^-)$	2	3	10	−1	$^1H_8\ (3^+1^+1^-0^-)$	5	11	−11	$\frac{3}{2}$
$^3S_{19}(2^+-1^+-2^+1^-)$	6	−12	−18	−1	$^1H_9\ (3^+0^+2^-0^-)$	3	8	45	$\frac{1}{2}$
$^3S_{20}(1^+0^+-2^+1^-)$	10	1	−4	−1	$^1H_{10}(2^+1^+2^-0^-)$	7	−7	17	$\frac{1}{2}$
$^3S_{21}(3^+-2^+-3^+2^-)$	−10	−8	10	−2	$^1H_{11}(3^+-1^+3^-0^-)$	−3	13	3	$-\frac{1}{2}$
$^3S_{22}(2^+-1^+-3^+2^-)$	−2	−10	−4	−2	$^1H_{12}(2^+0^+3^-0^-)$	3	8	45	$-\frac{1}{2}$
$^3S_{23}(1^+0^+-3^+2^-)$	2	3	10	−2	$^1H_{13}(3^+-1^+2^-1^-)$	1	−2	−25	$-\frac{1}{2}$
$^3S_{24}(1^+-1^+-2^+2^-)$	6	−12	−18	−2	$^1H_{14}(2^+0^+2^-1^-)$	7	−7	17	$-\frac{1}{2}$
$^3S_{25}(2^+-2^+-3^+3^-)$	−10	−8	10	−3	$^1H_{15}(3^+-2^+3^-1^-)$	−7	0	−11	$-\frac{3}{2}$
$^3S_{26}(1^+-1^+-3^+3^-)$	−4	8	−32	−3	$^1H_{16}(2^+-1^+3^-1^-)$	1	−2	−25	$-\frac{3}{2}$
$^3S_{27}(0^+-1^+-2^+3^-)$	2	3	10	−3	$^1H_{17}(1^+0^+3^-1^-)$	5	11	−11	$-\frac{3}{2}$
$^1N_1(3^+2^+3^-2^-)$	−10	−8	10	0	$^1H_{18}(3^+-3^+3^-2^-)$	−15	2	3	$-\frac{5}{2}$
$^1M_1(3^+2^+3^-1^-)$	−7	0	−11	$\frac{1}{2}$	$^1H_{19}(2^+-2^+3^-2^-)$	−5	−18	17	$-\frac{5}{2}$
$^1M_2(3^+1^+3^-2^-)$	−7	0	−11	$-\frac{1}{2}$	$^1H_{20}(1^+-1^+3^-2^-)$	1	−2	−25	$-\frac{5}{2}$
$^1L_1\ (3^+2^+3^-0^-)$	−1	−5	31	1	$^1G_1\ (3^+2^+2^--3^-)$	−10	−8	10	3
$^1L_2\ (3^+2^+2^-1^-)$	−2	−10	−4	1	$^1G_2\ (3^+1^+3^--3^-)$	−12	10	−18	2
$^1L_3\ (3^+1^+3^-1^-)$	−4	8	−32	0	$^1G_3\ (3^+2^+1^--2^-)$	−2	−10	−4	3
$^1L_4\ (3^+0^+3^-2^-)$	−1	−5	31	−1	$^1G_4\ (3^+1^+2^--2^-)$	−2	−10	−4	2
$^1L_5\ (2^+1^+3^-2^-)$	−2	−10	−4	−1	$^1G_5\ (3^+0^+3^--2^-)$	−6	5	24	1
$^1K_1\ (3^+2^+3^--1^-)$	−7	0	−11	$\frac{3}{2}$	$^1G_6\ (2^+1^+3^--2^-)$	−2	−10	−4	1
$^1K_2\ (3^+2^+2^-0^-)$	−1	−5	31	$\frac{3}{2}$	$^1G_7\ (3^+2^+0^--1^-)$	2	3	10	3
$^1K_3\ (3^+1^+3^-0^-)$	−3	13	3	$\frac{1}{2}$	$^1G_8\ (3^+1^+1^--1^-)$	4	6	−46	2

续

Slater 行列式函数	Y_2^0	Y_4^0	Y_6^0	V_s
$^1G_9\ (3^+0^+2^- -1^-)$	2	3	10	1
$^1G_{10}(2^+1^+2^- -1^-)$	6	−12	−18	1
$^1G_{11}(3^+ -1^+3^- -1^-)$	−4	8	−32	0
$^1G_{12}(2^+0^+3^- -1^-)$	2	3	10	0
$^1G_{13}(3^+0^+1^-0^-)$	6	16	24	1
$^1G_{14}(2^+1^+1^-0^-)$	10	1	−4	1
$^1G_{15}(3^+ -1^+2^-0^-)$	2	3	10	0
$^1G_{16}(2^+0^+2^-0^-)$	8	−2	52	0
$^1G_{17}(3^+ -2^+3^-0^-)$	−6	5	24	−1
$^1G_{18}(2^+ -1^+3^-0^-)$	2	3	10	−1
$^1G_{19}(1^+0^+3^-0^-)$	6	16	24	−1
$^1G_{20}(3^+ -2^+2^-1^-)$	−2	−10	−4	−1
$^1G_{21}(2^+ -1^+2^-1^-)$	6	−12	−18	−1
$^1G_{22}(1^+0^+2^-1^-)$	10	1	−4	−1
$^1G_{23}(3^+ -3^+3^-1^-)$	−12	10	−18	−2
$^1G_{24}(2^+ -2^+3^-1^-)$	−2	−10	−4	−2
$^1G_{25}(1^+ -1^+3^-1^-)$	4	6	−46	−2
$^1G_{26}(2^+ -3^+3^-2^-)$	−10	−8	10	−3
$^1G_{27}(1^+ -2^+3^-2^-)$	−2	−10	−4	−3
$^1G_{28}(0^+ -1^+3^-2^-)$	2	3	10	−3
$^1F_1\ (3^+2^+1^- -3^-)$	−7	0	−11	$\frac{7}{2}$
$^1F_2\ (3^+1^+2^- -3^-)$	−7	0	−11	$\frac{5}{2}$
$^1F_3\ (3^+0^+3^- -3^-)$	−11	15	17	$\frac{3}{2}$
$^1F_4\ (2^+1^+3^- -3^-)$	−7	0	−11	$\frac{3}{2}$
$^1F_5\ (3^+2^+0^- -2^-)$	−1	−5	31	$\frac{7}{2}$
$^1F_6\ (3^+1^+1^- -2^-)$	1	−2	−25	$\frac{5}{2}$
$^1F_7\ (3^+0^+2^- -2^-)$	−1	−5	31	$\frac{3}{2}$
$^1F_8\ (2^+1^+2^- -2^-)$	3	−20	3	$\frac{3}{2}$
$^1F_9\ (3^+ -1^+3^- -2^-)$	−7	0	−11	$\frac{1}{2}$
$^1F_{10}(2^+0^+3^- -2^-)$	−1	−5	31	$\frac{1}{2}$
$^1F_{11}(3^+1^+0^- -1^-)$	5	11	−11	$\frac{5}{2}$
$^1F_{12}(3^+0^+1^- -1^-)$	5	11	−11	$\frac{3}{2}$
$^1F_{13}(2^+1^+1^- -1^-)$	9	−4	−39	$\frac{3}{2}$
$^1F_{14}(3^+ -1^+2^- -1^-)$	1	−2	−25	$\frac{1}{2}$
$^1F_{15}(2^+0^+2^- -1^-)$	7	−7	17	$\frac{1}{2}$
$^1F_{16}(3^+ -2^+3^- -1^-)$	−7	0	−11	$-\frac{1}{2}$
$^1F_{17}(2^+ -1^+3^- -1^-)$	1	−2	−25	$-\frac{1}{2}$
$^1F_{18}(1^+0^+3^- -1^-)$	5	11	−11	$-\frac{1}{2}$
$^1F_{19}(3^+ -1^+1^-0^-)$	5	11	−11	$\frac{1}{2}$
$^1F_{20}(2^+0^+1^-0^-)$	11	6	31	$\frac{1}{2}$
$^1F_{21}(3^+ -2^+2^-0^-)$	−1	−5	31	$-\frac{1}{2}$
$^1F_{22}(2^+ -1^+2^-0^-)$	7	−7	17	$-\frac{1}{2}$
$^1F_{23}(1^+0^+2^-0^-)$	11	6	31	$-\frac{1}{2}$
$^1F_{24}(3^+ -3^+3^-0^-)$	−11	15	17	$-\frac{3}{2}$
$^1F_{25}(2^+ -2^+3^-0^-)$	−1	−5	31	$-\frac{3}{2}$
$^1F_{26}(1^+ -1^+3^-0^-)$	5	11	−11	$-\frac{3}{2}$
$^1F_{27}(3^+ -3^+2^-1^-)$	−7	0	−11	$-\frac{3}{2}$

Slater 行列式函数	Y_2^0	Y_4^0	Y_6	V_s
$^1F_{28}(2^+ -2^+2^-1^-)$	3	−20	3	$-\frac{3}{2}$
$^1F_{29}(1^+ -1^+2^-1^-)$	9	−4	−39	$-\frac{3}{2}$
$^1F_{30}(2^+ -3^+3^-1^-)$	−7	0	−11	$-\frac{5}{2}$
$^1F_{31}(1^+ -2^+3^-1^-)$	1	−2	−25	$-\frac{5}{2}$
$^1F_{32}(0^+ -1^+3^-1^-)$	5	11	−11	$-\frac{5}{2}$
$^1F_{33}(1^+ -3^+3^-2^-)$	−7	0	−11	$-\frac{7}{2}$
$^1F_{34}(0^+ -2^+3^-2^-)$	−1	−5	31	$-\frac{7}{2}$
$^1D_1\ (3^+2^+0^- -3^-)$	−6	5	24	4
$^1D_2\ (3^+1^+1^- -3^-)$	−4	8	−32	3
$^1D_3\ (3^+0^+2^- -3^-)$	−6	5	24	2
$^1D_4\ (2^+1^+2^- -3^-)$	−2	−10	−4	2
$^1D_5\ (3^+ -1^+3^- -3^-)$	−12	10	−18	1
$^1D_6\ (2^+0^+3^- -3^-)$	−6	5	24	1
$^1D_7\ (3^+2^+ -1^- -2^-)$	−2	−10	−4	4
$^1D_8\ (3^+1^+0^- -2^-)$	2	3	10	3
$^1D_9\ (3^+0^+1^- -2^-)$	2	3	10	2
$^1D_{10}(2^+1^+1^- -2^-)$	6	−12	−18	2
$^1D_{11}(3^+ -1^+2^- -2^-)$	−2	−10	−4	1
$^1D_{12}(2^+0^+2^- -2^-)$	4	−15	38	1
$^1D_{13}(3^+ -2^+3^- -2^-)$	−10	−8	10	0
$^1D_{14}(2^+ -1^+3^- -2^-)$	−2	−10	−4	0
$^1D_{15}(1^+0^+3^- -2^-)$	2	3	10	0
$^1D_{16}(3^+0^+0^- -1^-)$	6	16	24	2
$^1D_{17}(2^+1^+0^- -1^-)$	10	1	−4	2
$^1D_{18}(3^+ -1^+1^- -1^-)$	4	6	−46	1
$^1D_{19}(2^+0^+1^- -1^-)$	10	1	−4	1
$^1D_{20}(3^+ -2^+2^- -1^-)$	−2	−10	−4	0
$^1D_{21}(2^+ -1^+2^- -1^-)$	6	−12	−18	0
$^1D_{22}(1^+0^+2^- -1^-)$	10	1	−4	0
$^1D_{23}(3^+ -3^+3^- -1^-)$	−12	10	−18	−1
$^1D_{24}(2^+ -2^+3^- -1^-)$	−2	−10	−4	−1
$^1D_{25}(1^+ -1^+3^- -1^-)$	4	6	−46	−1
$^1D_{26}(3^+ -2^+1^-0^-)$	2	3	10	0
$^1D_{27}(2^+ -1^+1^-0^-)$	10	1	−4	0
$^1D_{28}(1^+0^+1^-0^-)$	14	14	10	0
$^1D_{29}(3^+ -3^+2^-0^-)$	−6	5	24	−1
$^1D_{30}(2^+ -2^+2^-0^-)$	4	−15	38	−1
$^1D_{31}(1^+ -1^+2^-0^-)$	10	1	−4	−1
$^1D_{32}(2^+ -3^+3^-0^-)$	−6	5	24	−2
$^1D_{33}(1^+ -2^+3^-0^-)$	2	3	10	−2
$^1D_{34}(0^+ -1^+3^-0^-)$	6	16	24	−2
$^1D_{35}(2^+ -3^+2^-1^-)$	−2	−10	−4	−2
$^1D_{36}(1^+ -2^+2^-1^-)$	6	−12	−18	−2
$^1D_{37}(0^+ -1^+2^-1^-)$	10	1	−4	−2
$^1D_{38}(1^+ -3^+3^-1^-)$	−4	8	−32	−3
$^1D_{39}(0^+ -2^+3^-1^-)$	2	3	10	−3
$^1D_{40}(0^+ -3^+3^-2^-)$	−6	5	24	−4

续

Slater 行列式函数	Y_2^0	Y_4^0	Y_6^0	V_s
$^{1}D_{41}(-1^{+}-2^{+}3^{-}2^{-})$	−2	−10	−4	−4
$^{1}P_{1}(3^{+}2^{+}-1^{-}-3^{-})$	−7	0	−11	$\frac{9}{2}$
$^{1}P_{2}(3^{+}1^{+}0^{-}-3^{-})$	−3	13	3	$\frac{7}{2}$
$^{1}P_{3}(3^{+}0^{+}1^{-}-3^{-})$	−3	13	3	$\frac{5}{2}$
$^{1}P_{4}(2^{+}1^{+}1^{-}-3^{-})$	1	−2	−25	$\frac{5}{2}$
$^{1}P_{5}(3^{+}-1^{+}2^{-}-3^{-})$	−7	0	−11	$\frac{3}{2}$
$^{1}P_{6}(2^{+}0^{+}2^{-}-3^{-})$	−1	−5	31	$\frac{3}{2}$
$^{1}P_{7}(3^{+}-2^{+}3^{-}-3^{-})$	−15	2	3	$\frac{1}{2}$
$^{1}P_{8}(2^{+}-1^{+}3^{-}-3^{-})$	−7	0	−11	$\frac{1}{2}$
$^{1}P_{9}(1^{+}0^{+}3^{-}-3^{-})$	−3	13	3	$\frac{1}{2}$
$^{1}P_{10}(3^{+}1^{+}-1^{-}-2^{-})$	1	−2	−25	$\frac{7}{2}$
$^{1}P_{11}(3^{+}0^{+}0^{-}-2^{-})$	3	8	45	$\frac{5}{2}$
$^{1}P_{12}(2^{+}1^{+}0^{-}-2^{-})$	7	−7	17	$\frac{5}{2}$
$^{1}P_{13}(3^{+}-1^{+}1^{-}-2^{-})$	1	−2	−25	$\frac{3}{2}$
$^{1}P_{14}(2^{+}0^{+}1^{-}-2^{-})$	7	−7	17	$\frac{3}{2}$
$^{1}P_{15}(3^{+}-2^{+}2^{-}-2^{-})$	−5	−18	17	$\frac{1}{2}$
$^{1}P_{16}(2^{+}-1^{+}2^{-}-2^{-})$	3	−20	3	$\frac{1}{2}$
$^{1}P_{17}(1^{+}0^{+}2^{-}-2^{-})$	7	−7	17	$\frac{1}{2}$
$^{1}P_{18}(3^{+}-3^{+}3^{-}-2^{-})$	−15	2	3	$-\frac{1}{2}$
$^{1}P_{19}(2^{+}-2^{+}3^{-}-2^{-})$	−5	−18	17	$-\frac{1}{2}$
$^{1}P_{20}(1^{+}-1^{+}3^{-}-2^{-})$	1	−2	−25	$-\frac{1}{2}$
$^{1}P_{21}(3^{+}-1^{+}0^{-}-1^{-})$	5	11	−11	$\frac{3}{2}$
$^{1}P_{22}(2^{+}0^{+}0^{-}-1^{-})$	11	6	31	$\frac{3}{2}$
$^{1}P_{23}(3^{+}-2^{+}1^{-}-1^{-})$	1	−2	−25	$\frac{1}{2}$
$^{1}P_{24}(2^{+}-1^{+}1^{-}-1^{-})$	9	−4	−39	$\frac{1}{2}$
$^{1}P_{25}(1^{+}0^{+}1^{-}-1^{-})$	13	9	−25	$\frac{1}{2}$
$^{1}P_{26}(3^{+}-3^{+}2^{-}-1^{-})$	−7	0	−11	$-\frac{1}{2}$
$^{1}P_{27}(2^{+}-2^{+}2^{-}-1^{-})$	3	−20	3	$-\frac{1}{2}$
$^{1}P_{28}(1^{+}-1^{+}2^{-}-1^{-})$	9	−4	−39	$-\frac{1}{2}$
$^{1}P_{29}(2^{+}-3^{+}3^{-}-1^{-})$	−7	0	−11	$-\frac{3}{2}$
$^{1}P_{30}(1^{+}-2^{+}3^{-}-1^{-})$	1	−2	−25	$-\frac{3}{2}$
$^{1}P_{31}(0^{+}-1^{+}3^{-}-1^{-})$	5	11	−11	$-\frac{3}{2}$
$^{1}P_{32}(3^{+}-3^{+}1^{-}0^{-})$	−3	13	3	$-\frac{1}{2}$
$^{1}P_{33}(2^{+}-2^{+}1^{-}0^{-})$	7	−7	17	$-\frac{1}{2}$
$^{1}P_{34}(1^{+}-1^{+}1^{-}0^{-})$	13	9	−25	$-\frac{1}{2}$
$^{1}P_{35}(2^{+}-3^{+}2^{-}0^{-})$	−1	−5	31	$-\frac{3}{2}$
$^{1}P_{36}(1^{+}-2^{+}2^{-}0^{-})$	7	−7	17	$-\frac{3}{2}$
$^{1}P_{37}(0^{+}-1^{+}2^{-}0^{-})$	11	6	31	$-\frac{3}{2}$
$^{1}P_{38}(1^{+}-3^{+}3^{-}0^{-})$	−3	13	3	$-\frac{5}{2}$
$^{1}P_{39}(0^{+}-2^{+}3^{-}0^{-})$	3	8	45	$-\frac{5}{2}$
$^{1}P_{40}(1^{+}-3^{+}2^{-}1^{-})$	1	−2	−25	$-\frac{5}{2}$
$^{1}P_{41}(0^{+}-2^{+}2^{-}1^{-})$	7	−7	17	$-\frac{5}{2}$
$^{1}P_{42}(0^{+}-3^{+}3^{-}1^{-})$	−3	13	3	$-\frac{7}{2}$
$^{1}P_{43}(-1^{+}-2^{+}3^{-}1^{-})$	1	−2	−25	$-\frac{7}{2}$
$^{1}P_{44}(-1^{+}-3^{+}3^{-}2^{-})$	−7	0	−11	$-\frac{9}{2}$
$^{1}S_{1}(3^{+}2^{+}-2^{-}-3^{-})$	−10	−8	10	5
$^{1}S_{2}(3^{+}1^{+}-1^{-}-3^{-})$	−4	8	−32	4
$^{1}S_{3}(3^{+}0^{+}0^{-}-3^{-})$	−2	18	38	3
$^{1}S_{4}(2^{+}1^{+}0^{-}-3^{-})$	2	3	10	3
$^{1}S_{5}(3^{+}-1^{+}1^{-}-3^{-})$	−4	8	−32	2
$^{1}S_{6}(2^{+}0^{+}1^{-}-3^{-})$	2	3	10	2
$^{1}S_{7}(3^{+}-2^{+}2^{-}-3^{-})$	−10	−8	10	1
$^{1}S_{8}(2^{+}-1^{+}2^{-}-3^{-})$	−2	−10	−4	1
$^{1}S_{9}(1^{+}0^{+}2^{-}-3^{-})$	2	3	10	1
$^{1}S_{10}(3^{+}-3^{+}3^{-}-3^{-})$	−20	12	−4	0
$^{1}S_{11}(2^{+}-2^{+}3^{-}-3^{-})$	−10	−8	10	0
$^{1}S_{12}(1^{+}-1^{+}3^{-}-3^{-})$	−4	8	−32	0
$^{1}S_{13}(3^{+}0^{+}-1^{-}-2^{-})$	2	3	10	3
$^{1}S_{14}(2^{+}1^{+}-1^{-}-2^{-})$	6	−12	−18	3
$^{1}S_{15}(3^{+}-1^{+}0^{-}-2^{-})$	2	3	10	2
$^{1}S_{16}(2^{+}0^{+}0^{-}-2^{-})$	8	−2	52	2
$^{1}S_{17}(3^{+}-2^{+}1^{-}-2^{-})$	−2	−10	−4	1
$^{1}S_{18}(2^{+}-1^{+}1^{-}-2^{-})$	6	−12	−18	1
$^{1}S_{19}(1^{+}0^{+}1^{-}-2^{-})$	10	1	−4	1
$^{1}S_{20}(3^{+}-3^{+}2^{-}-2^{-})$	−10	−8	10	0
$^{1}S_{21}(2^{+}-2^{+}2^{-}-2^{-})$	0	−28	24	0
$^{1}S_{22}(1^{+}-1^{+}2^{-}-2^{-})$	6	−12	−18	0
$^{1}S_{23}(2^{+}-3^{+}3^{-}-2^{-})$	−10	−8	10	−1
$^{1}S_{24}(1^{+}-2^{+}3^{-}-2^{-})$	−2	−10	−4	−1
$^{1}S_{25}(0^{+}-1^{+}3^{-}-2^{-})$	2	3	10	−1
$^{1}S_{26}(3^{+}-2^{+}0^{-}-1^{-})$	2	3	10	1
$^{1}S_{27}(2^{+}-1^{+}0^{-}-1^{-})$	10	1	−4	1
$^{1}S_{28}(1^{+}0^{+}0^{-}-1^{-})$	14	14	10	1
$^{1}S_{29}(3^{+}-3^{+}1^{-}-1^{-})$	−4	8	−32	0
$^{1}S_{30}(2^{+}-2^{+}1^{-}-1^{-})$	6	−12	−18	0
$^{1}S_{31}(1^{+}-1^{+}1^{-}-1^{-})$	12	4	−60	0
$^{1}S_{32}(2^{+}-3^{+}2^{-}-1^{-})$	−2	−10	−4	−1
$^{1}S_{33}(1^{+}-2^{+}2^{-}-1^{-})$	6	−12	−18	−1
$^{1}S_{34}(0^{+}-1^{+}2^{-}-1^{-})$	10	1	−4	−1
$^{1}S_{35}(1^{+}-3^{+}3^{-}-1^{-})$	−4	8	−32	−2
$^{1}S_{36}(0^{+}-2^{+}3^{-}-1^{-})$	2	3	10	−2
$^{1}S_{37}(2^{+}-3^{+}1^{-}0^{-})$	2	3	10	−1
$^{1}S_{38}(1^{+}-2^{+}1^{-}0^{-})$	10	1	−4	−1
$^{1}S_{39}(0^{+}-1^{+}1^{-}0^{-})$	14	14	10	−1
$^{1}S_{40}(1^{+}-3^{+}2^{-}0^{-})$	2	3	10	−2
$^{1}S_{41}(0^{+}-2^{+}2^{-}0^{-})$	8	−2	52	−2
$^{1}S_{42}(0^{+}-3^{+}3^{-}0^{-})$	−2	18	38	−3
$^{1}S_{43}(-1^{+}-2^{+}3^{-}0^{-})$	2	3	10	−3
$^{1}S_{44}(0^{+}-3^{+}2^{-}1^{-})$	2	3	10	−3
$^{1}S_{45}(-1^{+}-2^{+}2^{-}1^{-})$	6	−12	−18	−3
$^{1}S_{46}(-1^{+}-3^{+}3^{-}1^{-})$	−4	8	−32	−4
$^{1}S_{47}(-2^{+}-3^{+}3^{-}2^{-})$	−10	−8	10	−5

附表 4　f^4 波函数

$$|{}^5I^{(111)}_{(20)}\ 6\ 2\rangle={}^5I_1$$

$$|{}^5G^{(111)}_{(20)}\ 4\ 2\rangle=\frac{1}{\sqrt{11}}\,[\sqrt{6}\,{}^5G_1-\sqrt{5}\,{}^5G_2]$$

$$|{}^5F^{(111)}_{(10)}\ 3\ 2\rangle=\frac{1}{\sqrt{4}}\,[\sqrt{2}\,{}^5F_1-{}^5F_2+{}^5F_3]$$

$$|{}^5D^{(111)}_{(20)}\ 2\ 2\rangle=\frac{1}{\sqrt{21}}\,[\sqrt{5}\,{}^5D_2-\sqrt{6}\,{}^5D_3+\sqrt{10}\,{}^5D_4]$$

$$|{}^5S^{(111)}_{(00)}\ 0\ 2\rangle=\frac{1}{\sqrt{7}}\,[{}^5S_1-{}^5S_2+\sqrt{2}\,{}^5S_3+\sqrt{2}\,{}^5S_4-{}^5S_5]$$

$$|{}^3M^{(211)}_{(30)}\ 9\ 1\rangle={}^3M_1$$

$$|{}^3L^{(211)}_{(21)}\ 8\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\,[\sqrt{2}\,{}^3L_1-{}^3L_2]$$

$$|{}^3K^{(211)}_{(21)}\ 7\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{24}}\,[\sqrt{6}\,{}^3K_1-\sqrt{5}\,{}^3K_2+\sqrt{10}\,{}^3K_3-\sqrt{3}\,{}^3K_4]$$

$$|{}^3K^{(211)}_{(30)}\ 7\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{51}}\,[2\sqrt{3}\,{}^3K_1-\sqrt{10}\,{}^3K_2-\sqrt{5}\,{}^3K_3+2\sqrt{6}\,{}^3K_4]$$

$$|{}^3I^{(211)}_{(20)}\ 6\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{28}}\,[{}^3I_1-{}^3I_2+{}^3I_4+2\sqrt{2}\,{}^3I_5-2\sqrt{2}\,{}^3I_6+3\,{}^3I_7]$$

$$|{}^3I^{(211)}_{(30)}\ 6\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{28}}\,[\sqrt{3}\,{}^3I_1-\sqrt{3}\,{}^3I_2+\sqrt{10}\,{}^3I_3-\sqrt{3}\,{}^3I_4-\sqrt{6}\,{}^3I_5+\sqrt{3}\,{}^3I_7]$$

$$|{}^3H^{(110)}_{(11)}\ 5\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{5}}\,[{}^3H_1-{}^3H_2+{}^3H_3-{}^3H_5+{}^3H_8]$$

$$|{}^3H^{(211)}_{(11)}\ 5\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{180}}\,[2\,{}^3H_1-2\,{}^3H_2+2\,{}^3H_3+3\,{}^3H_5-5\,{}^3H_6+5\sqrt{2}\,{}^3H_7-3\,{}^3H_8+5\sqrt{2}\,{}^3H_{10}-5\,{}^3H_{11}]$$

$$|{}^3H^{(211)}_{(21)}\ 5\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{819}}\,[\sqrt{10}\,{}^3H_1-\sqrt{10}\,{}^3H_2-2\sqrt{10}\,{}^3H_3+6\sqrt{3}\,{}^3H_4+3\sqrt{10}\,{}^3H_5-\sqrt{10}\,{}^3H_6-4\sqrt{5}\,{}^3H_7+3\sqrt{10}\,{}^3H_8$$
$$-6\sqrt{6}\,{}^3H_9+5\sqrt{5}\,{}^3H_{10}+2\sqrt{10}\,{}^3H_{11}]$$

$$|{}^3H^{(211)}_{(30)}\ 5\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{156}}\,[2\sqrt{5}\,{}^3H_1-2\sqrt{5}\,{}^3H_2+2\sqrt{6}\,{}^3H_4+\sqrt{5}\,{}^3H_5-\sqrt{5}\,{}^3H_6-\sqrt{10}\,{}^3H_7-3\sqrt{5}\,{}^3H_8+2\sqrt{3}\,{}^3H_9$$
$$-\sqrt{10}\,{}^3H_{10}+\sqrt{5}\,{}^3H_{11}]$$

$$|{}^3G^{(211)}_{(20)}\ 4\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{308}}\,[\sqrt{6}\,{}^3G_1-\sqrt{5}\,{}^3G_2+\sqrt{5}\,{}^3G_3+\sqrt{6}\,{}^3G_5-2\sqrt{6}\,{}^3G_6+4\sqrt{3}\,{}^3G_7-2\sqrt{10}\,{}^3G_8+\sqrt{6}\,{}^3G_9$$
$$+3\sqrt{5}\,{}^3G_{10}-2\sqrt{10}\,{}^3G_{11}+2\sqrt{6}\,{}^3G_{12}-4\sqrt{3}\,{}^3G_{13}+\sqrt{6}\,{}^3G_{14}+\sqrt{5}\,{}^3G_{15}]$$

$$|{}^3G^{(211)}_{(21)}\ 4\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{1365}}\,[5\sqrt{6}\,{}^3G_1-5\sqrt{5}\,{}^3G_2-2\sqrt{5}\,{}^3G_3+7\sqrt{6}\,{}^3G_4+5\sqrt{6}\,{}^3G_5-3\sqrt{6}\,{}^3G_6-8\sqrt{3}\,{}^3G_7$$
$$-3\sqrt{10}\,{}^3G_8-2\sqrt{6}\,{}^3G_9+\sqrt{5}\,{}^3G_{10}+4\sqrt{10}\,{}^3G_{11}+3\sqrt{6}\,{}^3G_{12}+\sqrt{3}\,{}^3G_{13}-2\sqrt{6}\,{}^3G_{14}-2\sqrt{5}\,{}^3G_{15}]$$

$$|{}^3G^{(211)}_{(30)}\ 4\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2310}}\,[10\sqrt{3}\,{}^3G_1-5\sqrt{10}\,{}^3G_2+4\sqrt{10}\,{}^3G_3+2\sqrt{3}\,{}^3G_4-5\sqrt{3}\,{}^3G_5-3\sqrt{3}\,{}^3G_6+\sqrt{6}\,{}^3G_7+9\sqrt{5}\,{}^3G_8$$
$$-4\sqrt{3}\,{}^3G_9+4\sqrt{10}\,{}^3G_{10}-\sqrt{5}\,{}^3G_{11}-9\sqrt{3}\,{}^3G_{12}+\sqrt{6}\,{}^3G_{13}+11\sqrt{3}\,{}^3G_{14}-5\sqrt{10}\,{}^3G_{15}]$$

$$|{}^3F^{(110)}_{(10)}\ 3\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{15}}\,[\sqrt{2}\,{}^3F_1-{}^3F_2+{}^3F_4-\sqrt{2}\,{}^3F_7-{}^3F_{10}+\sqrt{2}\,{}^3F_{11}+{}^3F_{13}-\sqrt{2}\,{}^3F_{14}-{}^3F_{16}+\sqrt{2}\,{}^3F_{17}]$$

$$|{}^3F^{(211)}_{(10)}\ 3\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2160}}\,[\sqrt{2}\,{}^3F_1-{}^3F_2+{}^3F_4+5\,{}^3F_5-5\,{}^3F_6+4\sqrt{2}\,{}^3F_7-5\sqrt{2}\,{}^3F_8+9\,{}^3F_{10}-4\sqrt{2}\,{}^3F_{11}+5\sqrt{2}\,{}^3F_{12}$$
$$-9\,{}^3F_{13}+4\sqrt{2}\,{}^3F_{14}-16\,{}^3F_{16}+11\sqrt{2}\,{}^3F_{17}+20\sqrt{2}\,{}^3F_{18}-15\,{}^3F_{19}+15\,{}^3F_{20}]$$

$$|{}^3F^{(211)}_{(21)}\ 3\ 1\rangle=\frac{1}{\sqrt{396}}\,[7\sqrt{2}\,{}^3F_1-7\,{}^3F_2+\sqrt{30}\,{}^3F_3+{}^3F_4-4\,{}^3F_5-2\,{}^3F_6+\sqrt{2}\,{}^3F_7+4\sqrt{2}\,{}^3F_8+3\,{}^3F_{10}-\sqrt{2}\,{}^3F_{11}$$
$$-4\sqrt{2}\,{}^3F_{12}+4\sqrt{2}\,{}^3F_{14}-\sqrt{15}\,{}^3F_{15}+5\,{}^3F_{16}-\sqrt{2}\,{}^3F_{17}-\sqrt{2}\,{}^3F_{18}-3\,{}^3F_{19}+6\,{}^3F_{20}]$$

$$\left|{}^3F^{(211)}_{(30)}\ 3\ 1\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{15444}}\ [7\sqrt{10}\,{}^3F_1-7\sqrt{5}\,{}^3F_2+15\sqrt{6}\,{}^3F_3-11\sqrt{5}\,{}^3F_4-19\sqrt{5}\,{}^3F_5+\sqrt{5}\,{}^3F_6+10\sqrt{10}\,{}^3F_7$$
$$+\sqrt{10}\,{}^3F_8+18\sqrt{6}\,{}^3F_9-9\sqrt{5}\,{}^3F_{10}-10\sqrt{10}\,{}^3F_{11}-\sqrt{10}\,{}^3F_{12}-9\sqrt{5}\,{}^3F_{13}-8\sqrt{10}\,{}^3F_{14}+30\sqrt{3}\,{}^3F_{15}$$
$$-4\sqrt{5}\,{}^3F_{16}+5\sqrt{10}\,{}^3F_{17}+5\sqrt{10}\,{}^3F_{18}+3\sqrt{5}\,{}^3F_{19}-21\sqrt{5}\,{}^3F_{20}]$$

$$\left|{}^3D^{(211)}_{(20)}\ 2\ 1\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{588}}\ [\sqrt{5}\,{}^3D_2-\sqrt{6}\,{}^3D_3-3\sqrt{5}\,{}^3D_4+2\sqrt{5}\,{}^3D_5-\sqrt{10}\,{}^3D_6+2\sqrt{10}\,{}^3D_7+\sqrt{6}\,{}^3D_8-4\sqrt{5}\,{}^3D_9$$
$$+\sqrt{10}\,{}^3D_{10}-4\sqrt{3}\,{}^3D_{11}+3\sqrt{6}\,{}^3D_{12}-4\sqrt{3}\,{}^3D_{13}+\sqrt{10}\,{}^3D_{14}+4\sqrt{5}\,{}^3D_{16}-3\sqrt{5}\,{}^3D_{17}$$
$$-\sqrt{10}\,{}^3D_{19}+2\sqrt{5}\,{}^3D_{20}-2\sqrt{10}\,{}^3D_{21}+\sqrt{5}\,{}^3D_{22}+\sqrt{6}\,{}^3D_{23}]$$

$$\left|{}^3D^{(211)}_{(21)}\ 2\ 1\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{19404}}\ [8\sqrt{10}\,{}^3D_2-16\sqrt{3}\,{}^3D_3-10\sqrt{10}\,{}^3D_4+2\sqrt{10}\,{}^3D_5+12\sqrt{5}\,{}^3D_6+18\sqrt{5}\,{}^3D_7+2\sqrt{3}\,{}^3D_8$$
$$+3\sqrt{10}\,{}^3D_9-12\sqrt{5}\,{}^3D_{10}-18\sqrt{6}\,{}^3D_{11}-\sqrt{3}\,{}^3D_{12}+17\sqrt{6}\,{}^3D_{13}-5\sqrt{5}\,{}^3D_{14}+21\sqrt{5}\,{}^3D_{15}$$
$$-3\sqrt{10}\,{}^3D_{16}-3\sqrt{10}\,{}^3D_{17}-14\sqrt{5}\,{}^3D_{18}+19\sqrt{5}\,{}^3D_{19}-12\sqrt{10}\,{}^3D_{20}+3\sqrt{5}\,{}^3D_{21}+15\sqrt{10}\,{}^3D_{22}$$
$$-19\sqrt{3}\,{}^3D_{23}]$$

$$\left|{}^3P^{(110)}_{(11)}\ 1\ 1\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{70}}\ [\sqrt{5}\,{}^3P_1-\sqrt{6}\,{}^3P_2-\sqrt{3}\,{}^3P_3+\sqrt{6}\,{}^3P_5+\sqrt{3}\,{}^3P_7-\sqrt{5}\,{}^3P_9-\sqrt{3}\,{}^3P_{11}+\sqrt{5}\,{}^3P_{13}$$
$$+\sqrt{3}\,{}^3P_{16}-\sqrt{6}\,{}^3P_{18}-\sqrt{5}\,{}^3P_{21}+\sqrt{6}\,{}^3P_{22}-\sqrt{3}\,{}^3P_{23}+\sqrt{5}\,{}^3P_{24}-\sqrt{6}\,{}^3P_{25}]$$

$$\left|{}^3P^{(211)}_{(11)}\ 1\ 1\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{5040}}\ [2\sqrt{10}\,{}^3P_1-4\sqrt{3}\,{}^3P_2-7\sqrt{6}\,{}^3P_3+5\sqrt{6}\,{}^3P_4-6\sqrt{3}\,{}^3P_5+5\sqrt{10}\,{}^3P_6+2\sqrt{6}\,{}^3P_7$$
$$-10\sqrt{5}\,{}^3P_8+3\sqrt{10}\,{}^3P_9-10\sqrt{3}\,{}^3P_{10}+8\sqrt{6}\,{}^3P_{11}-10\sqrt{3}\,{}^3P_{12}+2\sqrt{10}\,{}^3P_{13}+10\sqrt{6}\,{}^3P_{15}$$
$$-8\sqrt{6}\,{}^3P_{16}-4\sqrt{3}\,{}^3P_{18}+5\sqrt{10}\,{}^3P_{19}-10\sqrt{5}\,{}^3P_{20}+3\sqrt{10}\,{}^3P_{21}+4\sqrt{3}\,{}^3P_{22}-7\sqrt{6}\,{}^3P_{23}$$
$$+2\sqrt{10}\,{}^3P_{24}+6\sqrt{3}\,{}^3P_{25}-5\sqrt{6}\,{}^3P_{26}]$$

$$\left|{}^3P^{(211)}_{(30)}\ 1\ 1\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{27720}}\ [20\sqrt{5}\,{}^3P_1-20\sqrt{6}\,{}^3P_2-25\sqrt{3}\,{}^3P_3+5\sqrt{3}\,{}^3P_4+15\sqrt{6}\,{}^3P_5+17\sqrt{5}\,{}^3P_6+8\sqrt{3}\,{}^3P_7$$
$$+\sqrt{10}\,{}^3P_8-15\sqrt{5}\,{}^3P_9-17\sqrt{6}\,{}^3P_{10}-4\sqrt{3}\,{}^3P_{11}+13\sqrt{6}\,{}^3P_{12}+2\sqrt{5}\,{}^3P_{13}+18\sqrt{6}\,{}^3P_{14}$$
$$-2\sqrt{3}\,{}^3P_{15}-2\sqrt{3}\,{}^3P_{16}-12\sqrt{6}\,{}^3P_{17}+10\sqrt{6}\,{}^3P_{18}-19\sqrt{5}\,{}^3P_{19}+\sqrt{10}\,{}^3P_{20}+21\sqrt{5}\,{}^3P_{21}$$
$$-10\sqrt{6}\,{}^3P_{22}+35\sqrt{3}\,{}^3P_{23}-16\sqrt{5}\,{}^3P_{24}+15\sqrt{6}\,{}^3P_{25}-5\sqrt{3}\,{}^3P_{26}]$$

$$\left|{}^1N^{(220)}_{(22)}\ 10\ 0\right\rangle={}^1N_1$$

$$\left|{}^1L^{(220)}_{(21)}\ 8\ 0\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{6}}\ [{}^1L_1-\sqrt{2}\,{}^1L_2+{}^1L_4-\sqrt{2}\,{}^1L_5]$$

$$\left|{}^1L^{(220)}_{(22)}\ 8\ 0\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{57}}\ [\sqrt{10}\,{}^1L_1+\sqrt{5}\,{}^1L_2-3\sqrt{3}\,{}^1L_3+\sqrt{10}\,{}^1L_4+\sqrt{5}\,{}^1L_5]$$

$$\left|{}^1K^{(220)}_{(21)}\ 7\ 0\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{48}}\ [\sqrt{10}\,{}^1K_1-\sqrt{5}\,{}^1K_2-\sqrt{3}\,{}^1K_3+\sqrt{6}\,{}^1K_4-\sqrt{3}\,{}^1K_5+\sqrt{6}\,{}^1K_6+\sqrt{10}\,{}^1K_7-\sqrt{5}\,{}^1K_8]$$

$$\left|{}^1I^{(200)}_{(20)}\ 6\ 0\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{5}}\ [{}^1I_1-{}^1I_3+{}^1I_6-{}^1I_{10}+{}^1I_{12}]$$

$$\left|{}^1I^{(220)}_{(20)}\ 6\ 0\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{1680}}\ [3\,{}^1I_1-3\,{}^1I_3-5\sqrt{2}\,{}^1I_4+5\sqrt{2}\,{}^1I_5-12\,{}^1I_6+10\sqrt{2}\,{}^1I_7+10\sqrt{2}\,{}^1I_8-30\,{}^1I_9-3\,{}^1I_{10}+5\sqrt{2}\,{}^1I_{11}$$
$$+3\,{}^1I_{12}-5\sqrt{2}\,{}^1I_{14}]$$

$$\left|{}^1I^{(220)}_{(22)}\ 6\ 0\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{1360}}\ [5\sqrt{3}\,{}^1I_1-8\sqrt{5}\,{}^1I_2+3\sqrt{3}\,{}^1I_3+5\sqrt{6}\,{}^1I_4+3\sqrt{6}\,{}^1I_5-4\sqrt{3}\,{}^1I_6-2\sqrt{6}\,{}^1I_7-2\sqrt{6}\,{}^1I_8$$
$$-2\sqrt{3}\,{}^1I_9+3\sqrt{3}\,{}^1I_{10}+3\sqrt{6}\,{}^1I_{11}+5\sqrt{3}\,{}^1I_{12}-8\sqrt{5}\,{}^1I_{13}+5\sqrt{6}\,{}^1I_{14}]$$

$$\left|{}^1H^{(220)}_{(21)}\ 5\ 0\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{182}}\ [\sqrt{10}\,{}^1H_1+\sqrt{10}\,{}^1H_2-2\sqrt{6}\,{}^1H_3-\sqrt{10}\,{}^1H_4+\sqrt{5}\,{}^1H_6+\sqrt{10}\,{}^1H_7+2\sqrt{3}\,{}^1H_8-\sqrt{10}\,{}^1H_9$$
$$+\sqrt{5}\,{}^1H_{11}-\sqrt{10}\,{}^1H_{12}+\sqrt{10}\,{}^1H_{13}-2\sqrt{6}\,{}^1H_{15}+2\sqrt{3}\,{}^1H_{17}+\sqrt{10}\,{}^1H_{18}+\sqrt{10}\,{}^1H_{19}-\sqrt{10}\,{}^1H_{20}]$$

$$\left|{}^1H^{(220)}_{(22)}\ 5\ 0\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{168}}\ [3\sqrt{5}\,{}^1H_1-2\sqrt{5}\,{}^1H_2-\sqrt{3}\,{}^1H_3+\sqrt{5}\,{}^1H_4+\sqrt{5}\,{}^1H_5-\sqrt{6}\,{}^1H_8-\sqrt{3}\,{}^1H_{15}+\sqrt{5}\,{}^1H_{16}$$
$$-\sqrt{6}\,{}^1H_{17}+3\sqrt{5}\,{}^1H_{18}-2\sqrt{5}\,{}^1H_{19}+\sqrt{5}\,{}^1H_{20}]$$

$$|{}^1G^{(200)}_{(20)}\ 4\ 0\rangle=\frac{1}{\sqrt{55}}\,[\sqrt{5}\,{}^1G_1-\sqrt{3}\,{}^1G_2-\sqrt{3}\,{}^1G_3+\sqrt{3}\,{}^1G_6+\sqrt{3}\,{}^1G_8-\sqrt{5}\,{}^1G_{10}-\sqrt{3}\,{}^1G_{13}+\sqrt{5}\,{}^1G_{16}$$
$$-\sqrt{3}\,{}^1G_{19}+\sqrt{3}\,{}^1G_{20}-\sqrt{5}\,{}^1G_{21}-\sqrt{3}\,{}^1G_{23}+\sqrt{3}\,{}^1G_{25}+\sqrt{5}\,{}^1G_{26}-\sqrt{3}\,{}^1G_{27}]$$

$$|{}^1G^{(220)}_{(20)}\ 4\ 0\rangle=\frac{1}{\sqrt{18480}}\,[3\sqrt{5}\,{}^1G_1-3\sqrt{3}\,{}^1G_2+7\sqrt{3}\,{}^1G_3-10\sqrt{3}\,{}^1G_4+15\sqrt{6}\,{}^1G_5-17\sqrt{3}\,{}^1G_6-5\sqrt{10}\,{}^1G_7$$
$$+3\sqrt{3}\,{}^1G_8+5\sqrt{10}\,{}^1G_9-3\sqrt{5}\,{}^1G_{10}-30\sqrt{5}\,{}^1G_{11}+10\sqrt{10}\,{}^1G_{12}-18\sqrt{3}\,{}^1G_{13}+15\sqrt{6}\,{}^1G_{14}$$
$$+10\sqrt{10}\,{}^1G_{15}-12\sqrt{5}\,{}^1G_{16}+15\sqrt{6}\,{}^1G_{17}+5\sqrt{10}\,{}^1G_{18}-18\sqrt{3}\,{}^1G_{19}-17\sqrt{3}\,{}^1G_{20}-3\sqrt{5}\,{}^1G_{21}$$
$$+15\sqrt{6}\,{}^1G_{22}-3\sqrt{3}\,{}^1G_{23}-10\sqrt{3}\,{}^1G_{24}+3\sqrt{3}\,{}^1G_{25}+3\sqrt{5}\,{}^1G_{26}+7\sqrt{3}\,{}^1G_{27}-5\sqrt{10}\,{}^1G_{28}]$$

$$|{}^1G^{(220)}_{(21)}\ 4\ 0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2730}}\,[3\sqrt{10}\,{}^1G_1-3\sqrt{6}\,{}^1G_2-3\sqrt{6}\,{}^1G_4+9\sqrt{3}\,{}^1G_5-3\sqrt{6}\,{}^1G_6-3\sqrt{5}\,{}^1G_7+3\sqrt{6}\,{}^1G_8$$
$$-4\sqrt{5}\,{}^1G_9+4\sqrt{10}\,{}^1G_{10}-2\sqrt{10}\,{}^1G_{11}-\sqrt{5}\,{}^1G_{12}+3\sqrt{6}\,{}^1G_{13}-12\sqrt{3}\,{}^1G_{14}-\sqrt{5}\,{}^1G_{15}$$
$$+2\sqrt{10}\,{}^1G_{16}+9\sqrt{3}\,{}^1G_{17}-4\sqrt{5}\,{}^1G_{18}+3\sqrt{6}\,{}^1G_{19}-3\sqrt{6}\,{}^1G_{20}+4\sqrt{10}\,{}^1G_{21}-12\sqrt{3}\,{}^1G_{22}$$
$$-3\sqrt{6}\,{}^1G_{23}-3\sqrt{6}\,{}^1G_{24}+3\sqrt{6}\,{}^1G_{25}+3\sqrt{10}\,{}^1G_{26}-3\sqrt{5}\,{}^1G_{28}]$$

$$|{}^1G^{(220)}_{(22)}\ 4\ 0\rangle=\frac{1}{\sqrt{34320}}\,[21\sqrt{5}\,{}^1G_1-21\sqrt{3}\,{}^1G_2-15\sqrt{3}\,{}^1G_3-6\sqrt{3}\,{}^1G_4+9\sqrt{6}\,{}^1G_5+9\sqrt{3}\,{}^1G_6+21\sqrt{10}\,{}^1G_7$$
$$-27\sqrt{3}\,{}^1G_8+11\sqrt{10}\,{}^1G_9+11\sqrt{5}\,{}^1G_{10}-10\sqrt{5}\,{}^1G_{11}-10\sqrt{10}\,{}^1G_{12}+18\sqrt{3}\,{}^1G_{13}+9\sqrt{6}\,{}^1G_{14}$$
$$-10\sqrt{10}\,{}^1G_{15}-20\sqrt{5}\,{}^1G_{16}+9\sqrt{6}\,{}^1G_{17}+11\sqrt{10}\,{}^1G_{18}+18\sqrt{3}\,{}^1G_{19}+9\sqrt{3}\,{}^1G_{20}+11\sqrt{5}\,{}^1G_{21}$$
$$+9\sqrt{6}\,{}^1G_{22}-21\sqrt{3}\,{}^1G_{23}-6\sqrt{3}\,{}^1G_{24}-27\sqrt{3}\,{}^1G_{25}+21\sqrt{5}\,{}^1G_{26}-15\sqrt{3}\,{}^1G_{27}+21\sqrt{10}\,{}^1G_{28}]$$

$$|{}^1F^{(220)}_{(21)}\ 3\ 0\rangle=\frac{1}{\sqrt{264}}\,[\sqrt{6}\,{}^1F_1-\sqrt{6}\,{}^1F_2+3\sqrt{3}\,{}^1F_3-2\sqrt{6}\,{}^1F_4-\sqrt{3}\,{}^1F_5-\sqrt{3}\,{}^1F_7+2\sqrt{6}\,{}^1F_8-\sqrt{6}\,{}^1F_9$$
$$+\sqrt{3}\,{}^1F_{11}-\sqrt{6}\,{}^1F_{13}+\sqrt{10}\,{}^1F_{14}-\sqrt{5}\,{}^1F_{15}-\sqrt{6}\,{}^1F_{16}+\sqrt{10}\,{}^1F_{17}-\sqrt{3}\,{}^1F_{18}-\sqrt{3}\,{}^1F_{19}$$
$$+\sqrt{6}\,{}^1F_{20}-\sqrt{5}\,{}^1F_{22}+\sqrt{6}\,{}^1F_{23}+3\sqrt{3}\,{}^1F_{24}-\sqrt{3}\,{}^1F_{25}-2\sqrt{6}\,{}^1F_{27}+2\sqrt{6}\,{}^1F_{28}-\sqrt{6}\,{}^1F_{29}$$
$$-\sqrt{6}\,{}^1F_{30}+\sqrt{3}\,{}^1F_{32}+\sqrt{6}\,{}^1F_{33}-\sqrt{3}\,{}^1F_{34}]$$

$$|{}^1D^{(200)}_{(20)}\ 2\ 0\rangle=\frac{1}{\sqrt{210}}\,[\sqrt{10}\,{}^1D_1-2\sqrt{3}\,{}^1D_2+\sqrt{10}\,{}^1D_3-\sqrt{5}\,{}^1D_5-\sqrt{5}\,{}^1D_7+2\sqrt{3}\,{}^1D_{10}-\sqrt{10}\,{}^1D_{12}+\sqrt{5}\,{}^1D_{14}$$
$$+\sqrt{5}\,{}^1D_{16}-\sqrt{10}\,{}^1D_{17}-\sqrt{5}\,{}^1D_{18}+\sqrt{5}\,{}^1D_{20}+\sqrt{10}\,{}^1D_{22}-\sqrt{5}\,{}^1D_{23}-\sqrt{5}\,{}^1D_{25}+\sqrt{10}\,{}^1D_{27}$$
$$-2\sqrt{3}\,{}^1D_{28}-\sqrt{10}\,{}^1D_{30}+\sqrt{10}\,{}^1D_{32}+\sqrt{5}\,{}^1D_{34}+2\sqrt{3}\,{}^1D_{36}-\sqrt{10}\,{}^1D_{37}-2\sqrt{3}\,{}^1D_{38}+\sqrt{10}\,{}^1D_{40}$$
$$-\sqrt{5}\,{}^1D_{41}]$$

$$|{}^1D^{(220)}_{(20)}\ 2\ 0\rangle=\frac{1}{\sqrt{70560}}\,[3\sqrt{10}\,{}^1D_1-6\sqrt{3}\,{}^1D_2+18\sqrt{10}\,{}^1D_3-30\sqrt{5}\,{}^1D_4-33\sqrt{5}\,{}^1D_5+15\sqrt{10}\,{}^1D_6-13\sqrt{5}\,{}^1D_7$$
$$+10\sqrt{6}\,{}^1D_8-10\sqrt{6}\,{}^1D_9+6\sqrt{3}\,{}^1D_{10}-20\sqrt{5}\,{}^1D_{11}+12\sqrt{10}\,{}^1D_{12}+60\sqrt{3}\,{}^1D_{13}-7\sqrt{5}\,{}^1D_{14}$$
$$-20\sqrt{6}\,{}^1D_{15}-12\sqrt{5}\,{}^1D_{16}+2\sqrt{10}\,{}^1D_{17}+27\sqrt{5}\,{}^1D_{18}-5\sqrt{10}\,{}^1D_{19}-7\sqrt{5}\,{}^1D_{20}-7\sqrt{10}\,{}^1D_{22}$$
$$-33\sqrt{5}\,{}^1D_{23}-20\sqrt{5}\,{}^1D_{24}+27\sqrt{5}\,{}^1D_{25}-20\sqrt{6}\,{}^1D_{26}-7\sqrt{10}\,{}^1D_{27}+24\sqrt{3}\,{}^1D_{28}+15\sqrt{10}\,{}^1D_{29}$$
$$+12\sqrt{10}\,{}^1D_{30}-5\sqrt{10}\,{}^1D_{31}+18\sqrt{10}\,{}^1D_{32}-10\sqrt{6}\,{}^1D_{33}-12\sqrt{5}\,{}^1D_{34}-30\sqrt{5}\,{}^1D_{35}+6\sqrt{3}\,{}^1D_{36}$$
$$+2\sqrt{10}\,{}^1D_{37}-6\sqrt{3}\,{}^1D_{38}+10\sqrt{6}\,{}^1D_{39}+3\sqrt{10}\,{}^1D_{40}-13\sqrt{5}\,{}^1D_{41}]$$

$$|{}^1D^{(220)}_{(21)}\ 2\ 0\rangle=\frac{1}{\sqrt{38808}}\,[18\sqrt{5}\,{}^1D_1-18\sqrt{6}\,{}^1D_2+3\sqrt{5}\,{}^1D_3+15\sqrt{10}\,{}^1D_4+6\sqrt{10}\,{}^1D_5-15\sqrt{5}\,{}^1D_6-18\sqrt{10}\,{}^1D_7$$
$$+18\sqrt{3}\,{}^1D_8+17\sqrt{3}\,{}^1D_9-17\sqrt{6}\,{}^1D_{10}-11\sqrt{10}\,{}^1D_{11}+2\sqrt{5}\,{}^1D_{12}-2\sqrt{6}\,{}^1D_{13}+7\sqrt{10}\,{}^1D_{14}$$
$$-\sqrt{3}\,{}^1D_{15}-15\sqrt{10}\,{}^1D_{16}+12\sqrt{5}\,{}^1D_{17}+4\sqrt{10}\,{}^1D_{18}+5\sqrt{5}\,{}^1D_{19}+7\sqrt{10}\,{}^1D_{20}-7\sqrt{5}\,{}^1D_{22}$$
$$+6\sqrt{10}\,{}^1D_{23}-11\sqrt{10}\,{}^1D_{24}+4\sqrt{10}\,{}^1D_{25}-\sqrt{3}\,{}^1D_{26}-7\sqrt{5}\,{}^1D_{27}+2\sqrt{6}\,{}^1D_{28}-15\sqrt{5}\,{}^1D_{29}$$
$$+2\sqrt{5}\,{}^1D_{30}+5\sqrt{5}\,{}^1D_{31}+3\sqrt{5}\,{}^1D_{32}+17\sqrt{3}\,{}^1D_{33}-15\sqrt{10}\,{}^1D_{34}+15\sqrt{10}\,{}^1D_{35}-17\sqrt{6}\,{}^1D_{36}$$
$$+12\sqrt{5}\,{}^1D_{37}-18\sqrt{6}\,{}^1D_{38}+18\sqrt{3}\,{}^1D_{39}+18\sqrt{5}\,{}^1D_{40}-18\sqrt{10}\,{}^1D_{41}]$$

$$
\begin{aligned}
|{}^1D^{(220)}_{(22)}\ 2\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{32032}} [& 3\sqrt{30}\,{}^1D_1 - 18{}^1D_2 + 2\sqrt{30}\,{}^1D_3 + 2\sqrt{15}\,{}^1D_4 - \sqrt{15}\,{}^1D_5 - \sqrt{30}\,{}^1D_6 + 3\sqrt{15}\,{}^1D_7 - 18\sqrt{2}\,{}^1D_8 \\
& + 18\sqrt{2}\,{}^1D_9 + 18{}^1D_{10} - 4\sqrt{15}\,{}^1D_{11} - 4\sqrt{30}\,{}^1D_{12} + 36{}^1D_{13} - 7\sqrt{15}\,{}^1D_{14} + 36\sqrt{2}\,{}^1D_{15} + 4\sqrt{15}\,{}^1D_{16} \\
& + 2\sqrt{30}\,{}^1D_{17} - 5\sqrt{15}\,{}^1D_{18} - 5\sqrt{30}\,{}^1D_{19} - 7\sqrt{15}\,{}^1D_{20} + 80{}^1D_{21} - 7\sqrt{30}\,{}^1D_{22} - \sqrt{15}\,{}^1D_{23} - 4\sqrt{15}\,{}^1D_{24} \\
& - 5\sqrt{15}\,{}^1D_{25} + 36\sqrt{2}\,{}^1D_{26} - 7\sqrt{30}\,{}^1D_{27} + 72{}^1D_{28} - \sqrt{30}\,{}^1D_{29} - 4\sqrt{30}\,{}^1D_{30} - 5\sqrt{30}\,{}^1D_{31} + 2\sqrt{30}\,{}^1D_{32} \\
& + 18\sqrt{2}\,{}^1D_{33} + 4\sqrt{15}\,{}^1D_{34} + 2\sqrt{15}\,{}^1D_{35} + 18{}^1D_{36} + 2\sqrt{30}\,{}^1D_{37} - 18{}^1D_{38} - 18\sqrt{2}\,{}^1D_{39} + 3\sqrt{30}\,{}^1D_{40} \\
& + 3\sqrt{15}\,{}^1D_{41}]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
|{}^1S^{(000)}_{(00)}\ 0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{21}} [& {}^1S_1 - {}^1S_2 + {}^1S_3 - {}^1S_5 + {}^1S_7 - {}^1S_{10} + {}^1S_{14} - {}^1S_{16} + {}^1S_{18} - {}^1S_{21} + {}^1S_{23} + {}^1S_{28} - {}^1S_{31} + {}^1S_{33} - {}^1S_{35} + {}^1S_{39} \\
& - {}^1S_{41} + {}^1S_{42} + {}^1S_{45} - {}^1S_{46} + {}^1S_{47}]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
|{}^1S^{(220)}_{(22)}\ 0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{462}} [& 3{}^1S_1 - 3{}^1S_2 + 2{}^1S_3 + \sqrt{2}\,{}^1S_4 - {}^1S_5 - \sqrt{2}\,{}^1S_6 - 2{}^1S_7 + \sqrt{15}\,{}^1S_8 - 2\sqrt{2}\,{}^1S_9 + 7{}^1S_{10} - 5{}^1S_{11} \\
& + 2{}^1S_{12} + \sqrt{2}\,{}^1S_{13} + {}^1S_{14} - \sqrt{2}\,{}^1S_{15} - 2{}^1S_{16} + \sqrt{15}\,{}^1S_{17} - 2{}^1S_{18} + \sqrt{30}\,{}^1S_{19} - 5{}^1S_{20} + 2{}^1S_{21} - 3{}^1S_{22} \\
& - 2{}^1S_{23} + \sqrt{15}\,{}^1S_{24} - 2\sqrt{2}\,{}^1S_{25} - 2\sqrt{2}\,{}^1S_{26} + \sqrt{30}\,{}^1S_{27} - 4{}^1S_{28} + 2{}^1S_{29} - 3{}^1S_{30} - {}^1S_{31} + \sqrt{15}\,{}^1S_{32} \\
& - 2{}^1S_{33} + \sqrt{30}\,{}^1S_{34} - {}^1S_{35} - \sqrt{2}\,{}^1S_{36} - 2\sqrt{2}\,{}^1S_{37} + \sqrt{30}\,{}^1S_{38} - 4{}^1S_{39} - \sqrt{2}\,{}^1S_{40} - 2{}^1S_{41} + 2{}^1S_{42} \\
& + \sqrt{2}\,{}^1S_{43} + \sqrt{2}\,{}^1S_{44} + {}^1S_{45} - 3{}^1S_{46} + 3{}^1S_{47}]
\end{aligned}
$$

参 考 文 献

[1] Condon, E. U. and Shortley, G. H., Theory of Atomic Spectra, (Cambridge University Press, London, 1935).
[2] Racah, G., *Phys. Rev.*, **61** (1942), 186.
[3] Racah, G., *Phys. Rev.*, **62** (1942), 438.
[4] Racah, G., *Phys. Rev.*, **63** (1943), 367.
[5] Racah, G., *Phys. Rev.*, **76** (1949), 1352.
[6] Slater, J. C., Quantum Theory of Atomic Structure, (McGraw-Hill Book Company, Inc. New York Toronto London, 1960).
[7] Judd, B. R., *Proc. Roy. Soc.*, **A251** (1959), 134.
[8] Elliott, J. R., Judd, B. R. and Runciman, *Proc. Roy. Soc.*, **A240** (1957), 509.
[9] Runciman, W. A., *J. Chem. Phys.*, **36** (1962), 1481.
[10] Wybourne, B. G., *J. Chem. Phys.*, **32** (1960), 639.
[11] Wybourne, B. G., *J. Chem. Phys.*, **34** (1961), 279.
[12] Wybourne, B. G., *J. Chem. Phys.*, **35** (1961), 334.
[13] Wybourne, B. G., *J. Chem. Phys.*, **35** (1961), 340.
[14] Wybourne, B. G., *J. Chem. Phys.*, **36** (1962), 2295; 2301.
[15] Wybourne, B. G., *J. Chem. Phys.*, **40** (1964), 1457.
[16] Wybourne, B. G. and Carnall, W. T., *J. Chem. Phys.*, **40** (1964), 3428.
[17] Reilly, E. F., *Phys. Rev.*, **91** (1953), 876.
[18] Rotenberg, Bivins, Metropolis and Wooton, The 3-j and 6-j Symbols, (Technology Press, Massachusetts Institute of Technology, Combridge, Mass. 1959).
[19] Bayman, B. F., Some Lectures on Groups and Their Applications to Spectroscopy, (Nordita, 1960). (中译本：群论及其在核谱学中的应用，石生明译，上海科学技术出版社，1963).
[20] Griffith, J. S., The Theory of Transition-metal Ions, (Cambridge at The University Press, 1961).
[21] Pappalardo, R., *J. Chem. Phys.*, **34** (1961), 1380.
[22] 谭维翰、赵景愚、沙维敏、朱谦和，科学通报，**8**(1964)，732.

ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИЙ КОНФИГУРАЦИИ f^4—f^7

Тань Вэй-хань　Би У-цзи　Цжи Тин-тин　Не Сюнь-цюань　Сюй Бин-хо
Цуй Чэн-цзя　Чжао Чжэнь-чжоу　Ли Жун-хуа
Тан Бан-фу　Фан Гуй-чунь

Резюме

Развитие теории спектров сложных атомов в общем может быть разделено на два этапа. Классический труд Condon и Shortley[1] подвел итог первому этапу развития этой теории, второй же этап представлен трудом Racah[2-5]. В первом случае волновая функция многоэлектронной системы представлена через функцию детерминанта, в втором случае вводя материнский коэффициент, Racah выражает волновые функии f^n через f^{n-1} и f, а не функцию детерминанта. Считаем систему расчета, заданную Condon и Shortley несложной по сравнению с методом Racah. Суть вопроса заключается в том, каким образом определены волновые функции "LS". Применив операторы L^+, S^+, Q и R, мы получили более простую и удобную систему уравнений и определили волновые функции "LS". На этой основе определение Кулоновской энергии, взаимодействия орбиты-спина и матричных элементов кристаллического поля оказывается нетрудным, если произвести соответствующее преобразование представления. В заключение мы рассмотрели вопрос о диагональной форме матрицы энергии ионов редких земель под действием кристаллического поля.