Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 1, с. 12 – 18 © 2020 г. 10 января

Модификация эндоэдрального потенциала после мгновенной ионизации внутреннего атома

М. Я. Амусья[+*1)], *А. С. Балтенков*[×], *Л. В. Чернышева*[*]

[+]*Институт физики Рака, Еврейский университет, 91904 Иерусалим, Израиль*

[*]*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, 194021 С.-Петербург, Россия*

[×]*Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. Арифова, 100125 Ташкент, Узбекистан*

Поступила в редакцию 25 октября 2019 г.
После переработки 9 ноября 2019 г.
Принята к публикации 21 ноября 2019 г.

В работе исследуется изменение потенциала эндоэдрала $A@C_N$ вследствие мгновенной ионизации внутреннего атома A. Используя подходящую модель для описания оболочки фуллерена C_N, удалось рассчитать это изменение, которое возникает следствие ее монопольной поляризации. Показано, что феноменологические потенциалы, хорошо моделирующие оболочку C_N, должны принадлежать семейству потенциалов с неплоским дном, в отличие от очень часто используемых потенциалов с дном плоским, типа прямоугольной ямы. В качестве конкретного примера мы используем модельный потенциал в форме Лоренца. Изменяя его форму, мы описываем различные степени монопольной поляризации оболочки C_N положительным электрическим зарядом в ее центре. Вычислены сечения фотоионизации атомов He, Ar и Xe, расположенных в центре оболочки C_{60}, с учетом и без учета сопровождающей этот процесс монопольной поляризации фуллереновой оболочки. Неожиданно обнаружилось, что монопольная поляризация не влияет на сечения фотоионизации этих эндоэдральных атомов, представляя очень редкий пример "маскировки" потенциала.

DOI: 10.31857/S0370274X20010038

1. Цель этого Письма – найти дополнительный потенциал, индуцированный в электронной оболочке эндоэдрала $A@C_N$ за счет мгновенной ионизации внутреннего атома A. Мы рассматриваем этот эффект как действие дополнительного положительного заряда z, добавленного в центр C_N. Мы намерены также исследовать влияние этого дополнительного потенциала на сечение фотоионизации эндоэдрала.

Идея о том, что взаимодействие электрона с почти сферическим фуллереном C_N может быть описана феноменологическим потенциалом $U(r)$, образованным "размытыми" атомами углерода – широко используемый подход (см., например, [1–3] и ссылки там), несмотря на то, что подобный подход существенно упрощает реальное молекулярное поле. Процедура размытия атома определяет вид потенциальной функции $U(r)$. Если предположить [4], что положительный заряд ядер C вместе с отрицательным зарядом электронов равномерно "размазан" по объему между двумя концентрическими сферами, мы приходим к функции $U(r)$ в виде потенциальной ямы с плоским дном. Мы можем использовать, однако, другое, заметно более реалистическое усреднение. А именно, сначала "размажем" положительный заряд по сфере радиуса R, учитывая, что все ядра атомов углерода расположены на равных расстояниях R от центра фуллереновой оболочки. После этого определим пространственное распределение электронов в поле этой сферы. Подобный подход приводит к потенциальной яме с неплоским дном [5].

Уравнение Пуассона определяет взаимное пространственное распределение положительных и отрицательных электрических зарядов, создающих потенциал $U(r)$. Решения этого уравнения существенно различаются для указанных двух типов функции $U(r)$. Функции с плоским дном соответствуют "луковичной" молекулярной структуре с двумя пространственно-разделенными слоями двойных зарядов, тогда как функции $U(r)$ с неплоским дном соответствуют трехслойной структуре зарядов, в которой слой положительных зарядов расположен между двумя отрицательными. Такое расположение положительной и отрицательной компонент фуллереновой оболочки приводит к появлению минимума функции $U(r)$ при $r = R$.

1) e-mail: amusia@vms.huji.ac.il

В качестве конкретного примера C_N рассмотрим почти идеально сферический фуллерен C_{60}. Его внутренний объем достаточно велик, чтобы вместить отдельные атомы A или даже небольшие молекулы. Силы Ван-дер-Ваальса, действующие между оболочкой A и C_{60}, слишком слабы, чтобы исказить электронную структуру как A, так и C_{60}, а поэтому эти структуры в $A@C_{60}$; можно считать независимыми друг от друга. При фотоионизации атома A фотоэлектрон подвергается воздействию потенциала атомного остатка и фуллереновой оболочки и, в свою очередь, воздействует на электронную подсистему C_{60}. Под действием фотоэлектрона, когда он находится далеко от центра C_{60}, коллективизированные электроны оболочки фуллерена в целом смещаются относительно своего жесткого положительного остова. Таким образом, C_{60} приобретает индуцированный электрический дипольный момент. Ряд работ описывает влияние соответствующего дипольного поляризационного потенциала C_{60} на упругое рассеяние электронов на эндоэдральных атомах $A@C_{60}$ и их фотоионизацию (см. [6–8]).

Наряду с дипольной поляризацией оболочки фуллерена, имеет место и ее монопольная поляризация под действием электрического заряда внутри полости C_{60}. Действительно, при фотоионизации атома A, помещенного в центр оболочки C_{60}, возникает дополнительный положительный заряд атомного остова. Этот заряд сдвигает отрицательную электронную плотность оболочки C_{60} относительно положительной плотности ионов углерода. Смещение электронной плотности в каждом элементарном объеме оболочки C_{60} под действием положительного атомного остатка A^+ приводит к созданию индуцированного электрического дипольного момента этого объема. Оси всех элементарных дипольных моментов направлены в центр сферы C_{60}. Таким образом, положительный заряд z в центре C_{60} сжимает сферическое электронное облако по направлению к центру C_{60}, вызывая дополнительный потенциал монопольной поляризации C_{60}.

В работе [9] (тот же подход недавно был повторен в [10]) анализируется влияние монопольной поляризации на процесс фотоионизации $A@C_{60}$. Авторы в [9] назвали это "внутренней статической поляризацией оболочки C_{60}". Они пишут: "Квинтэссенция этого эффекта заключается в том, что ион-остаток A^+, если происходит фотоионизация и появляется фотоэлектрон, может поляризовать оболочку C_{60}... Это приводит к тому, что потенциал оболочки фуллерена $U(r)$ будет отличаться от этого потенциала без учета статической поляризации". Чтобы учесть этот эффект, авторы [9] ввели модифицированную версию прямоугольной потенциальной ямы. Они пришли к выводу, что внутреннюю статическую поляризацию оболочки C_{60} "нельзя игнорировать при фотоионизации эндоэдральных атомов вблизи порога".

В настоящем Письме рассматривается монопольная поляризация C_{60} в рамках модельных потенциалов другого типа – с неплоским дном, так называемых потенциалов с профилем Лоренца [11, 12]. Сначала с помощью уравнения Пуассона мы рассмотрим пространственное распределение зарядов, которые создают потенциальную яму с профилем Лоренца. Затем, изменяя толщину левого и правого крыльев потенциальной ямы, установим связь этого изменения со смещением части коллективизированных электронов относительно положительного остова фуллереновой оболочки. Далее оценим относительное число электронов, втянутых к центру остова положительным электрическим зарядом z, расположенным в его центре. Затем используем асимметричную потенциальную яму Лоренца для расчета сечений фотоионизации эндоэдральных атомов He, Ar и Xe с учетом монопольной поляризации C_{60}.

2. Модельный потенциал $U(r)$ для оболочки C_{60} должен удовлетворять двум общим требованиям. Во-первых, он должен описывать притяжение, и поддерживать, по крайней мере, один электронный уровень s-состояния с энергией связи $E_s = -2.65$ эВ, таким образом, воспроизводя значение электронного сродства, измеренное в УФ фотоэлектронной спектроскопии отрицательного иона C_{60} [2, 13]. Во-вторых, потенциал $U(r)$ должен располагаться вблизи экспериментального радиуса фуллерена R в довольно тонкой сферической оболочке с толщиной Δ порядка нескольких атомных единиц. В работах [11, 12] $U(r)$ рассчитан в рамках самосогласованной модели сферического "желе" для коллективизированных электронов. При таком подходе электростатический потенциал фуллереновой оболочки в целом представляет собой сумму положительного потенциала ядер атомов углерода, "размазанных" по сфере с радиусом R, и отрицательного потенциала, создаваемого электронными облаками атомов углерода.

Форма Лоренца для этого пузырькового потенциала имеет вид

$$U(r) = -U_{\max}\frac{d^2}{(r-R)^2+d^2}. \quad (1)$$

В [12] выбранная глубина $U_{\max}$ и толщина $\Delta = 2d$ (в середине максимальной глубины) позволили расположить в (1) электронный уровень, который соответствует экспериментальному электронному сродству молекулы C_{60}.

Соотношение $U(r) = -\varphi(r)$ позволяет связать выражение (1) с потенциалом электрического поля $\varphi(r)$, которым оболочка C_{60} воздействует на электрон. Здесь мы учитываем, что заряд электрона равен (-1). В работе использована атомная система единиц. Уравнение Пуассона [14] определяет потенциал электростатического поля $\varphi(r)$ как функцию от $\rho(r)$

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho, \tag{2}$$

где $\rho(r)$ – плотность электрических зарядов, образующих потенциальную яму (1). В сферических координатах с центром в центре оболочки C_{60}, следующее уравнение определяет зависимость плотность заряда от радиуса:

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}[rU(r)] = 4\pi\rho(r). \tag{3}$$

Применяя (3) к потенциалу (1), мы получаем пространственное распределение электрического заряда $Q(r) = 4\pi\rho r^2$, которое создает потенциал пузырька в форме Лоренца (1). На рисунке 1 (верхняя часть) представлена функция $Q(r)$ в зависимости от радиуса r. Плотность заряда, согласно рис. 1, есть трехслойный сэндвич. Средний слой представляет собой положительно заряженные ионы C^{4+}, а внутренний и внешний слои отображают отрицательно заряженные облака коллективизированных электронов. Общий заряд оболочки C_{60} равен нулю, поскольку потенциал (1) есть потенциал короткого радиуса. Интегрирование отрицательных частей кривой $Q(r)$ показывает, что около 46 % отрицательного заряда находится во внутреннем электронном облаке. Внешнее электронное облако содержит остальной отрицательный заряд оболочки C_{60}.

Покажем, что, изменяя параметр Δ левого и правого крыльев потенциальной ямы (1), мы можем описать переход электронов из внешнего электронного облака во внутреннее через жесткий положительный остов фуллерена C_{60} и проанализировать различные степени монопольной поляризации его оболочки. Для этого заменим постоянную толщину Δ в (1) следующим выражением

$$\Delta(r) = \Delta_L + (\Delta_R - \Delta_L)\Theta(R - r). \tag{4}$$

Здесь Δ_L и Δ_R – параметры левого и правого крыльев потенциальной ямы (1) соответственно, $\Theta(z)$ – ступенчатая функция Хевисайда

$$\Theta(z) = [1 + \exp(z/\eta)]^{-1}, \tag{5}$$

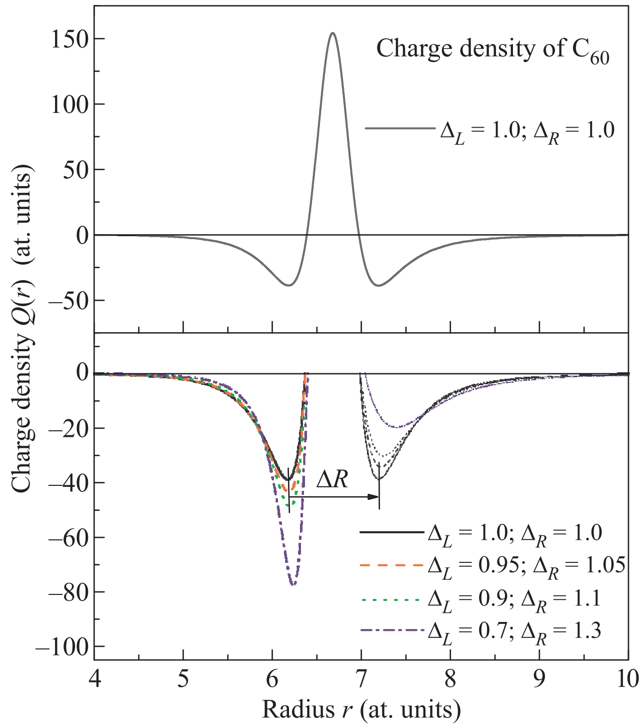

Рис. 1. (Цветной онлайн) Пространственное распределение электрического заряда потенциала пузырькового типа (1) в форме Лоренца с параметрами $R = 6.665$, $\Delta = \Delta_L = \Delta_R = 1.0$ и $U_{\max} = 0.4415$ (верхняя часть). Распределение заряда электронов для разных Δ_L и Δ_R из табл. 1 (нижняя часть). Зазор между сферами сферического конденсатора составляет $\Delta R \approx 1$. Все параметры приведены в атомных единицах (at. un.)

в которой параметр диффузности η является фиксированным положительным произвольно малым числом, и который, следовательно, в конечном итоге может быть положен равным нулю. В нижней части рис. 1 представлены электронные плотности левого и правого облаков в зависимости от радиуса r. В таблице 1 представлены результаты расчета отрицательных зарядов этих электронных облаков. Выбор параметров таков, что энергия сродства и в асимметричном потенциале Лоренца всегда остается близкой к $E_s = -2.65$ эВ.

Оценим в грубом приближении долю электронов, перенесенных из внешнего облака во внутреннее под воздействием положительного электрического заряда z, расположенного в центре сферической оболочки. Предположим, что электроны обоих облаков расположены на концентрических сферах с радиусами, определяемыми минимумами электронных плотностей внешнего и внутреннего облаков. Согласно рис. 1, зазор между этими сферами составляет $\Delta R \approx 1$. Рассмотрим всю систему положительных и отрицательных зарядов как сферический конденсатор, на пластинах которого отрицательные заряды размещены в пропорциях 46 и 54 %. Предполагаем, что положительный заряд между распределениями зарядов сфер стабилизирует их. Электрическое поле внутри этого конденсатора равно нулю. В противном случае электроны перешли бы с одной пластины на другую. После введения заряда z в центр такого конденсатора, некоторый заряд q переместится из внешней сферы во внутреннюю для компенсации электрического поля z/R^2. Принимая во внимание, что электрическое поле между пластинами сферического конденсатора неотличимо от поля точечного заряда, имеем $z/R^2 \approx q/\Delta R^2$. Итак, для заряда q получаем следующую оценку: $q \approx z(\Delta R/R)^2$. Таким образом, единичный заряд $z = 1$ вызывает перенос около 2 % электронов из внешнего облака во внутреннее. Это смещение заряда соответствует набору параметров Δ_L и Δ_R во втором ряду табл. 1.

Применим симметричные и асимметричные потенциальные ямы Лоренца для расчета сечений фотоионизации некоторых эндоэдральных атомов. В работе [8] представлен подход к фотоионизации эндоэдралов, который рассматривает проблему в приближении случайных фаз с обменом (RPAE), тем самым обобщая подход Хартри–Фока (HF – Hartree–Fock) путем включения в него существенной части электронных корреляций (см. [15]).

Однако в [8] монопольная поляризация не учитывается. Ее поправки должны быть четко видны уже в рамках HF. Вот почему здесь мы ограничиваемся HF-приближением. Особенностью фотоионизации эндоэдрального атома являются осцилляции в сечениях фотоионизации, широко известные как *резонансы пленения*. Сравнивая эти резонансы для двух типов потенциальных ям Лоренца, мы оценим роль монопольной поляризации оболочки C_{60} в этом процессе. Эти потенциалы мы должны добавить к атомному HF-гамильтониану, чтобы тем самым получить уравнение для электронов атома A, расположенного в центре оболочки C_{60}. Решения уравнения

$$[\hat{H}_0 + U(r)]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \tag{6}$$

где H_0 есть атомный гамильтониан HF,дают волновые функции начальных и конечных состояний электронов атома, захваченного фуллереновой оболочкой. Они используются в расчетах сечений фотоионизации. Результаты представлены на рис. 2–4.

Кривые на этих рисунках соответствуют набору параметров Δ_L и Δ_R из четвертого ряда табл. 1. Наборы параметров во втором и третьем рядах дают кривые, которые неотличимы от тех, что соответствуют симметричной потенциальной яме. Таким образом, монопольная поляризация оболочки C_{60} начинает влиять на фотоионизацию эндоэдрального атома со сдвигом примерно 15 % коллективизированных электронов. При этом сдвиге различия между кривыми для симметричного и асимметричного потенциалов имеют порядок толщины линии. Совпадение кривых свидетельствует об отсутствии влияния монопольной поляризации на фотоионизацию эндоэдрального атома[2)]. Таким образом, утверждение, приведенное в [9] о том, что статическую монопольную поляризацию оболочки C_{60} “нельзя игнорировать при фотоионизации эндоэдральных атомов вблизи порога”, совершенно неверно.

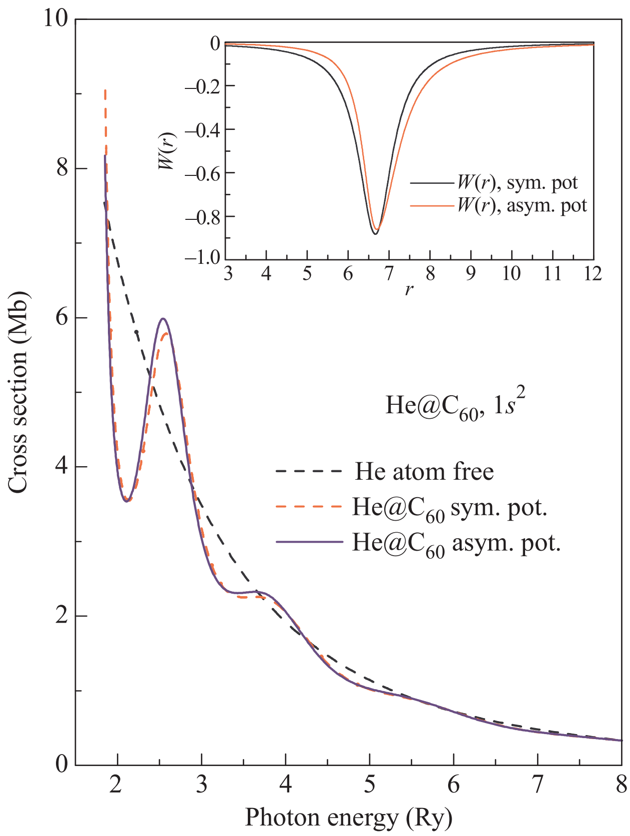

Рис. 2. (Цветной онлайн) Сечение фотоионизации атома He@C_{60} в зависимости от энергии фотона, и потенциал формы Лоренца (верх); sym. pot. есть симметричный потенциал Лоренца с $\Delta_L = 1.0$ и $\Delta_R = 1.0$; asym. pot. является асимметричным потенциалом с $\Delta_L = 0.7$ и $\Delta_R = 1.3$

3. В работе [9] рассматривается впервые, насколько нам известно, монопольная поляризация оболочки C_{60}. Чтобы описать этот эффект, была предложена

[2)] Отметим, что к тому же выводу мы пришли на примере другого потенциала $U(r)$ с неплоским дном [16].

Таблица 1. Заряды внутреннего (слева) и внешнего (справа) электронных облаков

Параметры Δ_L and Δ_R	Заряд левого крыла, %	Заряд правого крыла, %
$\Delta_L = 1.0$; $\Delta_R = 1.0$	45.7	54.3
$\Delta_L = 0.95$; $\Delta_R = 1.05$	48.2	51.8
$\Delta_L = 0.9$; $\Delta_R = 1.1$	50.8	49.2
$\Delta_L = 0.7$; $\Delta_R = 1.3$	61.2	38.8

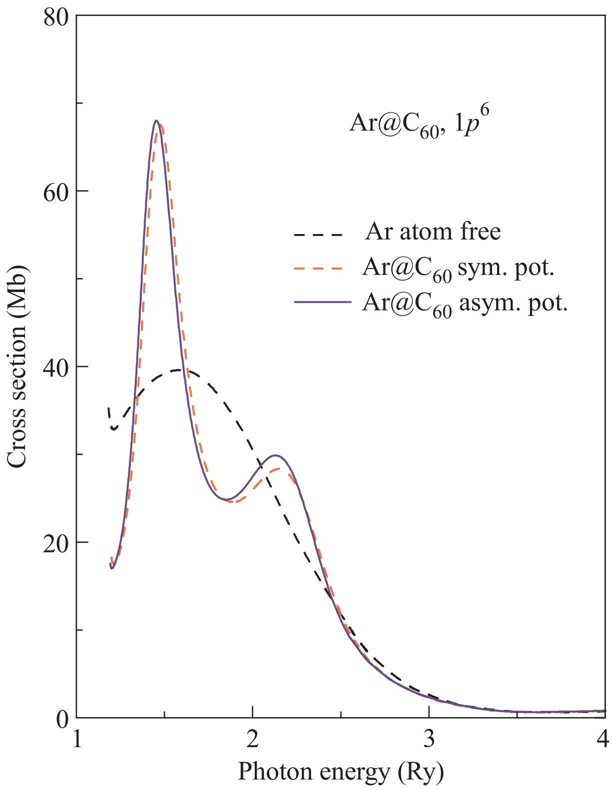

Рис. 3. (Цветной онлайн) Сечение фотоионизации атома Ar@C$_{60}$ в зависимости от энергии фотона. Обозначения такие же, как на рис. 2

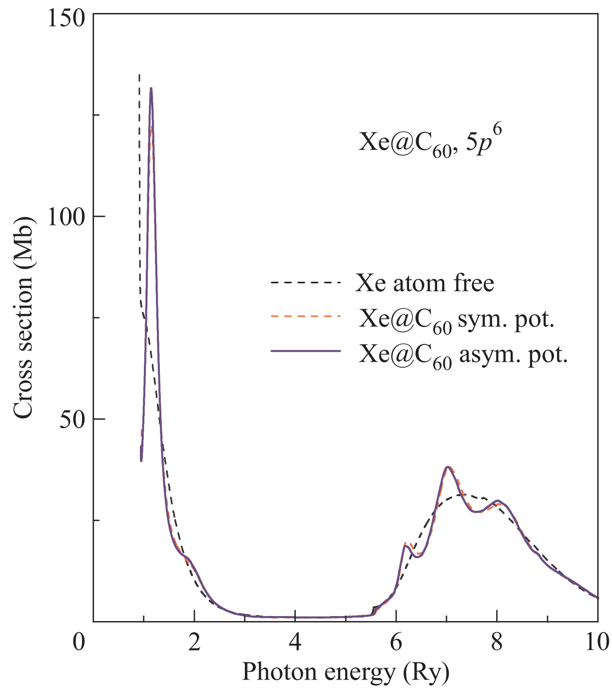

Рис. 4. (Цветной онлайн) Сечение фотоионизации Xe@C$_{60}$ в зависимости от энергии фотона. Обозначения такие же, как на рис. 2

модифицированная версия сферической прямоугольной потенциальной ямы:

$$U^*(r) = \begin{cases} \dfrac{\alpha}{r_0} - \dfrac{\alpha}{r_0 + \Delta r}, & \text{если } r \le r_0; \\ -U_0 + \dfrac{\alpha}{r} - \dfrac{\alpha}{r_0 + \Delta r}, & \text{если } r_0 \le r \le r_0 + \Delta r; \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \tag{7}$$

В этой формуле r_0 обозначает внутренний радиус фуллерена, Δr – его толщину, а U_0 – глубину потенциальной ямы C$_{60}$. Параметр α может изменяться от 0 до 1, причем значения, $\alpha = 0$ или 1, соответствуют тому, что статическая монопольная поляризация полностью игнорируется или включается соответственно.

Используя ступенчатую функцию Хевисайда (5), перепишем формулу (7) в следующем виде

$$U^*(r) = \left(\frac{\alpha}{r_0} - \frac{\alpha}{r + \Delta r}\right)\Theta(r - r_0) - \\ - \left(U_0 - \frac{\alpha}{r} + \frac{\alpha}{r_0 + \Delta r}\right)\Theta(r_0 - r)\Theta(r - r_0 - \Delta r). \tag{8}$$

Причины, по которым мы заменили ступенчатую функцию (7) диффузными потенциалами (8), станут ясны позже.

Применим уравнение Пуассона (3) к потенциальной функции (7), чтобы понять, какому распределению заряда соответствует эта потенциальная яма. Начнем со случая, который соответствует пространственному распределению плотностей электрических зарядов, когда статической поляризацией оболочки пренебрегается (подробности расчетов приведены в [17]). На рисунке 5 представлена функция распределения заряда $Q(r) = 4\pi\rho r^2$. Согласно рис. 5, две кон-

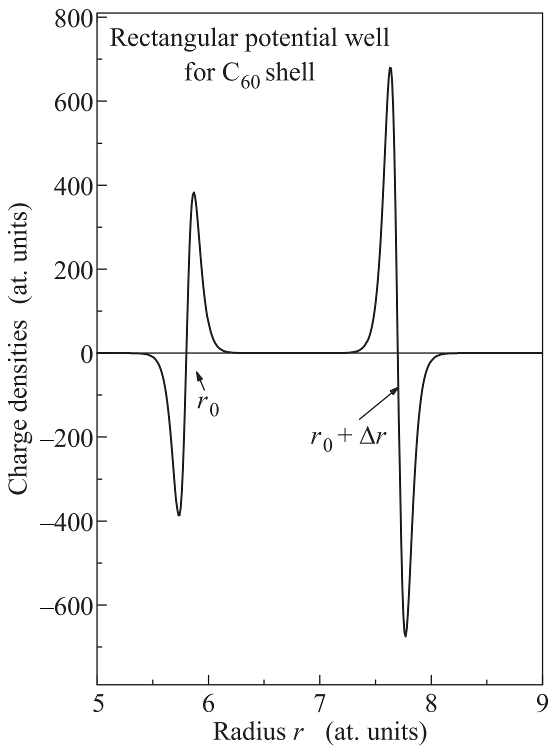

Рис. 5. (Цветной онлайн) Распределение зарядов в оболочке C_{60} при $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$. Параметры потенциальных ям такие же, как в работе [9], а именно: $r_0 = 5.8$, $\Delta r = 1.9$ ат. ед., $U_0 = 8.2$ эВ $= 0.301$ ат. ед. Параметр диффузности $\eta = 0.05$. Кривые при обоих значениях α совпадают друг с другом

центрические сферы с радиусами $r = r_0$ и $r = r_0 + \Delta r$, с двойными электрическими слоями, создают радиальный, неизмененной глубины потенциал прямоугольной ямы. Толщина слоев (при $\eta = 0.05$) составляет около 0.05 ат. ед. Обе сферы электрически нейтральны. На внутренней поверхности сферы находится около 36 % положительных и отрицательных зарядов. Остальные заряды оболочки C_{60} локализованы на поверхности внешней сферы. Для потенциальной ямы без диффузности ($\eta = 0$) слои зарядов имеют нулевую толщину. Функция равна нулю везде, кроме точек $r = r_0$ и $r_0 + \Delta r$, в бесконечно малой окрестности которых плотности заряда бесконечно отрицательны и положительны соответственно. Представленное на рис. 5 пространственное распределение электрических зарядов типа "луковицы" создает прямоугольный потенциал, когда монопольная поляризация C_{60} отсутствует.

Повторяя ту же процедуру с потенциальной функцией (8), мы приходим к тому же распределению заряда, что и в случае $\alpha = 0$. Причина такого неожиданного, на первый взгляд, результата заключается в следующем. Применим лапласиан Δ из уравнения Пуассона (3) к дополнительным слагаемым в уравнении (7). Для первой строки мы имеем

$$\Delta\left(\frac{\alpha}{r_0} - \frac{\alpha}{r_0 + \Delta r}\right) \equiv 0. \qquad (9)$$

Для второй строки, поскольку Кулоновский потенциал α/r является функцией Грина уравнения Пуассона [14], имеем

$$\Delta\left(\frac{\alpha}{r} - \frac{\alpha}{r_0 + \Delta r}\right) = -4\pi\alpha\delta(\mathbf{r}). \qquad (10)$$

В правой части (10) снова возникает нуль, потому что в этой строке нас интересуют значения $r \neq 0$. Таким образом, дополнительные члены в потенциальной функции (7) не приводят к изменениям во взаимном расположении электрических зарядов в оболочке C_{60}, а также к статической монопольной поляризации оболочки фуллерена электрическим зарядом, появляющимся в центре оболочки. Поэтому возникает вопрос: какова причина значительного изменения сечения фотоионизации, предсказанного в [9, 10]? Ответ заключается в том, что авторы [9, 10] просто ввели новый произвольный параметр (в дополнение к старым произвольным параметрам r_0 и Δr) в обычный прямоугольный потенциал. Нет оснований считать параметры r_0 и Δr потенциала модели (7), приведенные в подписи к рис. 5, хоть в какой-то мере оправданными. Заметим также, что анализ статей, в которых используется прямоугольный потенциал, показывает, что ни одна из них не содержит обоснования выбора параметров.

4. Мы обнаружили интересную особенность фотоионизации эндоэдрала, состоящую в том, что монопольная поляризация его оболочки, возникающая вследствие фотоионизации внутреннего атома, не влияет на сечение этого процесса. Это означает, что найден довольно редкий пример "маскировки" потенциала. Неожиданный результат получен, разумеется, в рамках довольно грубой модели, описывающей электронную оболочку фуллеренов. Однако в ходе исследования у нас возникло твердое убеждение, что это модельно-независимый результат, полностью основанный на малости атомного радиуса по сравнению с радиусом C_{60}.

Проблема с модельным описанием формы и параметров потенциала оболочки фуллерена в некоторой степени аналогична проблеме ядерной физики, где потенциал для нуклон-нуклонного взаимодействия неизвестен. Чтобы описать магические ядра, выбираются сложные формы потенциалов (например, потенциал "винной бутылки" Эльзассера или потенциал "мексиканской шляпы"), зависящие от большого количества параметров. На основании обширных экспериментальных данных стало возможным моделировать все магические числа ядер [18, 19]. Мы надеемся, что более подробные экспериментальные исследования самой C_N и эндоэдральных систем $A@C_N$ откроют новый путь к модификации моделей оболочек C_N, и сделают поиск модельного потенциала C_{60} более конструктивным, чем простое увеличение числа произвольных подгоночных параметров.

А. С. Балтенков выражает благодарность за поддержку Узбекского фонда ОТ-Ф2-46.

1. W. Jaskolski, Phys. Rep. **27**, 1 (1996).
2. M. Ya. Amusia, A. S. Baltenkov, and B. G. Krakov, Phys. Lett. A **243**, 99 (1998).
3. V. K. Dolmatov, in *Theory of Confined Quantum Systems: Part Two*, ed. by J. R. Sabin and E. Brändas, Advances in Quantum Chemistry, Academic Press, N.Y. (2009), v. 58, p. 13.
4. M. J. Puska and R. M. Nieminen, Phys. Rev. A **47**б 1181 (1993).
5. K. Yabana and G. F. Bertsch, Phys. Scr. **48**, 633 (1993).
6. M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, JETP Lett. **101**(7), 503 (2015).
7. V. K. Dolmatov, M. Ya. Amusia, and L. V. Chernysheva, Phys. Rev. A **95**, 012709 (2017).
8. M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, JETP Lett. **109**(6), 355 (2019).
9. V. K. Dolmatov and S. T. Manson, Phys. Rev. A **82**, 023422 (2010).
10. V. K. Dolmatov, e-print arXive: 1809.02898 (2018).
11. V. K. Ivanov, G. Y. Kashenock, R. G. Polozkov, and A. V. Solov'yov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **34**, L669 (2001).
12. A. S. Baltenkov, S. T. Manson, and A. Z. Msezane, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **48**, 185103 (2015).
13. L. L. Lohr and S. M. Blinder, Chem. Phys. Lett. **198**, 100 (1992).
14. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*, Pergamon Press, Oxford, N.-Y., Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt (1971).
15. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, and V. G. Yarzhemsky, *Handbook of theoretical Atomic Physics, Data for photon absorption, electron scattering, and vacancies decay*, Springer, Berlin (2012), p. 812.
16. M. Ya. Amusia and A. S. Baltenkov, e-print arXive: 1905.00740 (2019).
17. M. Ya. Amusia and A. S. Baltenkov, e-print arXive: 1901.04007 (2019).
18. M. G. Mayer and H. D. Jensen, *Elementary Theory of Nuclear Shell Structure*, Wiley, N.Y. (1955).
19. E. Feenberg, *Shell Theory of the Nucleus*, NJ, Princeton University Press, Princeton (1955).