

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 фуллера C_N , удалось рассчитать это изменение, которое возникает вследствие ее монополярной 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 монополярной 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 монополярной поляризации фуллереновой оболочки. Неожиданно обнаружилось, что монополярная 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 исполь-

зовать, однако, другое, заметно более реалистичное 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 А или даже небольшие молекулы. Силы Ван-дер-Ваальса, действующие между оболочкой А и C_{60} , слишком слабы, чтобы исказить электронную структуру как А, так и C_{60} , а поэтому эти структуры в $A@C_{60}$; можно считать независимыми друг от друга. При фотоионизации атома А 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 острова. 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 монополярная поляризация под действием электрического заряда внутри полости C_{60} . Действительно, при фотоионизации атома А, помещенного в центр оболочки C_{60} , возникает дополнительный положительный заряд атомного острова. 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 индуцированно 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 монополярной поляризации C_{60} .

В работе [9] (тот же подход недавно был повторен в [10]) анализируется влияние монополярной 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 монополярная 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 острова фуллереновой оболочки. Далее оценим относительное число электронов, втянутых к центру острова 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 монополярной 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 соответ-

ствуует экспериментальному электронному средству 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 $\rho(r)$

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho, \quad (2)$$

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

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

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 монополярной поляризации его оболочки. Для этого заменим постоянную толщину Δ в (1) следующим выражением

$$\Delta(r) = \Delta_L + (\Delta_R - \Delta_L)\Theta(R - r). \quad (4)$$

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

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

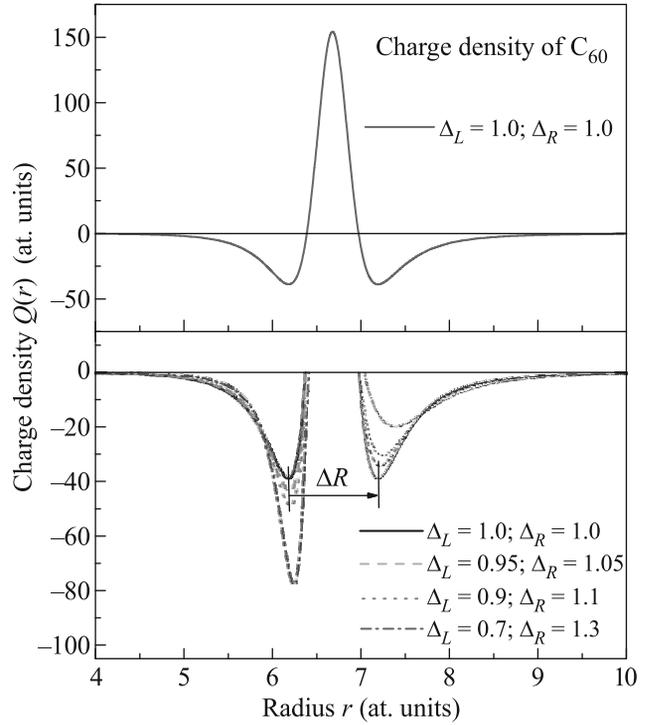


Рис. 1. (Цветной онлайн) Пространственное распределение электрического заряда потенциала пузырьково-го типа (1) в форме Лоренца с параметрами $R = 6.665$, $\Delta = \Delta_L = \Delta_R = 1.0$ и $U_{\max} = 0.4415$ (верхняя часть). Распределение заряда электронов для разных Δ_L и Δ_R из табл. 1 (нижняя 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 неотлично 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 (РПАЕ), тем самым обобщая подход Хартри–Фока (HF – Hartree–Fock) путем включения в него существенной части электронных корреляций (см. [15]).

Однако в [8] монополярная 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 монополярной поляризации оболочки C_{60} в этом процессе. Эти потенциалы мы должны добавить к атомному HF-гамильтониану, чтобы тем самым получить уравнение для электронов атома А, расположенного в центре оболочки C_{60} . Решения уравнения

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

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 соответ-

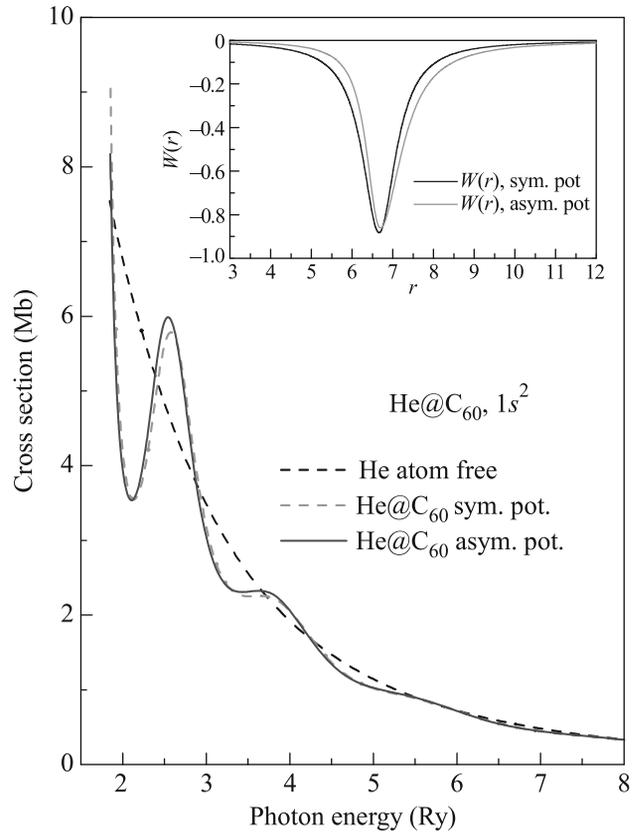


Рис. 2. (Цветной онлайн) Сечение фотоионизации атома $He@C_{60}$ в зависимости от энергии фотона, и потенциал формы Лоренца (верх); sym. pot. есть симметричный потенциал Лоренца с $\Delta_L = 1.0$ и $\Delta_R = 1.0$; asym. pot. является асимметричным потенциалом с $\Delta_L = 0.7$ и $\Delta_R = 1.3$

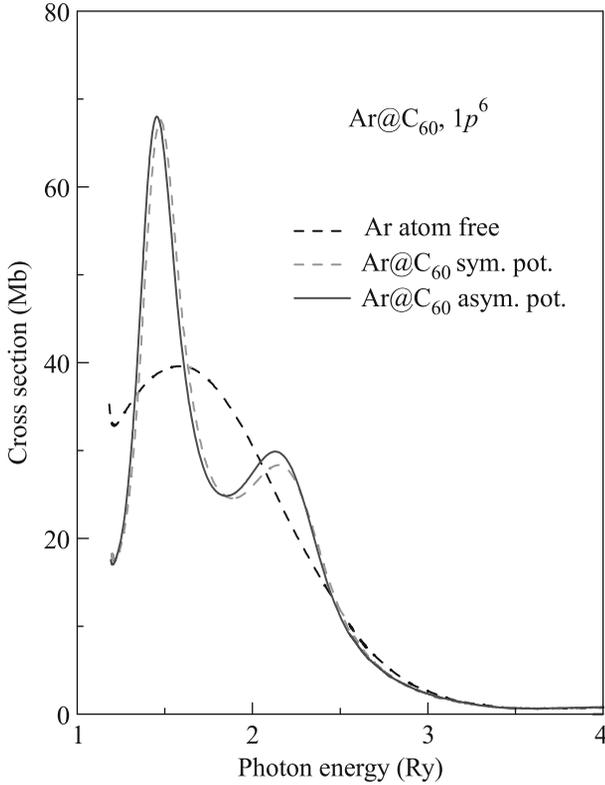
ствуют симметричной потенциальной яме. Таким образом, монополярная поляризация оболочки C_{60} начинает влиять на фотоионизацию эндоэдрального атома со сдвигом примерно 15 % коллективизированных электронов. При этом сдвиге различия между кривыми для симметричного и асимметричного потенциалов имеют порядок толщины линии. Совпадение кривых свидетельствует об отсутствии влияния монополярной поляризации на фотоионизацию эндоэдрального атома²⁾. Таким образом, утверждение, приведенное в [9] о том, что статическую монополярную поляризацию оболочки C_{60} “нельзя игнорировать при фотоионизации эндоэдральных атомов вблизи порога”, совершенно неверно.

3. В работе [9] рассматривается впервые, насколько нам известно, монополярная 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

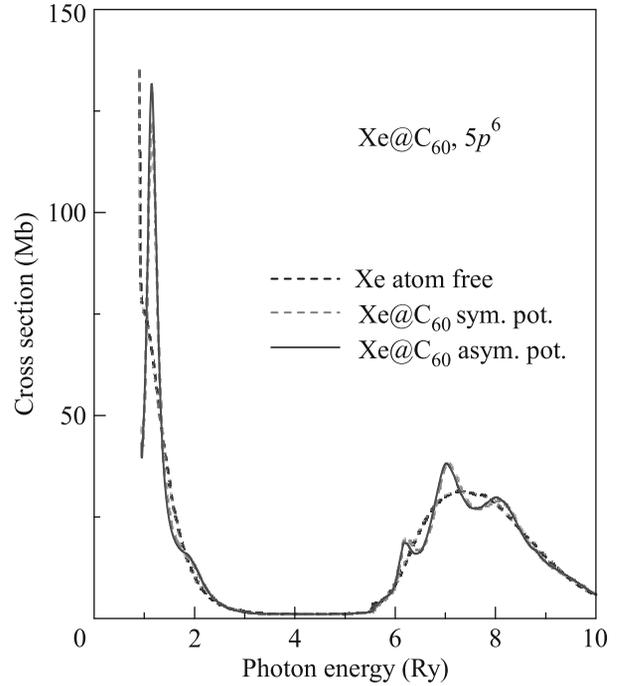
Параметры Δ_L and Δ_R	Заряд левого крыла, %	Заряд правого крыла, %
$\Delta_L = 1.0; \Delta_R = 1.0$	45.7	54.3
$\Delta_L = 0.95; \Delta_R = 1.05$	48.2	51.8
$\Delta_L = 0.9; \Delta_R = 1.1$	50.8	49.2
$\Delta_L = 0.7; \Delta_R = 1.3$	61.2	38.8

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

модифицированная версия сферической прямоугольной потенциальной ямы:

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

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 монополярная поляризация полностью игнорируется или включается соответственно.

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

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

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

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-

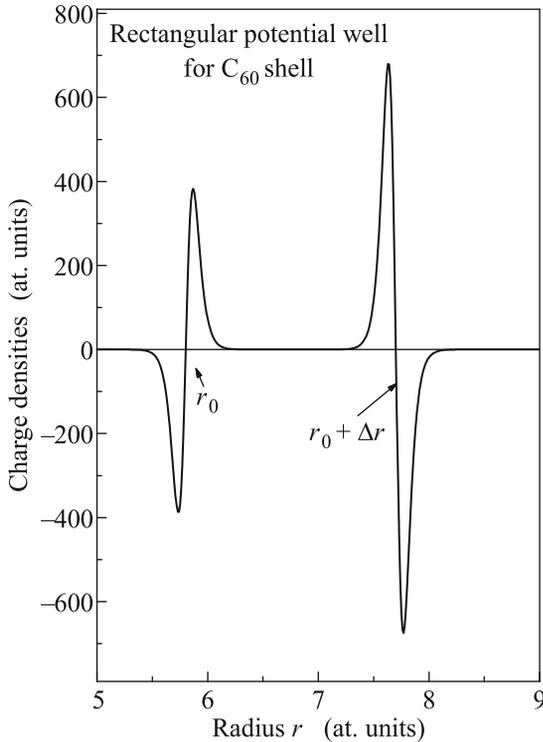


Рис. 5. (Цветной онлайн) Распределение зарядов в оболочке C_{60} при $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$. Параметры потенциальных ям такие же, как в работе [9], а именно: $r_0 = 5.8$, $\Delta r = 1.9$ ат. ед., $U_0 = 8.2$ эВ = 0.301 ат. ед. Параметр диффузности $\eta = 0.05$. Кривые при обоих значениях α совпадают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

центрические сферы с радиусами $r = r_0$ и $r = r_0 + \Delta r$, с двойными электрическими слоями, создают радиальный, неизменной 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 монополярная 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

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

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

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

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 монополярной 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 монополярная 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 потенци-

ал “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 эндодральных 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 **476** 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 arXiv: 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 arXiv: 1905.00740 (2019).
17. M. Ya. Amusia and A. S. Baltenkov, e-print arXiv: 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).