

# Модификация эндоэдрального потенциала после мгновенной ионизации внутреннего атома

*M. Я. Амусья<sup>+\*1)</sup>, A. С. Балтенков<sup>×</sup>, Л. В. Чернышева\**

<sup>+</sup>*Институт физики Рака, Еврейский университет, 91904 Иерусалим, Израиль*

<sup>\*</sup>*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, 194021 С.-Петербург, Россия*

<sup>×</sup>*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 А. 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 Не, 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 А. 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 С 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 реалистическое усреднение. А именно, сначала “размажем” положительный заряд по сфере радиуса  $R$ , учитывая, что все ядра атомов углерода расположены на разных 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  $r = R$ .

<sup>1)</sup>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 искажить 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 фуллера в целом смешаются 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 фуллера, имеет место и ее монопольная 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 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 фуллера  $U(r)$  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, изменения 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 Не, 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  $E_s = -2.65 \text{ эВ}$ , 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 фуллера  $R$  в довольно тонкой сферической оболочке с толщиной  $\Delta$  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-

ствует экспериментальному электронному сродству молекулы C<sub>60</sub>.

Соотношение  $U(r) = -\varphi(r)$  позволяет связать выражение (1) с потенциалом электрического поля  $\varphi(r)$ , которым оболочка C<sub>60</sub> 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<sub>60</sub>, 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 потенциальному (1), мы получаем пространственное распределение электрического заряда  $Q(r) = 4\pi r \rho^2$ , 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<sub>60</sub><sup>4+</sup>, а внутренний и внешний слои отображают отрицательно заряженные облака коллективизированных электронов. Общий заряд оболочки C<sub>60</sub> 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<sub>60</sub>.

Покажем, что, изменения параметр  $\Delta$  левого и правого крыльев потенциальной ямы (1), мы можем описать переход электронов из внешнего электронного облака во внутреннее через жесткий положительный остов фуллерена C<sub>60</sub> и проанализировать различные степени монопольной поляризации его оболочки. Для этого заменим постоянную толщину  $\Delta$  в (1) следующим выражением

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

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

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

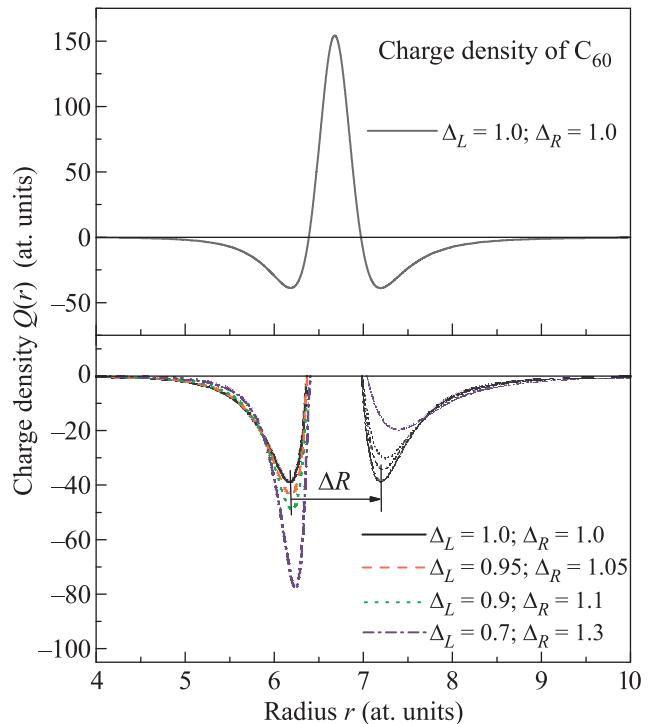


Рис. 1. (Цветной онлайн) Пространственное распределение электрического заряда потенциала пузырькового типа (1) в форме Лоренца с параметрами  $R = 6.665$ ,  $\Delta = \Delta_L = \Delta_R = 1.0$  и  $U_{\max} = 0.4415$  (верхняя часть). Распределение заряда электронов для разных  $\Delta_L$  и  $\Delta_R$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

в которой параметр диффузности  $\eta$  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 сferах 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  $\Delta_L$  и  $\Delta_R$  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

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

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  $\Delta_L$  и  $\Delta_R$  из четвертого ряда табл. 1. Наборы параметров во втором и третьем рядах дают кривые, которые неотличимы от тех, что соответ-

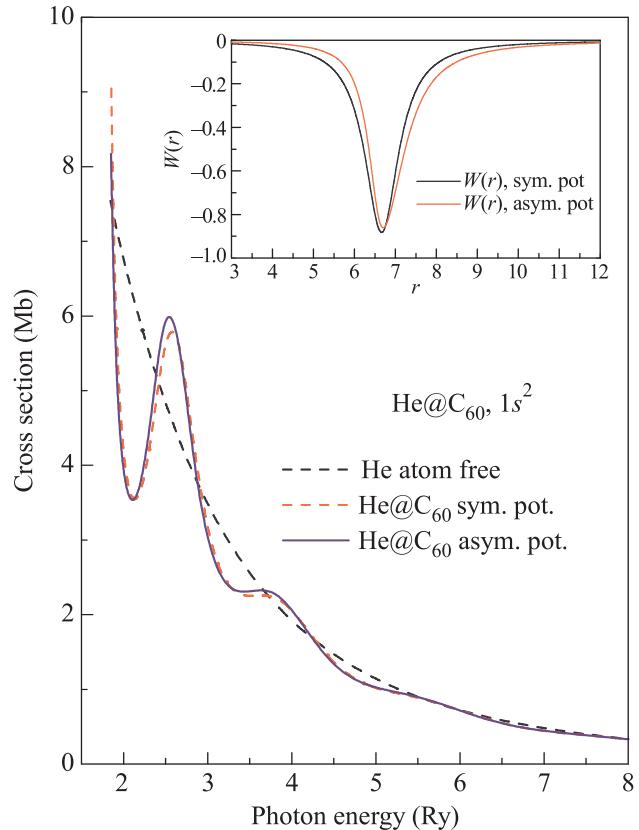


Рис. 2. (Цветной онлайн) Сечение фотоионизации атома  $\text{He}@\text{C}_{60}$  в зависимости от энергии фотона, и потенциал формы Лоренца (верх); sym. pot. есть симметричный потенциал Лоренца с  $\Delta_L = 1.0$  и  $\Delta_R = 1.0$ ; asym. pot. является асимметричным потенциалом с  $\Delta_L = 0.7$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

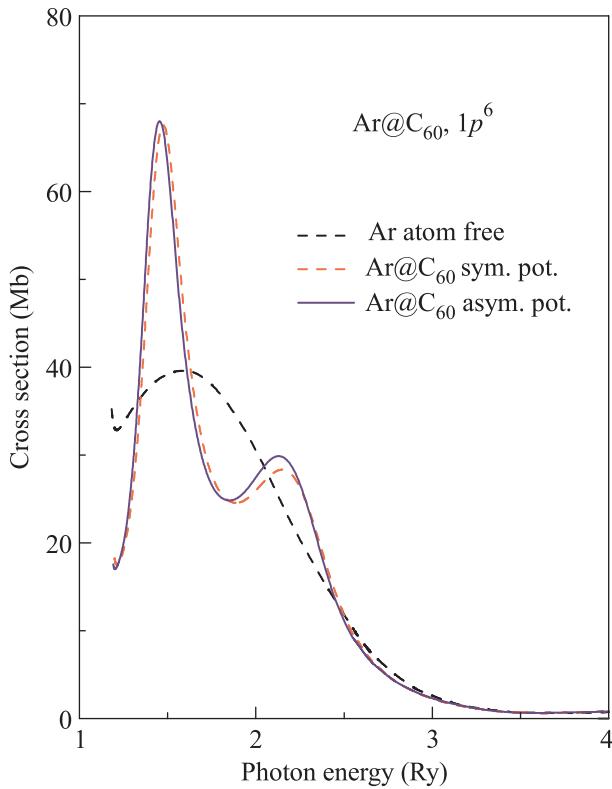
ствуют симметричной потенциальной яме. Таким образом, монопольная поляризация оболочки  $C_{60}$  начинает влиять на фотоионизацию эндоэдрального атома со сдвигом примерно 15 % коллективизированных электронов. При этом сдвиге различия между кривыми для симметричного и асимметричного потенциалов имеют порядок толщины линии. Совпадение кривых свидетельствует об отсутствии влияния монопольной поляризации на фотоионизацию эндоэдрального атома<sup>2)</sup>. 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.

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

<sup>2)</sup> 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

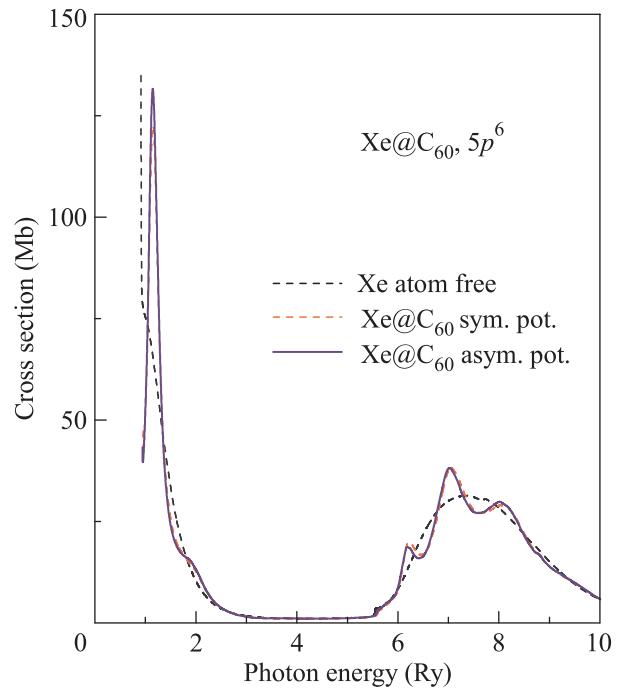
Параметры $\Delta_L$ and $\Delta_R$	Заряд левого крыла, %	Заряд правого крыла, %
$\Delta_L = 1.0; \Delta_R = 1.0$	45.7	54.3
$\Delta_L = 0.95; \Delta_R = 1.05$	48.2	51.8
$\Delta_L = 0.9; \Delta_R = 1.1$	50.8	49.2
$\Delta_L = 0.7; \Delta_R = 1.3$	61.2	38.8

Рис. 3. (Цветной онлайн) Сечение фотоионизации атома  $\text{Ar}@\text{C}_{60}$  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,  $\Delta r$  – его толщину, а  $U_0$  – глубину потенциальной ямы  $\text{C}_{60}$ . Параметр  $\alpha$  может изменяться от 0 до 1, причем значения,  $\alpha = 0$  или 1, соответствуют тому, что статическая монопольная поляризация полностью игнорируется или включается соответственно.

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

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

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

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-

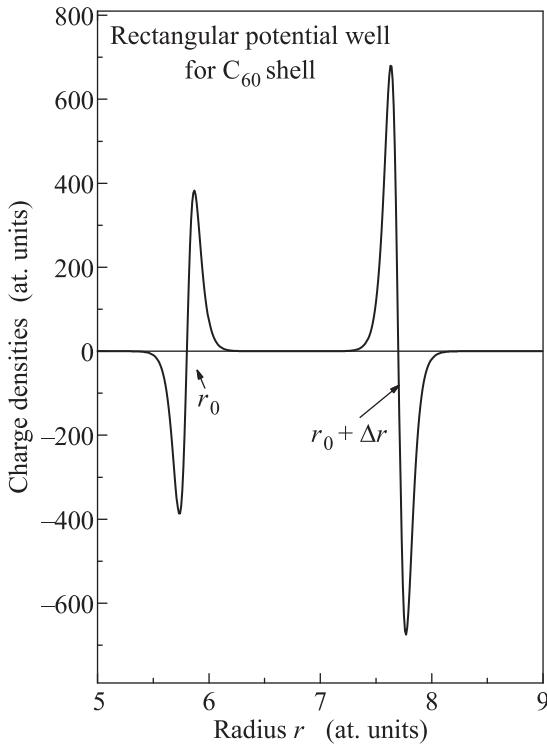


Рис. 5. (Цветной онлайн) Распределение зарядов в оболочке  $C_{60}$  при  $\alpha = 0$  и  $\alpha = 1$ . Параметры потенциальных ям такие же, как в работе [9], а именно:  $r_0 = 5.8$ ,  $\Delta r = 1.9$  ат. ед.,  $U_0 = 8.2$  эВ = 0.301 ат. ед. Параметр диффузности  $\eta = 0.05$ . Кривые при обоих значениях  $\alpha$  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  $\Delta$  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  $\alpha/r$  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 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  $\Delta r$ ) в обычный прямоугольный потенциал. Нет оснований считать параметры  $r_0$  и  $\Delta r$  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 потенци-

ал “мексиканской шляпы”), зависящие от большого количества параметров. На основании обширных экспериментальных данных стало возможным моделировать все магические числа ядер [18, 19]. Мы на-деемся, что более подробные экспериментальные исследования самой  $C_N$  и эндоедральных 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.

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. Yarzhevsky, *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).