

Генерация кластеров лития в плазменном потоке гелия

© А.В. Попов, В.А. Попов

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
656038 Барнаул, Россия
e-mail: Popov.Barnaul@mail.ru

Поступило в Редакцию 12 сентября 2018 г.

В окончательной редакции 2 февраля 2019 г.

Принято к публикации 11 марта 2019 г.

Рассмотрено формирование кластеров лития в гелиевом потоке в рамках метода, учитывающего ширину энергетических уровней. Показано, что атомы лития в плазменном потоке инертного гелия образуют кластеры, состоящие только из лития. Кроме кластеров лития с межатомными расстояниями, соответствующими межатомным расстояниям равновесного состояния, обнаружены долгоживущие возбуждения кластеров с межатомными расстояниями 13 боровских радиусов. Однако если снять возбуждения, то такие системы переходят в основное состояние, либо распадаются. Кроме этого обнаружены системы Li–He, долгоживущие в условиях внешних возбуждений, но быстро теряющие гелий при снятии этих возбуждений.

Ключевые слова: малые кластеры, литий, гелий, электронная структура.

DOI: 10.21883/JTF.2019.08.47887.335-18

Введение

Благодаря низкому отрицательному потенциалу и высокой реакционной способности литий оказался наиболее подходящим материалом для получения источников тока с максимальной теоретической удельной емкостью и высокой удельной энергией. Это, в свою очередь, способствовало повсеместному внедрению литий-ионных аккумуляторов. Однако уже сегодня ведутся активные исследования в области создания других типов литиевых аккумуляторов [1–4]. Интересны работы по интеркаляции кластеров лития Li_{12} в C_{60} [5,6]. В работе [7] показано, что малые кластеры лития (в частности, Li_3) могут оказаться более эффективными при создании анода литий-ионных аккумуляторов, нежели отдельные атомы. Ввиду высокой реакционной способности кластеров возникает ряд вопросов, касающихся их стабилизации, времени жизни и способов изолирования друг от друга. Более того, как известно, физико-химические свойства кластеров могут существенно измениться после добавления даже одного атома [8]. В то же время кластеры являются промежуточной формой между веществом и атомами этого вещества, что делает интересным изучение новых форм кластеров и с фундаментальной точки зрения.

В настоящее время разработано большое количество методов синтеза малых кластеров различных веществ [9–11]. Наиболее перспективным представляется использование атомных пучков, которые обеспечивают высокую скорость генерации кластеров требуемой структуры и размеров, а также их быструю доставку к месту получения материала с заранее заданными свойствами [12]. Возникающая при этом цепь сложных неравновесных процессов сильно зависит от внешних условий и режимов генерации, для управления которыми часто используется инертный газ в качестве буферного [13,14]. Для подавления агрегации или диссоциации кластеров

можно использовать лазерное излучение [15]. Однако по мере усложнения реакций синтеза, традиционные методы проб и ошибок становятся более неэффективными, возникает потребность в теоретическом исследовании процессов, происходящих в сильно-неравновесных атомных пучках.

В настоящей работе рассмотрено формирование кластеров лития в гелиевом потоке в рамках теоретического метода описания электронной структуры, учитывающего ширину энергетических уровней [16].

Метод расчета

На сегодняшний день существует несколько подходов к описанию возбуждений. Один из способов описания возбуждений заключается в использовании многочастичной теории возмущений, позволяющей, в принципе, учесть все взаимодействия между частицами [17]. Данная теория дает адекватные результаты в случае малых возмущений. Если же возмущения велики, то возникает ряд трудностей технического характера. При этом остается открытым вопрос и об учете сплошного спектра в задаче на собственные значения энергии электронов. До сих пор отсутствуют четкие критерии, позволяющие ограничить бесконечный набор дискретных состояний и континуум.

Одной из простейших моделей многочастичной теории твердого тела является модель свободного электронного газа со взаимодействием между электронами [18]. Следует отметить, что Куинн, Феррель и Риччи впервые изучили электронную динамику, используя собственно-энергетический формализм многочастичной теории [19,20]. В этом формализме скорость затухания возбужденного состояния (обратное время жизни) определяется мнимой частью собственной энергии электрона. В рамках этого формализма эволюция системы

описывается при помощи одночастичной функции Грина [21]. Для функции Грина системы с обычным кулоновским взаимодействием между электронами существует строгое уравнение движения, включающее двухчастичную функцию Грина [22], однако решение этого уравнения в настоящее время невозможно. Формально точная система уравнений, позволяющая получить самосогласованное решение для функции Грина, была получена Хедином. Тем не менее уравнения Хедина крайне сложны, их точное решение невозможно даже для свободного электронного газа.

Одним из простейших для программирования и конкретных расчетов методов является GW-метод [23]. Однако первый итерационный шаг, приводящий к GW-приближению и его модификациям, не дает надежного описания электронной структуры для многих материалов. Второй итерационный шаг приводит, как правило, к еще меньшему согласию результатов вычислений с экспериментальными данными. Трудоемкая реализация этих подходов остается основным сдерживающим фактором для их широкого применения.

Теорема Хоэнберга–Кона [24] позволила обосновать теорию функционала электронной плотности для точного описания свойств основного состояния системы взаимодействующих частиц. На основе этой теории были разработаны несложные в реализации методы расчета электронной структуры различных материалов. Возникающие здесь трудности определяются в основном тем, что вид точного функционала не известен [25]. Современные попытки построить *ab initio* функционал не дают ожидаемых результатов вычислений [26]. Многоконфигурационное приближение и здесь дает результаты, лучше описывающие экспериментальные данные [27]. Однако расчеты, выполненные в рамках этого чрезвычайно слабо сходящегося приближения, оказываются настолько трудоемкими, что применяются для вычисления свойств систем с небольшим числом электронов [28].

На наш взгляд, наиболее глубокое и полное понимание процессов образования кластеров в неравновесных условиях можно получить, опираясь на теорию несамосопряженных операторов, собственные значения которых являются комплексными [29]. Мнимая часть собственных значений энергии имеет смысл ширины уровней энергии и в соответствии с соотношением неопределенностей обратно пропорциональна времени жизни возбуждения. В случае орбитальных возбуждений в атоме собственные значения оператора момента импульса в общем случае должны быть комплексными с квантовыми числами, равными $l + x + iy$, где l , как обычно, пробегает целочисленные значения [30]. Тогда область изменения комплексной добавки $x + iy$ может быть ограничена значениями $|x| < 0.5$ и $|y| < 0.5$. Причем параметр x отвечает за штарковский сдвиг энергетических уровней при $y = 0$, а параметр y — за уширение этих уровней при $x = 0$. Перебирая все возможные значения $|x| < 0.5$ и $|y| < 0.5$, в процессе поиска самосогласованных решений уравнения Шредингера можно проследить по минимуму полной энергии

возбужденного атома и за его спектральными характеристиками, обусловленными орбитальными переходами электронов [31–34]. Подробное описание схемы реализации данной идеи изложено в обзоре [35]. Воспользуемся этой схемой для исследования энергетической структуры электронов и полной энергии гибридных малых кластеров.

Для описания кластеров представим полную энергию всех электронов в виде суммы [36]:

$$\varepsilon_T = \varepsilon_K + \varepsilon_N + \varepsilon_E + \varepsilon_C + \varepsilon_X + \varepsilon_L, \quad (1)$$

содержащей кинетическую энергию электронов ε_K , потенциальную энергию кулоновского электрон-ядерного взаимодействия ε_N , потенциальную энергию кулоновского взаимодействия электронов ε_E , потенциальную энергию кулоновского взаимодействия ядер ε_C , энергию обменного взаимодействия электронов ε_X . Последнее слагаемое в выражении для полной энергии (1), имеющее смысл среднего значения оператора возбуждения кинетической энергии, представим в виде

$$\varepsilon_L = \sum_i^{occ} \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{u + iv}{r^2} \right) \psi_i(\mathbf{r}) d^3 r, \quad (2)$$

где $u = x(x + 2l + 1) - y^2$, $v = y(2x + 2l + 1)$.

Разложим волновую функцию по полному набору функций $\{\varphi_n(r)\}$:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{j,n} C_{ij} (\mathbf{S}^{-1/2})_{jn} \varphi_n(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Здесь \mathbf{S} — матрица интегралов перекрытия — отлична от единичной, если функции $\varphi_n(\mathbf{r})$ не ортонормированы. В качестве $\varphi_n(\mathbf{r})$ выберем функции гауссового типа [37]:

$$\varphi_n(\mathbf{r}) = \left(\frac{2\alpha_n}{\pi} \right)^{3/4} \exp(-\alpha_n |\mathbf{r} - \mathbf{a}_n|^2), \quad (4)$$

где \mathbf{a}_n — вектор, указывающий положение атома относительно выбранной системы координат. Отметим, что функции p -, d -, f -, ... симметрии легко получить через функции s -симметрии (4) дифференцированием по компонентам вектора \mathbf{a}_n .

Необходимым условием существования минимума функционала полной энергии (1) является обращение в нуль его первой вариации. В схеме Рутана решение этой задачи сводится к отысканию вариационных коэффициентов C_{ij} , входящих в (3). Система уравнений, полученная таким образом, была впервые реализована на примере бериллия [38]. Отметим лишь, что выражение для полной энергии кластера представимо через матричные элементы в виде

$$\varepsilon_T = \sum_{n,m} (K_{nm} + N_{nm} + L_{nm} + F_{nm}) U_{nm} + \varepsilon_C, \quad (5)$$

с матричными элементами

$$U_{nm} = \sum_k^{occ} C_{ki}^+ C_{kj} \sum_{i,j} (\mathbf{S}^{-1/2})_{in} (\mathbf{S}^{-1/2})_{jm}, \quad (6)$$

$$F_{nm} = K_{nm} + N_{nm} + L_{nm} + \sum_{i,j} (2E_{nmi j} - E_{nim j}) U_{ij}, \quad (7)$$

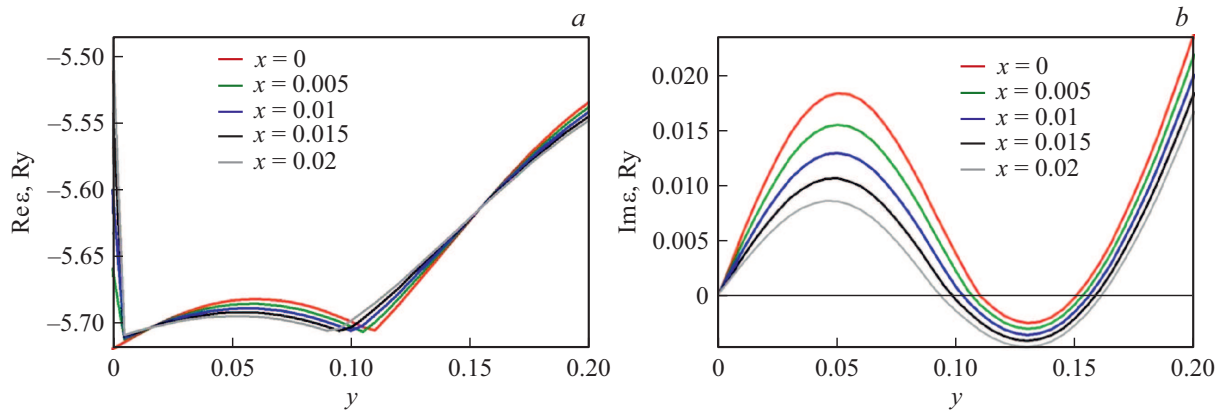


Рис. 1. Зависимости действительной части полной энергии $\text{Re } \varepsilon$ (а) и мнимой части полной энергии $\text{Im } \varepsilon$ (б) атома гелия от параметра возбуждения y при $x = 0, 0.005, 0.01, 0.015, 0.02$.

необходимыми для самосогласованного поиска решений алгебраической проблемы на собственные значения в матричной форме:

$$\mathbf{FC} = \varepsilon \mathbf{SC}, \quad (8)$$

где ε — диагональная матрица собственных значений, \mathbf{C} — матрица собственных векторов, \mathbf{F} — матрица с элементами (7), \mathbf{S} — матрица интегралов перекрытия.

Отметим, несмотря на то что неэрмитова квантовая механика в последние годы применяется для описания широкого спектра различных систем, вплоть до биологических [39], при исследовании электронной структуры вещества несамосопряженные операторы не получили должного распространения. В то же время их применение позволяет проследить за изменениями спектральных характеристик открытой системы, обусловленными возбуждениями электронов, и оценить время жизни самого возбуждения в рамках единого подхода. Дело в том что при решении уравнения Шредингера для кластеров с учетом орбитальных возбуждений, собственные значения неэрмитового оператора энергии в общем случае являются комплексными, представимыми в виде $E_n + i\Gamma_n$. Здесь мнимая часть Γ_n — ширина спектральной линии с энергией E_n , имеющая смысл вероятности распада одноэлектронного возбуждения, обратно пропорциональна времени жизни состояния с энергией E_n . Основное же состояние в этом приближении соответствует Хартри–Фоковскому.

В настоящей работе мы применили вышеописанную идею для вычисления энергетической структуры атомных пучков лития в потоке, содержащем гелий.

Результаты расчета и обсуждение

Задачу (8) мы решали численно в базисе функций гауссового типа (4), используя 18 функций в разложении по $l = 0$ и 12 функций в разложении по $l = 1$. Оценки показали, что базис такой длины вполне пригоден при решении уравнений (8) методом Рутана для лития и гелия, если $|x| < 0.03$ и $|y| < 0.03$, так как увеличение

длины этого базиса не меняет требуемой точности всех значений, приведенных ниже для обсуждения.

Результаты самосогласованных вычислений, приведенные на рис. 1, а, показывают, что действительная часть полной энергии $\text{Re } \varepsilon$ возбужденного атома гелия всюду выше энергии его основного состояния при $x = y = 0$, равной -5.7233 Ry , что соответствует данным других работ [40,41]. Мнимая часть полной энергии $\text{Im } \varepsilon$ атома гелия как функция параметра y для пяти значений параметра $x = 0, 0.005, 0.01, 0.015, 0.02$ изображена на рис. 1, б. Поскольку модуль этой величины есть вероятность распада возбуждений атома в единицу времени, наиболее интересными являются неограниченно долго живущие состояния с $\text{Im } \varepsilon = 0$. Кроме основного состояния при $x = y = 0$, к таковым относятся возбужденные состояния вблизи $y = 0.1$ и 0.15 (рис. 1, б).

Отметим, что и мнимые части спектральных линий Γ_n , имеющие смысл вероятности распада одноэлектронных возбуждений, для состояний $1s$ -симметрии обращается в нуль при этих же значениях параметров x и y . На рис. 2, б в качестве примера приведена зависимость мнимых частей Γ_n спектральных линий для атома гелия от параметра возбуждения y при $x = 0.02$. Действительная часть этих же спектральных линий одноэлектронных состояний $1s$ -симметрии незначительно убывает с ростом параметра y . Переход электронов на спектральные уровни возбужденных состояний $2p$ -симметрии и еще более высокие уровни, не приведенные на рис. 2, а, чтобы не загромождать рисунок, находящихся выше нуля, приводит к ионизации. Таким образом, можно утверждать, что в гелии в принципе возможно существование неограниченно долго живущих возбуждений, соответствующих значениям $y = 0.1$ и 0.15 , например, в результате столкновения с каким-либо атомом. В качестве такого атома выберем атом лития.

Результаты расчетов, представленные на рис. 3, а, показывают, что действительная часть полной энергии $\text{Re } \varepsilon$ двухатомной системы Li-He достигает минимума, тем более глубокого, чем больше интенсивность возбуждения. Из представленных на рис. 3, а, наиболее глубокий минимум соответствует значению параметра $y = \pm 0.0002$. При тех же расстояниях около семи боровских радиусов мнимая часть полной энергии

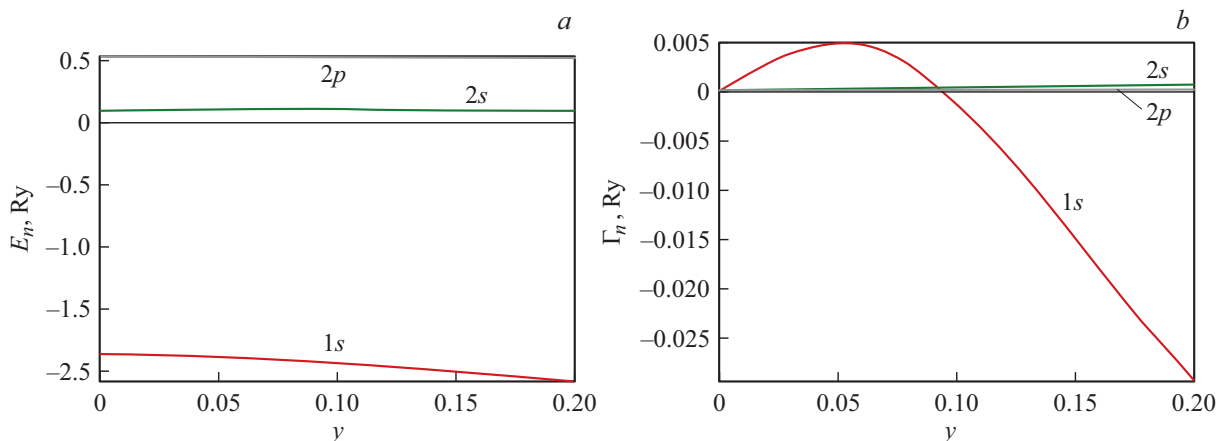


Рис. 2. Зависимости действительных частей E_n (a) и мнимых частей Γ_n (b) спектральных линий для атома гелия от параметра возбуждения y при $x = 0.02$.

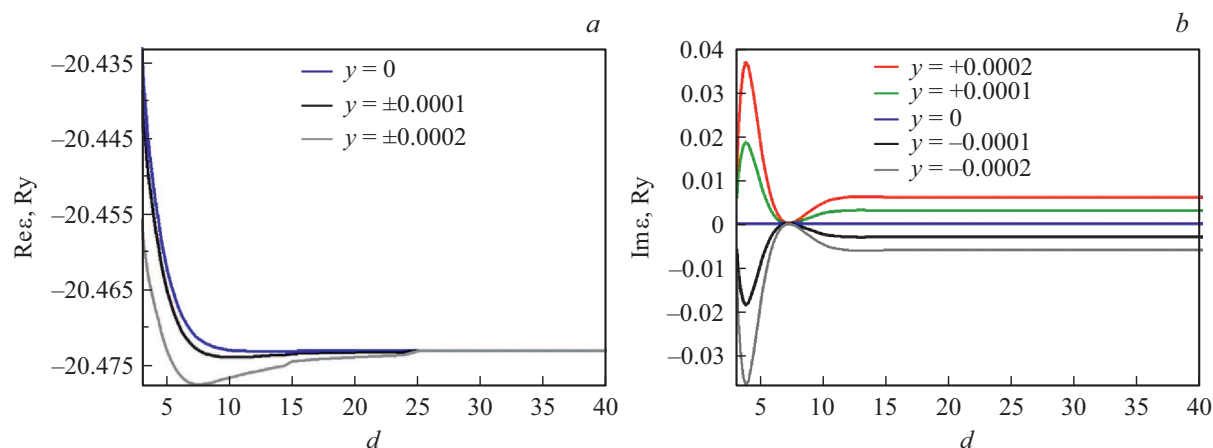


Рис. 3. Зависимости действительной части полной энергии $\text{Re } \epsilon$ (a) и мнимой части полной энергии $\text{Im } \epsilon$ (b) от расстояния d (в боровских радиусах) между атомами Li и He при $x = 0$ и $y = 0, \pm 0.0001, \pm 0.0002$.

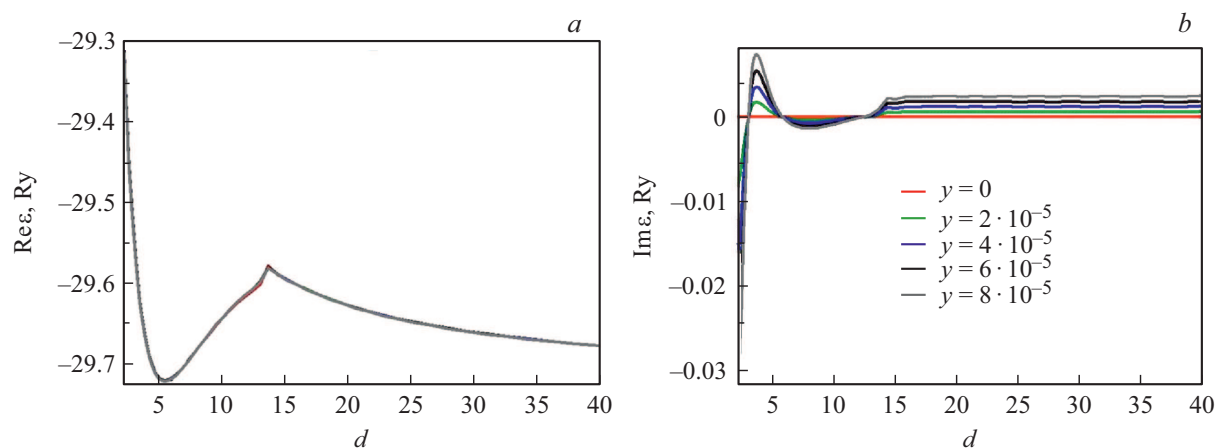


Рис. 4. Зависимости действительной части полной энергии $\text{Re } \epsilon$ (a) и мнимой части полной энергии $\text{Im } \epsilon$ (b) от расстояния d (в боровских радиусах) между двумя атомами лития при $x = 0$ и $y = 0, 2 \cdot 10^{-5}, 4 \cdot 10^{-5}, 6 \cdot 10^{-5}, 8 \cdot 10^{-5}$.

$\text{Im } \epsilon = 0$ (рис. 3, b). Следовательно, можно утверждать, что двухатомная система Li–He может существовать неограниченно долго в условиях внешних возмущений при расстояниях около семи боровских радиусов. При снятии возмущений система Li–He распадается на

отдельные атомы в отличие от системы Li–Li, для которой результаты расчета полной энергии приведены на рис. 4.

Результаты расчетов, представленные на рис. 4, a, показывают, что действительная часть полной энергии

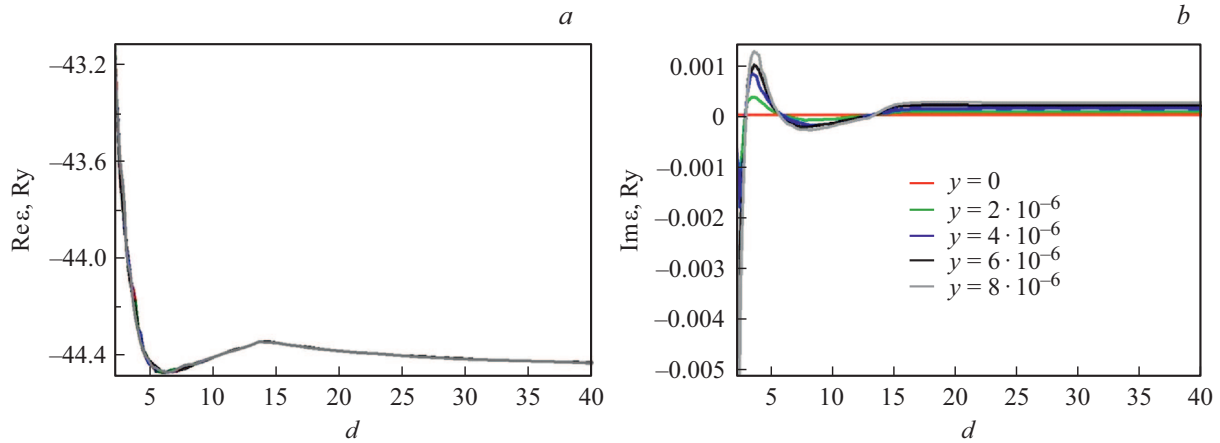


Рис. 5. Зависимости действительной части полной энергии $\text{Re } \varepsilon$ (a) и мнимой части полной энергии $\text{Im } \varepsilon$ (b) от расстояния d (в боровских радиусах) между атомами лития в кластере Li_3 при $x = 0$ и $y = 0, 2 \cdot 10^{-6}, 4 \cdot 10^{-6}, 6 \cdot 10^{-6}, 8 \cdot 10^{-6}$.

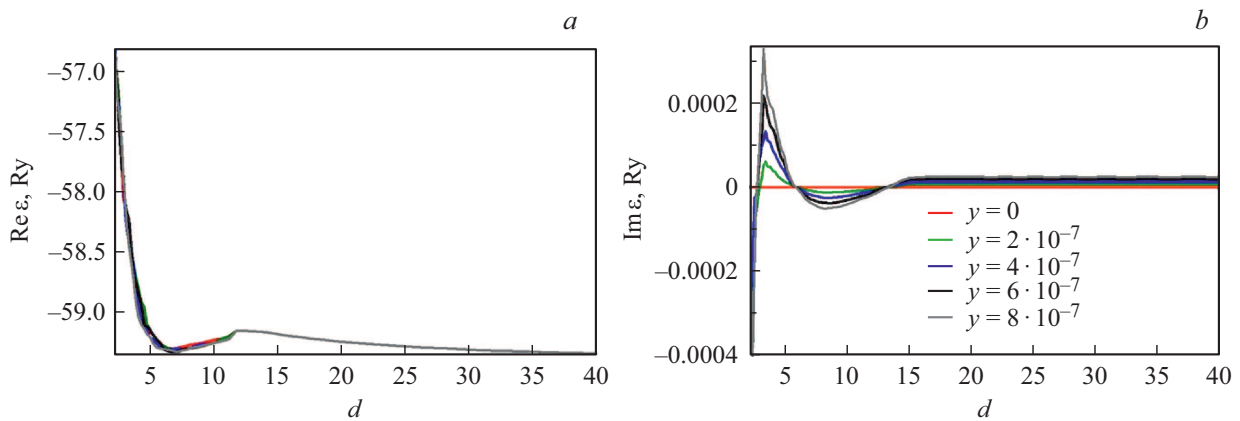


Рис. 6. Зависимости действительной части полной энергии $\text{Re } \varepsilon$ (a) и мнимой части полной энергии $\text{Im } \varepsilon$ (b) от расстояния d (в боровских радиусах) между атомами лития в кластере Li_4 при $x = 0$ и $y = 0, 2 \cdot 10^{-7}, 4 \cdot 10^{-7}, 6 \cdot 10^{-7}, 8 \cdot 10^{-7}$.

$\text{Re } \varepsilon$ двухатомной системы Li-Li достигает очень глубокого минимума, почти не зависящего от параметра возбуждения y при расстоянии между атомами $d = 5.12$ боровских радиусов, что соответствует данным работы [7]. При этом же расстоянии между атомами лития мнимая часть полной энергии $\text{Im } \varepsilon$ обращается в нуль (рис. 4, b), т.е. система Li-Li является долгоживущей. Заметим, что $\text{Im } \varepsilon = 0$ и при расстоянии между атомами $d = 13$ боровских радиусов (рис. 4, b). Однако если снять возбуждения, то такая система Li-Li переходит в основное состояние с расстоянием между атомами $d = 5.84$ боровских радиусов, либо распадается на два атома.

Полученные нами данные позволяют предполагать, что если интересующий нас атом лития поместить в поле двух, трех, или большего числа атомов, то может образоваться кластер, стабильный по энергии и с продолжительным временем жизни. Для проверки этого предположения мы вычислили полную энергию трех атомов лития как функцию расстояния между ними при $x = 0$ и еще меньших значениях параметра $y = 0, 2 \cdot 10^{-6}, 4 \cdot 10^{-6}, 6 \cdot 10^{-6}, 8 \cdot 10^{-6}$. Результаты расчетов, представленные на рис. 5, a, показывают, что

действительная часть полной энергии качественно ведет себя так же, как и для двух атомов (рис. 4, a), достигая глубокого минимума при $d = 5.84$ боровских радиусов, что соответствует данным других работ [42–44]. Мнимая часть полной энергии электронов, изображенная на рис. 5, b, обращается в нуль при расстояниях между атомами, равными $d = 5.84$ и 13 боровских радиусов. Однако если снять возбуждения, то трехатомная система с расстояниями между атомами $d = 13$ боровских радиусов переходит в основное состояние с расстояниями между атомами $d = 5.84$ боровских радиусов, либо распадается.

Для проверки обнаруженных закономерностей была вычислена полная энергия четырех атомов лития, как функция расстояния между атомами при значениях параметров $x = 0$ и $y = 0, 2 \cdot 10^{-7}, 4 \cdot 10^{-7}, 6 \cdot 10^{-7}, 8 \cdot 10^{-7}$. Результаты расчетов, представленные на рис. 6, подтверждают высказанные выше предположения.

Отметим, что графики зависимости действительной части полной энергии $\text{Re } \varepsilon$ от расстояния d , приведенные на рис. 6, a, как и на рис. 5, a, 4, a, практически совпадают при всех значениях y , указанных в подписях. Приведенные на рис. 6, b, как и на рис. 5, b, 4, b,

3, b отклонения от прямой $\text{Im } \varepsilon = 0$ тем больше, чем больше абсолютное значение параметра возбуждения u . Следовательно, в соответствии с соотношением неопределенностей, время жизни рассмотренных кластеров в возбужденном состоянии уменьшается с ростом мощности внешнего воздействия.

Заключение

Расчеты энергетической структуры атомных пучков лития в потоке, содержащем гелий, показывают принципиальную возможность образования устойчивых возбуждений двух-, трех-, четырехатомных кластеров, содержащих только атомы лития. Кроме кластеров лития с межатомными расстояниями, соответствующими межатомным расстояниям равновесного состояния, обнаружены долгоживущие возбуждения кластеров с межатомными расстояниями 13 боровских радиусов. Однако если снять возбуждения, то такие системы с расстояниями между атомами 13 боровских радиусов переходят в основное состояние, либо распадаются. Кроме этого, обнаружены системы Li–He, долгоживущие в условиях внешних возбуждений, но быстро теряющие гелий при снятии этих возбуждений.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Rosenman A., Markevich E., Salitra G., Aurbach D., Garsuch A., Chesneau F.F. // Adv. Energy Mater. 2015. Vol. 5. P. 1500212. DOI: 10.1002/aenm.201500212
- [2] Hart C.J., Cuisinier M., Liang X., Kundu D., Garsuch A., Nazar L.F. // Chem. Commun. 2015. Vol. 51. P. 2308–2311. DOI: 10.1039/C4CC08980D
- [3] Markevich E., Salitra G., Rosenman A., Talyosef Y., Chesneau F., Aurbach D. // Electrochem. Commun. 2015. Vol. 60. P. 42–46. DOI: 10.1016/j.elecom.2015.08.004
- [4] Sharon D., Hirsberg D., Afri M., Garsuch A., Frimer A.A., Aurbach D. // J. Phys. Chem. C. 2014. Vol. 118. P. 15207–15213. DOI: 10.1021/jp506230v
- [5] Cristofolini L., Riccò M., De Renzi R. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. P. 8343–8346. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.8343
- [6] Kohanoff J., Andreoni W., Parrinello M. // Chem. Phys. Lett. 1992. Vol. 198. P. 472–477. DOI: 10.1016/0009-2614(92)80030-F
- [7] Kushwaha A.K., Sahoo M.R., Nanda J., Nayak S.K. // J. Clust. Sci. 2017. Vol. 28. P. 2779–2793. DOI: 10.1007/s10876-017-1260-7
- [8] Woodruff D.P. Atomic Clusters: from Gas Phase to Deposited. Elsevier, 2007. 626 p.
- [9] Mathew A., Pradeep T. // Part. Part. Syst. Charact. 2014. Vol. 31. P. 1017–1053. DOI: 10.1002/ppsc.201400033
- [10] de Heer W.A. // Rev. Mod. Phys. 1993. Vol. 65. P. 611–676. DOI: 10.1103/RevModPhys.65.611
- [11] Lu Y., Chen W. // Chem. Soc. Rev. 2012. Vol. 41. P. 3594. DOI: 10.1039/c2cs15325d
- [12] Смирнов Б.М. // УФН. 2003. Т. 173. С. 609–648.
- [13] Lou J.W., Cranch G.A. // AIP Adv. 2018. Vol. 8. P. 025305. DOI: 10.1063/1.5010294
- [14] Bleiholder C., Johnson N.R., Contreras S., Wyttenbach T., Bowers M.T. // Anal. Chem. 2015. Vol. 87. P. 7196–71203. DOI: 10.1021/acs.analchem.5b01429
- [15] Апатин В.М., Лохман В.Н., Макаров Г.Н., Огурок Д.Д., Рябов Е.А. // ЖЭТФ. 2017. Т. 152. С. 627–640.
- [16] Попов В.А., Гуляев П.Ю., Семкин Б.В. // Ползуновский вестник. 2012. Т. 2–1. С. 21–25.
- [17] Hubbard J., Peierls R.E. // Proc. R. Soc. London. Ser. A Math. Phys. Sci. 1957. Vol. 240. P. 539–560. DOI: 10.1098/rspa.1957.0106
- [18] Echenique P.M., Pitarke J.M., Chulkov E.V., Rubio A. // Chem. Phys. 2000. Vol. 251. P. 1–35. DOI: 10.1016/S0301-0104(99)00313-4
- [19] Quinn J.J., Ferrell R.A. // Phys. Rev. 1958. Vol. 112. P. 812–827. DOI: 10.1103/PhysRev.112.812
- [20] Ritchie R.H. // Phys. Rev. 1959. Vol. 114. P. 644–654. DOI: 10.1103/PhysRev.114.644
- [21] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Добросвет, КДУ, 2014. 512 с.
- [22] Mahan G.D. Many-Particle Physics. Springer US, 2000. 785 p.
- [23] Aryasetiawan F., Gunnarsson O. // Reports. Prog. Phys. 1998. Vol. 61. P. 237–312. DOI: 10.1088/0034-4885/61/3/002
- [24] Aulbur W.G., Jonsson L., Wilkins J.W. Quasiparticle Calculations in Solids. 1999. 237 p.
- [25] Саппы А.М., Саппы М.Ф. // ФГТ. 2012. Т. 54. Вып. 6. С. 1237–1243.
- [26] Инамов А.Н. // ЖЭТФ. 2010. Т. 137. С. 226–240.
- [27] Lischka H., Nachtigallová D., Aquino A.J.A., Szalay P.G., Plasser F., Machado F.B.C. et al. // Chem. Rev. 2018. Vol. 118. P. 7293–7361. DOI: 10.1021/acs.chemrev.8b00244
- [28] Fischer C.F., Godefroid M., Brage T., Jönsson P., Galgala G. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2016. Vol. 49. P. 182004. DOI: 10.1088/0953-4075/49/18/182004
- [29] Попов А.В. // Известия АГУ. 2012. Т. 2. С. 154–157.
- [30] Попов А.В. // Опт. и спектр. 2002. Т. 93. С. 5–7.
- [31] Попов А.В. // ЖЭТФ. 2005. Т. 128. С. 227–232.
- [32] Попов А.В. // Comput. Mater. Sci. 2006. Vol. 36. P. 217–220. DOI: 10.1016/j.commatsci.2005.06.005
- [33] Попов А.В. // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 2. С. 29–35.
- [34] Попов А.В. // Кристаллография. 2016. Т. 61. С. 5–9.
- [35] Попов А.В. // Math. Model. Geom. 2015. Vol. 3. P. 29–59.
- [36] Попов А.В. // ФГТ. 2008. Т. 50. Вып. 4. С. 759–764.
- [37] Huzinaga S. // J. Chem. Phys. 1965. Vol. 42. P. 1293–1302. DOI: 10.1063/1.1696113.
- [38] Попов А.В. // ФГТ. 2008. Т. 50. Вып. 8. С. 1530–1534.
- [39] Moiseyev N. Non-Hermitian quantum mechanics. Cambridge University Press, 2011. 394 p.
- [40] Li J., Drummond N.D., Schuck P., Olevano V. 2018. <http://arxiv.org/abs/1801.09977>
- [41] Clementi E., Roetti C. // At. Data Nucl. Data Tables. 1974. Vol. 14. P. 177–478. DOI: 10.1016/S0092-640X(74)80016-1
- [42] Brito B.G.A., Cândido L., Rabelo J.N.T., Hai G.-Q. // Chem. Phys. Lett. 2014. Vol. 616–617. P. 212–216. DOI: 10.1016/J.CPLETT.2014.10.044
- [43] de Visser S.P., Alpert Y., Danovich D., Shaik S. // J. Phys. Chem. A. 2000. Vol. 104. P. 11223–11231. DOI: 10.1021/JP002723A
- [44] Tai T.B., Nhat P.V., Nguyen M.T., Li S., Dixon D.A. // J. Phys. Chem. A. 2011. Vol. 115. P. 7673–7686. DOI: 10.1021/jp200992u