

УДК 539.186

PACS 34.80.Dp, 34.80.Gs

DOI: 10.24144/2415-8038.2016.40.122-129

Є.А. Нодь, С.В. Гедеон, В.Ю. Лазур

Ужгородський національний університет, вул. Волошина, 54, 88000, Ужгород

e-mail: nagy-liz@yandex.ru, gedsv@narod.ru, volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

ЗБУДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ НИЖЧИХ РІВНІВ АТОМІВ Mg, Ca та Sr

Розраховані в рамках методу R -матриці з B -сплайнами інтегральні (ІІ) та диференціальні (ДІ) перерізи збудження електронним ударом нижчих станів атомів Mg, Ca і Sr порівняні між собою для виявлення подібності/розбіжності у їх поведінці. Розклади сильного зв'язку включали, відповідно, 37 зв'язаних станів атома Mg, 39 станів атома Ca та 31 стан атома Sr. Обговорено зв'язок енергетичної структури атомних систем Mg, Ca та Sr і характеру поведінки ІІ та ДІ їх збудження електронами.

Ключові слова: атоми Mg, Ca і Sr, розсіяння електронів, метод R -матриці з B -сплайнами, інтегральні і диференціальні перерізи збудження.

Вступ

Прогрес в області фізики електрон-атомних зіткнень залежить як від наявності нових даних з дослідження окремих атомних систем, так і від уточнення, систематизації і узагальнення результатів, отриманих у попередніх дослідженнях, із залученням нових теоретичних ідей. Впродовж останнього десятиріччя нами, разом зі співавторами, детально досліджено пружне і непружне розсіяння електронів на ряді атомних систем: Ca [1, 2], Mg [3], Sr [4], Si [5], F [6], Al [7], B [8] і здійснено попередні розрахунки для ряду інших атомів та іонів. Якраз при вивченні нових об'єктів, особливо при виборі підходів та методів для його здійснення і контролі за якістю отримуваних даних, важливо мати систематизовані результати дослідження аналогічних об'єктів. Усі наші розрахунки процесів електрон-атомних (ЕА) зіткнень [1-8] були виконані у різних версіях методу R -матриці з B -сплайнами (БСР) [9]. У розрахунках мішеней були задіяні також одно- і багатоконфігураційний методи Хартрі-Фока (БХФ) [10, 11]. Використання методу БСР [9] дозволило нам отримати дані з характеристик ЕА-розсіяння згаданих атомних об'єктів з точністю, наразі недоступною для інших методів дослідження. Особливо слід відзначити важливість розрахунку процесів

розсіяння електронів на елементах лужноземельної групи: Ca, Mg та Sr [1-4], при дослідженні яких відбувалася апробація і налаштування новітнього на той час методу БСР [9]. Вибір лужноземельних елементів у якості об'єктів тестування програмного пакету BSR [9] був зумовлений, з одного боку, відносною простотою їхніх електронних оболонок, з іншого – наявністю, особливо у випадку Ca і Mg, значної кількості різноманітних експериментальних даних. У даній статті здійснена спроба узагальнення отриманих нами в [1-4] даних і намічені області подальших досліджень. У якості предметів розгляду вибрані енергетичні/кутові залежності інтегральних (ІІ) та диференціальних (ДІ) перерізів збудження електронним ударом нижчих рівнів вказаних атомів. Зокрема, розглядаються переходи з основного стану $ns^2\ ^1S$ ($n=3, 4, 5$ для Mg, Ca та Sr, відповідно) у стани $nsnp\ ^1,3P^o$, $ns(n-1)d\ ^1,3D$ [$3s3d\ ^1,3D$ для Mg], $ns(n+1)s\ ^1,3S$ та $ns(n+1)p\ ^1,3P^o$.

Методи розрахунку

Особливості методики розрахунку структурних характеристик кожного з лужноземельних атомів Ca, Mg та Sr [1-4] достатньо детально висвітлені у вищезгаданих працях. При цьому у розкладі сильного зв'язку для випадку Ca було враховано 39

станів мішені, для Mg – 37 станів, а для Sr – 31 спектроскопічний стан. Розрахунки структури у випадку атомів Ca [1, 2] та Mg [3] здійснювалися з використанням як пакету MCHF [10, 11], так і пакету BSR [9]. У розрахунках структури атома Sr [4] був задіяний тільки пакет MCHF. Переваги розрахунку структури мішені в рамках методу *R*-матриці з *B*-сплайнами (пакет BSR) у порівнянні з багатоконфігураційним методом Хартрі-Фока (пакет MCHF) висвітлені в [9]. Там же наведена загальна теорія БСР-розрахунків ЕА-розсіяння та опис комп'ютерних програм пакету BSR.

У таблицях 1-3 показані результати розрахунків енергій 11 нижніх рівнів атомів Mg, Ca та Sr, виконаних у наближеннях БСР37, БСР39 та БСР31, відповідно (див. [1-4]). Теоретичні результати для Mg і Ca порівняні з даними NIST [12], а для Sr – з даними Мура [13]. При цьому похибки в обчисленні як енергій рівнів, так і хвильових функцій (сил осциляторів), отримані нами, є меншими за ті, що мали місце в розрахунках структури мішеней іншими авторами, які досліджували розсіяння електронів на атомах Mg, Ca та Sr.

На рис. 1 показані схеми розміщення врахованих нами в працях [1-4] атомних станів, а також розглянутих у даній роботі переходів для атомів Ca, Mg та Sr. З рис. 1 видно, що розміщення нижніх збуджених рівнів атомів Ca та Sr практично тотожні, у той же час значно відрізняючись від порядку розташування рівнів атома Mg. Основна відмінність – у порядку слідування рівнів 3^3P^o , 3^1P^o та 3^3D , 3^1D для Mg і рівнів n^3P^o , n^1P^o та $(n-1)^3D$, $(n-1)^1D$ для Ca і Sr ($n=4, 5$, відповідно). У магнії $3^{3,1}D$ -рівні знаходяться значно вище резонансного рівня 3^1P^o , у той час як для Ca та Sr – між метастабільним рівнем n^3P^o і резонансним рівнем n^1P^o . Ця структурна особливість, як буде показано нижче, має значний вплив на характер енергетичних залежностей як ПП, так і ДП ЕА-розсіяння.

З параметрами розрахунків ($N+1$)-електронної задачі ЕА-розсіяння у внутрішній області ($r \leq a$) для кожного з атомів Ca, Mg та Sr, числі використовуваних при цьому *B*-сплайнів порядку 8, *R*-матричних радіусах та чисельно розрахованих парціально-хвильових вкладах можна дізнатися з праць

Таблиця 1

Енергії збудження (в еВ) для 11 нижніх станів мішені Mg. Дані БСР37 [3] порівняні з даними NIST [12] ^{*}. Тут $\Delta E = E_{\text{БСР37}} - E_{\text{NIST}}$

№	Стан	E_{NIST} [12]	$E_{\text{БСР37}}$ [3]	ΔE
1	$3s^2 \ ^1S$	0.0	0.0	0.0
2	$3s3p \ ^3P^o$	2.714	2.764	0.050
3	$3s3p \ ^1P^o$	4.346	4.405	0.059
4	$3s4s \ ^3S$	5.108	5.135	0.027
5	$3s4s \ ^1S$	5.394	5.421	0.027
6	$3s3d \ ^1D$	5.753	5.759	0.006
7	$3s4p \ ^3P^o$	5.932	5.942	0.010
8	$3s3d \ ^3D$	5.946	5.953	0.007
9	$3s4p \ ^1P^o$	6.118	6.137	0.019
10	$3s5s \ ^3S$	6.431	6.44	0.009
11	$3s5s \ ^1S$	6.516	6.526	0.010

^{*}енергії триплетів усереднені по терму

Таблиця 2

Енергії збудження (в еВ) для 11 нижніх станів мішені Ca. Дані БСР39 [1] порівняні з даними NIST [12] ^{*}. Тут $\Delta E = E_{\text{БСР39}} - E_{\text{NIST}}$

№	Стан	E_{NIST} [12]	$E_{\text{БСР39}}$ [1]	ΔE
1	$4s^2 \ ^1S$	0.0	0.0	0.0
2	$4s4p \ ^3P^o$	1.892	1.997	0.105
3	$3d4s \ ^3D$	2.524	2.610	0.086
4	$3d4s \ ^1D$	2.709	2.785	0.076
5	$4s4p \ ^1P^o$	2.933	3.014	0.081
6	$4s5s \ ^3S$	3.910	3.959	0.049
7	$4s5s \ ^1S$	4.131	4.180	0.049
8	$3d4p \ ^3F^o$	4.442	4.429	-0.013
9	$3d4p \ ^1D^o$	4.443	4.454	0.011
10	$4s5p \ ^3P^o$	4.534	4.549	0.015
11	$4s5p \ ^1P^o$	4.554	4.567	0.013

^{*}енергії триплетів усереднені по терму

Таблиця 3

Енергії збудження (в еВ) для 11 нижніх станів мішені Sr. Дані БСР31 [4] порівняні з даними Moore [12] ^{*}. Тут $\Delta E = E_{\text{БСР31}} - E_{\text{Moore}}$

№	Стан	E_{Moore} [12]	$E_{\text{БСР31}}$ [4]	ΔE
1	$5s^2 \ ^1S$	0.0	0.0	0.0
2	$5s5p \ ^3P^o$	1.823	1.847	-0.024
3	$5s4d \ ^3D$	2.264	2.272	-0.009
4	$5s4d \ ^1D$	2.499	2.480	0.019
5	$5s5p \ ^1P^o$	2.691	2.673	0.018
6	$5s6s \ ^3S$	3.601	3.633	-0.032
7	$5s6s \ ^1S$	3.793	3.714	0.079
8	$4d5p \ ^3F^o$	4.173	4.111	0.062
9	$4d5p \ ^1D^o$	4.195	4.196	-0.002
10	$5s6p \ ^3P^o$	4.207	4.222	-0.015
11	$5s6p \ ^1P^o$	4.228	4.241	-0.013

^{*}енергії триплетів усереднені по терму

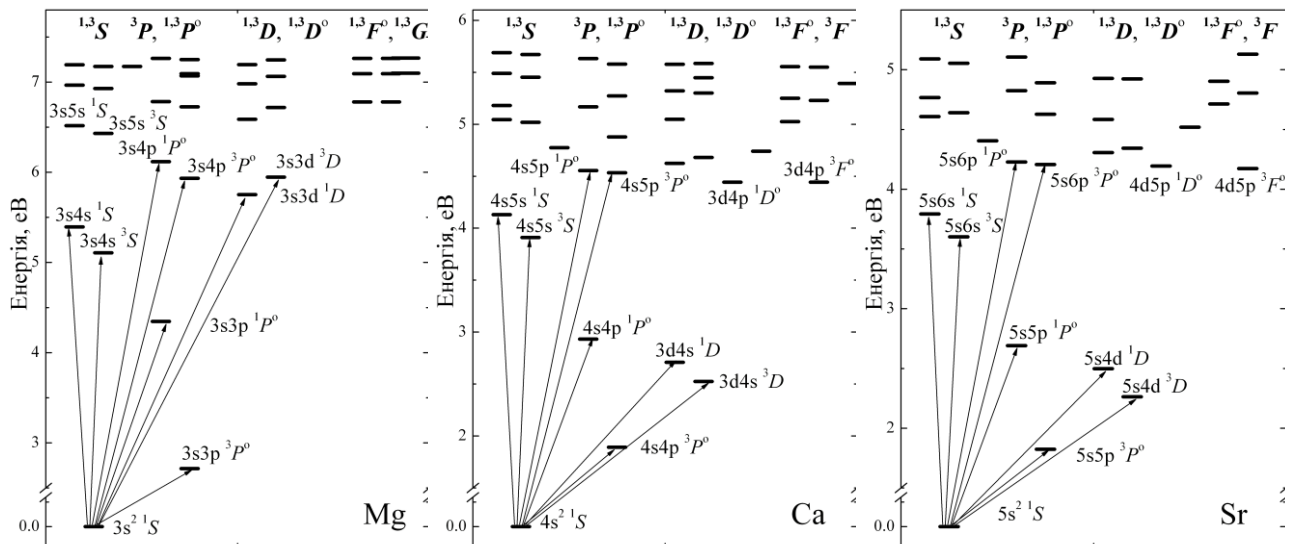


Рис. 1. Схеми розміщення врахованих у БСР-розрахунках ЕА-розсіяння нижчих рівнів атомів Mg [3], Ca [1] і Sr [4] та розглянуті у даній праці переходи з основного рівня у вибрані збуджені стани.

[1-4]. Перерізи обчислювалися за стандартною R -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету FARM [14].

Результати й обговорення

На рис. 2-5 представлені енергетичні залежності ІІІ переходів з основного стану $ns^2 1S$ атомів Mg ($n=3$), Ca ($n=4$) і Sr ($n=5$) у вісім вище розміщених станів: n^3P^o , n^1P^o ; $(n+1)^3S$, $(n+1)^1S$; $(n-1)^3D$, $(n-1)^1D$ [для Mg – 3^3D , 3^1D]; $(n+1)^3P^o$, $(n+1)^1P^o$ під дією електронного удару. Очевидно, що на кожному рисунку слід порівнювати між собою графіки для атомів Mg, Ca і Sr, розміщені (зверху вниз) із однієї сторони, лівої чи правої, даного рисунка.

Як видно з рис. 2-5, майже для всіх переходів енергетичні залежності ІІІ збудження електронним ударом атомів Ca і Sr є більш схожими між собою, ніж з такою ж залежністю для атома Mg. Звідси випливає, що загальна структура (відносне розміщення) збуджених рівнів енергії розглядуваних лужноземельних атомів у значній мірі визначає характер енергетичної залежності ІІІ збудження цих атомів електронним ударом.

Для підтвердження останнього припущення, нами в даній роботі були нараховані диференціальні перерізи збудження електронним ударом тих же переходів у атомах Mg, Ca і Sr. Енергетично-кутові залежності ДП (т.з. 3D-поверхні) збудження частини розглянутих переходів в атомах Mg, Ca і Sr

представлені на рис. 6. Аналіз характеру енергетично-кутової залежності цих 3D-поверхонь у загальному повністю підтверджує зроблений вище висновок щодо подібності перерізів збудження атомів Ca та Sr, і певної відособленості аналогічних ДП збудження атома Mg. Фактично, кожна з наведених на рис. 6 3D-поверхонь ДП збудження містить всю інформацію про енергетичні і кутові залежності цих перерізів для даного переходу в певному атомі. Аналіз поздовжніх (по енергії) структур („хребтів”, „впадин-жолобів”, „вирв” і т.п.) на 3D-поверхнях ДП збудження містить дані не тільки про фізичні процеси, які привели до появи вказаних особливостей поверхні, але й про характер обчислювальних процесів, у результаті яких були розраховані ці ДП. Зокрема, очевидно, що для сильних дипольних переходів, таких як $ns^2 1S - n^1P^o$, для атомів Ca і Sr варто було врахувати в R -матричному розкладі значно більше парціальних хвиль (як це і було зроблено в оригінальних розрахунках кутових залежностей ДП [1-4] при окремих енергіях), щоб отримати гладкі поверхні ДП. На жаль, здійснення таких же обчислень для всього масиву енергій і кутів поки що впирається в брак обчислювальних ресурсів.

Висновки

Нами показано, що характер енергетичних залежностей ІІІ збудження електронним ударом атомів Mg, Ca і Sr визначається

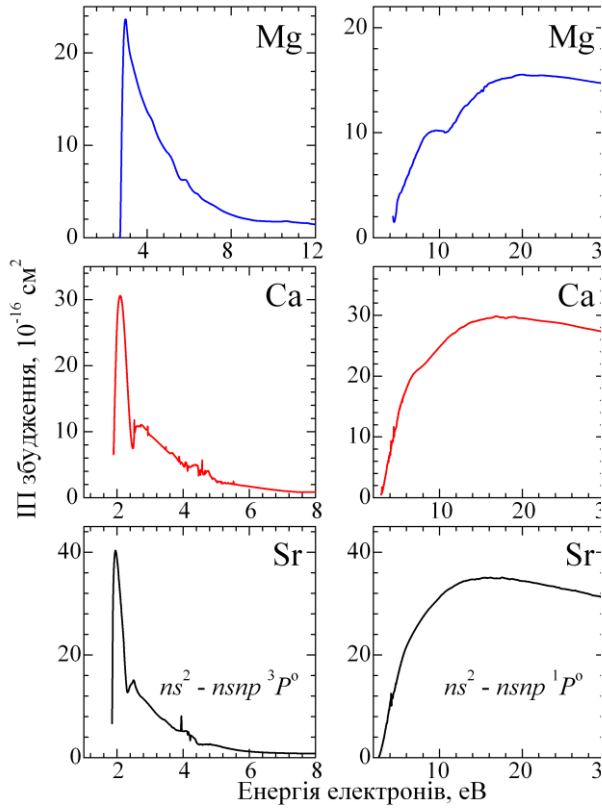


Рис. 2. ІП збудження станів $nsnp\ ^3P^o$ для атомів Mg ($n=3$), Ca ($n=4$) і Sr ($n=5$).

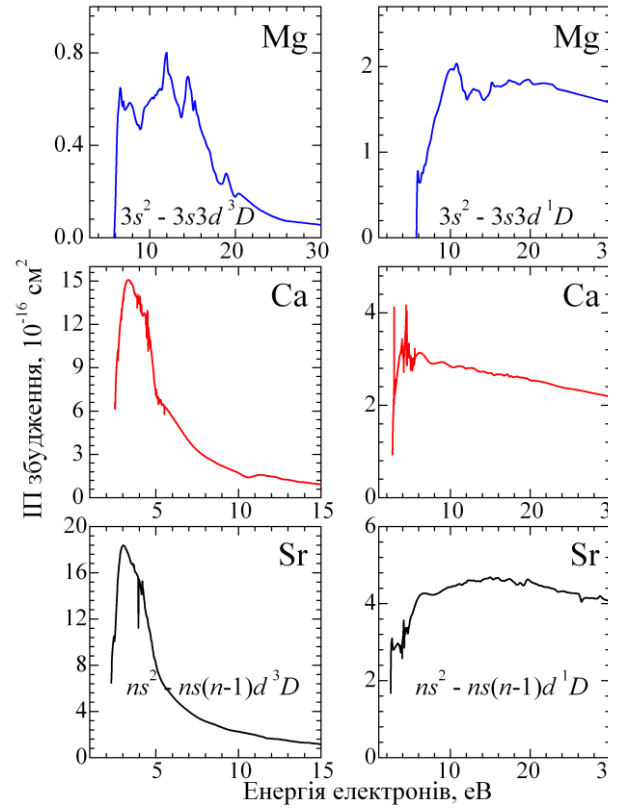


Рис. 4. ІП збудження станів $3s3d\ ^3,1D^o$ для атомів Mg та $ns(n-1)d\ ^3,1D^o$ для атомів Ca ($n=4$) і Sr ($n=5$).

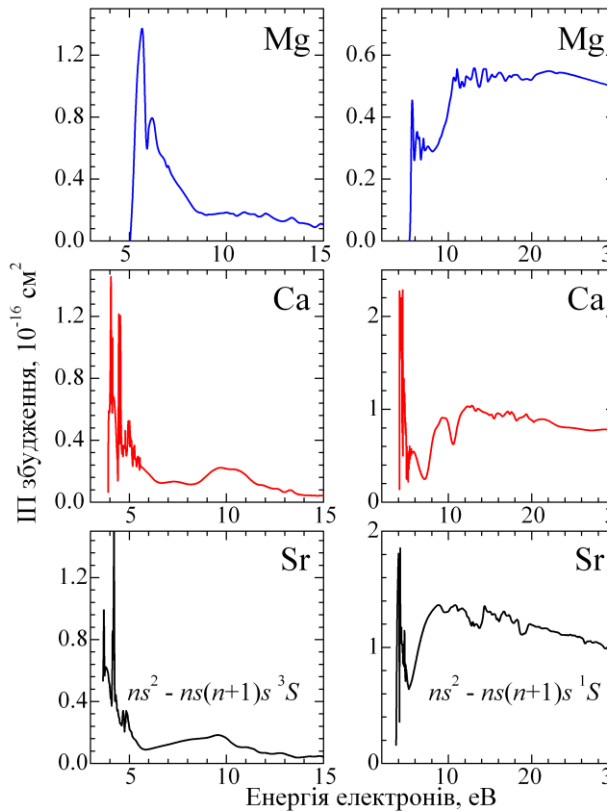


Рис. 3. ІП збудження станів $ns(n+1)s\ ^3,1S$ для атомів Mg ($n=3$), Ca ($n=4$) і Sr ($n=5$).

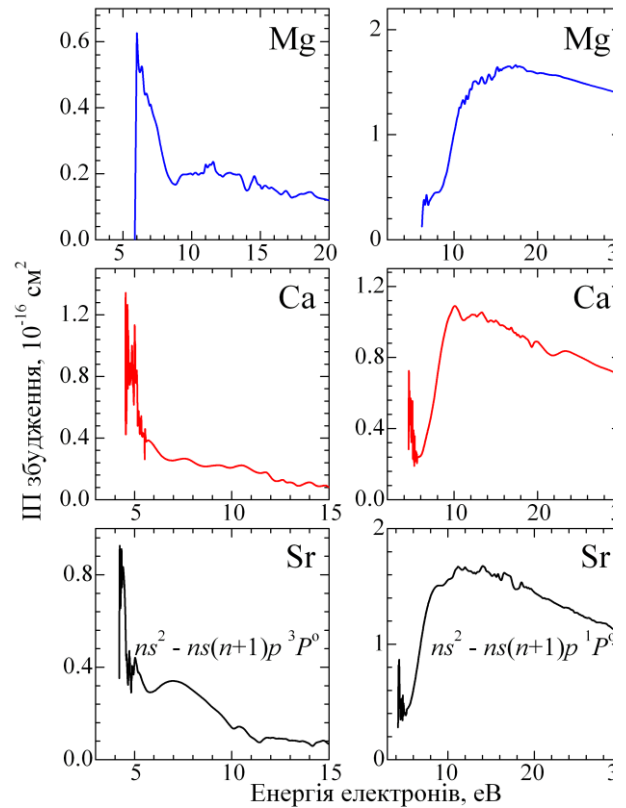


Рис. 5. ІП збудження станів $ns(n+1)p\ ^3,1P^o$ для атомів Mg ($n=3$), Ca ($n=4$) і Sr ($n=5$).

як типом спектроскопічного переходу між початковим і кінцевим станами атома-

мішені, так і загальною структурою (порядком розміщення) енергетичних рівнів їх

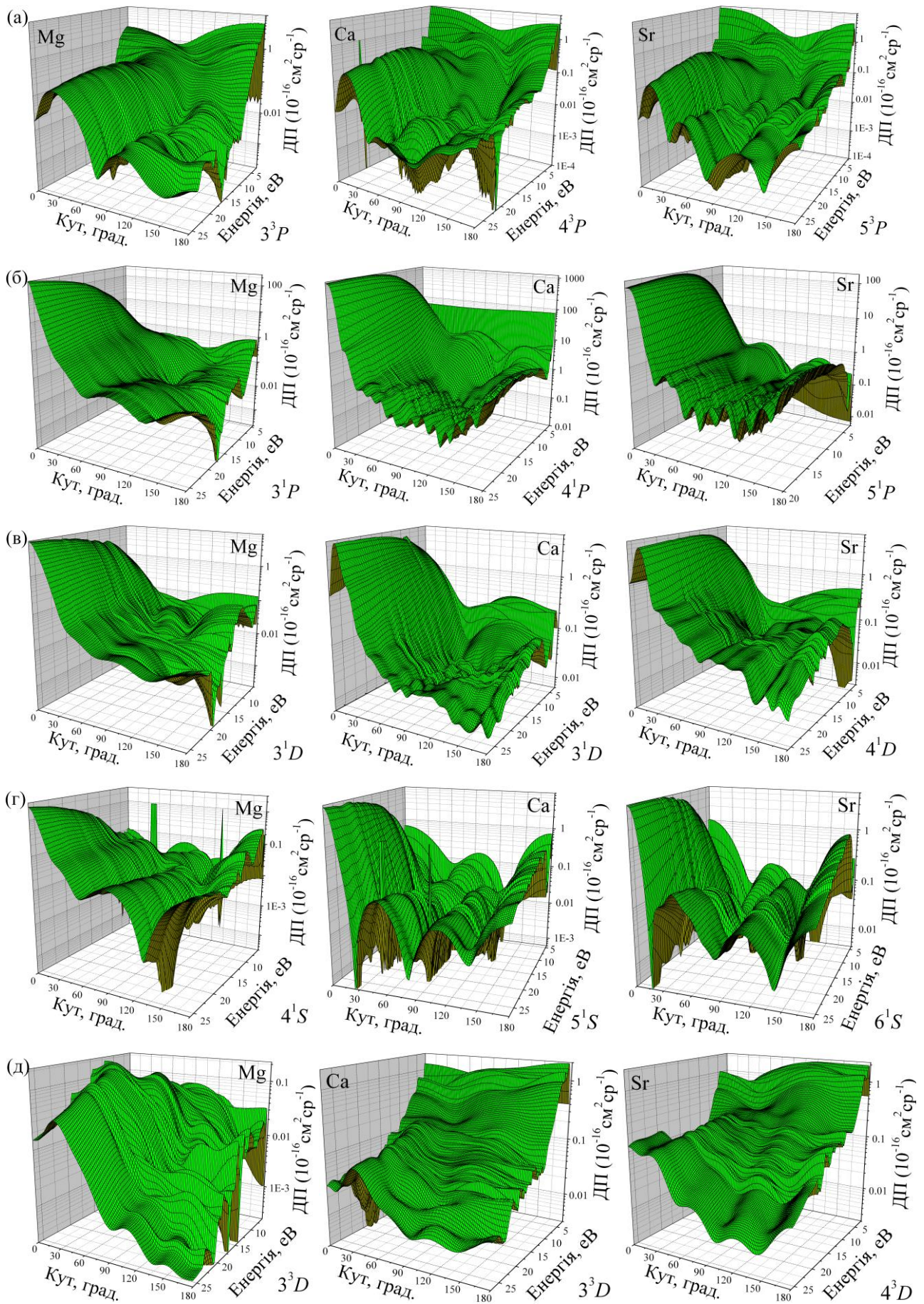


Рис. 6. 3D-поверхні ДП збудження електронним ударом нижчих станів атомів Mg, Ca та Sr.

збуджених станів. Аналіз характеру енергетично-кутових залежностей ДП збудження для цих же атомів підтверджує вказаний висновок. Зазначимо також, що перерізи збудження схожих спектральних переходів проявляють тенденцію до зростання абсолютних значень з ростом заряду ядра атома.

Автори висловлюють подяку своїм співавторам [1-4] за допомогу у проведенні розрахунків та продуктивні обговорення.

ЛІТЕРАТУРА

1. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of Ca^- / Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V. // *Phys. Rev. A.* – 2006. – V. 74, Iss. 5. – P. 052708 (10).
2. Electron-impact excitation of calcium / Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L., Gedeon S. // *J. Phys. B.* – 2007. – V. 40, No 20. – P. 4023-4031.
3. Cross sections for electron scattering from magnesium / Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V., Nagy E. // *Phys. Rev. A.* – 2009. – V. 79, Iss. 5. – P. 052709 (10).
4. Nagy E.A. The cross sections of electron scattering on Sr atom / E.A. Nagy // *Uzhhorod Univ. Scient. Herald. Series Phys.* – 2009. – Iss. 25. – P. 148-153.
5. Electron scattering from silicon / Gedeon V., Gedeon S., Lazur V., Nagy E., Zatsarinny O., Bartschat K. // *Phys. Rev. A.* – 2012. – V. 85, Iss. 2. – P. 022711 (7).
6. *B*-spline *R*-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of fluorine / Gedeon V., Gedeon S., Lazur V., Nagy E., Zatsarinny O., Bartschat K. // *Phys. Rev. A.* – 2014. – V. 89, Iss. 5. – P. 052713 (9).
7. *B*-spline *R*-matrix-with-pseudostates calculations for electron collisions with aluminum / Gedeon V., Gedeon S., Lazur V., Nagy E., Zatsarinny O., Bartschat K. // *Phys. Rev. A.* – 2015. – V. 92, Iss. 5. – P. 052701 (7).
8. Bandurina L.O. The differential cross sections of electron scattering on B atom / L.O. Bandurina, S.V. Gedeon. // *Uzhhorod Univ. Scient. Herald. Series Phys.* – 2015. – Iss. 37. – P. 49-56.
9. Zatsarinny O. BSR: *B*-spline atomic *R*-matrix codes / O. Zatsarinny // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V. 174, No 4. – P. 273-356.
10. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package / C. Froese Fischer // *Comput. Phys. Commun.* – 1991. – V. 64. – P. 369-398.
11. Froese Fischer C. Computational Atomic Structure. An MCHF Approach / C. Froese Fischer, T. Brage, O. Jonsson // London: Institute of Physics Publishing. – Bristol. – 1997. – 279 p.
12. NIST Atomic Spectra Database, version 3.1.5 / Yu. Ralchenko, A.E. Kramida, J. Reader, and NIST ASD Team // National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2008 (<http://physics.nist.gov/asd3>).
13. Moore C.E. Atomic Energy Levels as Derived from the Analysis of Optical Spectra // in *Natl. Stand. Ref. Data 35, Vol. III* (Reprint of NBS Circ. 467, Vol. III, 1958), 245 pp. (Nat. Bur. Stand., U.S., 1971).
14. Burke V.M. FARM – A flexible asymptotic *R*-matrix package / V.M. Burke, C.J. Noble // *Comput. Phys. Commun.* – 1995. – V. 85, No 3. – P. 471-500.

Стаття поступила до редакції 10.07.2016 р..

Е.А. Нодь, С.В. Геден, В.Ю. Лазур

Ужгородский национальный университет, Украина, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

ВОЗБУЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ НИЖНИХ УРОВНЕЙ АТОМОВ Mg, Ca И Sr

Рассчитанные в рамках метода R -матрицы с B -сплайнами интегральные (ИС) и дифференциальные (ДС) сечения возбуждения электронным ударом нижних состояний атомов Mg, Ca и Sr сравнены между собой для выявления сходства / различия в их поведении. Разложения сильной связи включали, соответственно 37 связанных состояний атома Mg, 39 состояний атома Ca и 31 состояние атома Sr. Обсуждена связь энергетической структуры атомных систем Mg, Ca и Sr и характера поведения ИС и ДС их возбуждения электронами.

Ключевые слова: атомы Mg, Ca и Sr, рассеяние электронов, метод R -матрицы с B -сплайнами, интегральные и дифференциальные сечения возбуждения.

E.A. Nagy, S.V. Gedeon, V.Yu. Lazur

Uzhgorod National University, Ukraine, 88000, Uzhgorod, Voloshina Str., 54

ELECTRON IMPACT EXCITATION THE LOWER LEVELS OF Mg, Ca AND Sr ATOMS

Background: Progress in the field of physics of electron-atom collisions is dependent on two main factors: a) the availability of new studies of individual atomic systems; b) the clarify, systematize and generalize of results, obtained in previous studies. In the last decade we, together with co-authors, investigate in detail the elastic and inelastic electron scattering on neutral atomic systems Ca, Mg, Sr, Si, F, Al, and B. The purpose of this paper is to systematize and summarize the results of studies of alkaline-earth atoms Ca, Mg and Sr, for the possibility of using established patterns in the calculation of new atomic facilities.

Methods: The atomic structures for Mg, Ca and Sr, as well as the excitation cross sections for e -Mg, e -Ca and e -Sr scattering processes were obtained by the B -spline R -matrix method. The multiconfiguration Hartree-Fock method with nonorthogonal orbital sets was employed for an accurate representation of the targets wave functions. The close coupling expansions include 37 spectroscopic states of neutral magnesium, 39 states of calcium and 31 states of strontium, respectively. The scattering calculations was then carried out in the same way as in standard R -matrix calculations.

Results: In this paper we summarize our earlier data with electron-atom scattering on Mg, Ca and Sr. The subject of the study are energy and angular dependences of integral (ICS) and differential (DCS) cross sections of electron impact excitation of the lower levels of these atoms. We reviewed the transitions from the ground state $ns^2\ ^1S$ ($n = 3, 4, 5$ for Mg, Ca and Sr, respectively) in the $nsnp\ ^1,3P^o$, $ns(n-1)d\ ^1,3D$ [or $3s3d\ ^1,3D$ for Mg], $ns(n+1)s\ ^1,3S$ and $ns(n+1)p\ ^1,3P^o$ states.

Conclusions: We have shown, that the form of the energy dependence of the electron-impact excitation cross sections for Mg, Ca and Sr atoms, are determined by the type of spectroscopic transition between the initial and final states of the target atom, as well as by the general placement of the energy levels of the their excited states. An analysis of the angular and energy dependences behaviour of the excitation DCSs for these atoms confirms this conclusion.

Keywords: Mg, Ca and Sr atoms, electrons scattering, B -splines R -matrix method, integral and differential excitation cross sections.

REFERENCES

1. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of Ca⁻ / Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V. // *Phys. Rev. A.* – 2006. – V. 74, Iss. 5. – P. 052708 (10).
2. Electron-impact excitation of calcium / Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L., Gedeon S. // *J. Phys. B.* – 2007. – V. 40, No 20. – P. 4023-4031.
3. Cross sections for electron scattering from magnesium / Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V., Nagy E. // *Phys. Rev. A.* – 2009. – V. 79, Iss. 5. – P. 052709 (10).
4. Nagy E.A. The cross sections of electron scattering on Sr atom / E.A. Nagy // *Uzhhorod Univ. Scient. Herald. Series Phys.* – 2009. – Iss. 25. – P. 148-153.
5. Electron scattering from silicon / Gedeon V., Gedeon S., Lazur V., Nagy E., Zatsarinny O., Bartschat K. // *Phys. Rev. A.* – 2012. – V. 85, Iss. 2. – P. 022711 (7).
6. B-spline R-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of fluorine / Gedeon V., Gedeon S., Lazur V., Nagy E., Zatsarinny O., Bartschat K. // *Phys. Rev. A.* – 2014. – V. 89, Iss. 5. – P. 052713 (9).
7. B-spline R-matrix-with-pseudostates calculations for electron collisions with aluminum / Gedeon V., Gedeon S., Lazur V., Nagy E., Zatsarinny O., Bartschat K. // *Phys. Rev. A.* – 2015. – V. 92, Iss. 5. – P. 052701 (7).
8. Bandurina L.O. The differential cross sections of electron scattering on B atom / L.O. Bandurina, S.V. Gedeon. // *Uzhhorod Univ. Scient. Herald. Series Phys.* – 2015. – Iss. 37. – P. 49-56.
9. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes / O. Zatsarinny // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V. 174, No 4. – P. 273-356.
10. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package / C. Froese Fischer // *Comput. Phys. Commun.* – 1991. – V. 64. – P. 369-398.
11. Froese Fischer C. Computational Atomic Structure. An MCHF Approach / C. Froese Fischer, T. Brage, O. Jonsson // London: Institute of Physics Publishing. – Bristol. – 1997. – 279 p.
12. NIST Atomic Spectra Database, version 3.1.5 / Yu. Ralchenko, A.E. Kramida, J. Reader, and NIST ASD Team // National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2008 (<http://physics.nist.gov/asd3>).
13. Moore C.E. Atomic Energy Levels as Derived from the Analysis of Optical Spectra // in *Natl. Stand. Ref. Data 35, Vol. III* (Reprint of NBS Circ. 467, Vol. III, 1958), 245 pp. (Nat. Bur. Stand., U.S., 1971).
14. Burke V.M. FARM – A flexible asymptotic R-matrix package / V.M. Burke, C.J. Noble // *Comput. Phys. Commun.* – 1995. – V. 85, No 3. – P. 471-500.