

## 11. Система программ АТОМ

### 11.1 Описание системы

Для исследования многоэлектронных эффектов в атомах было разработано специальное математическое и программное обеспечение [1-40]. Общий подход при изучении любого физического процесса заключался в разработке теоретической модели и построении на ее основе численной модели, с помощью которой затем создается программа для ЭВМ. При этом теоретическая, а затем и численная модель любого процесса включали в себя рассмотрение следующей последовательности действий:

- выбор приближения,
- математическое описание процесса в выбранном приближении,
- выбор и расчет волновых функций атома в основном и возбужденных состояниях,
- определение с их помощью матричных элементов различных типов, которые представляют собой многомерные интегралы и сводятся к одно- и двумерным после отделения угловых частей и интегрирования по угловым переменным,
- построение из матричных элементов амплитуд физических процессов, которые нередко содержат суммирование и интегрирование по промежуточным состояниям, а также могут иметь сингулярные области из-за энергетических знаменателей,
- определение физических характеристик атома или вероятностей процессов, которые выражаются через их амплитуды. В приближении ХФ и ПСФО вычисление физических характеристик атома и амплитуд вероятности процессов сводится к суммированию по большому числу промежуточных (виртуальных) состояний, а также интегрированию по сплошному спектру, которое в численных расчетах заменяется суммированием конечного числа слагаемых.

Как правило, любой процесс изучался сначала в приближении ХФ, а затем с учетом многоэлектронных корреляций в ПСФО или его модификациях. Подробное описание всех разработанных математических и численных моделей дано в серии опубликованных препринтов [2-34], а также в работах [35-38].

На основе разработанных моделей создана автоматизированная система АТОМ, которая представляет собой комплекс взаимосвязанных программ, имеющих иерархическую структуру. На верхнем уровне находятся управляющие программы, каждая из которых решает все описанные выше физические задачи. На нижних ступенях находятся прикладные программные модули и база данных, содержащая

волновые функции атомов.

Реализация системы АТОМ потребовала преодоления ряда вычислительных трудностей, таких как:

- решения уравнений с сингулярным, т.е. расходящимся элементом типа (3.17), (3.20), при этом окрестность сингулярности выделяется и интеграл от сингулярности берется аналитически, а полученное выражение сшивается с вкладом несингулярных областей, который определяется в результате численного интегрирования,
- замены интегрирования по сплошному спектру суммированием в конечном числе точек; при этом использование импульса частицы, равного корню квадратному из энергии, в качестве переменной интегрирования обеспечивает и большое число точек в области малых энергий (что важно для повышения точности вычисления), и достаточно высокий предел интегрирования,
- определение фаз рассеяния при вычислении волновой функции на конечном, вместо бесконечного, расстоянии от атома и др.

Система АТОМ сначала была написана на языке БЭСМ-АЛГОЛ для ЭВМ БЭСМ-6, затем была переведена на язык ФОРТРАН для ЭВМ ЕС, использовалась за рубежом в операционных системах VMS и UNIX, в настоящее время используется для расчетов на современных персональных компьютерах. Макрорасширение используемых языков описывает процесс сборки модулей и позволяет реализовать модульный принцип организации.

Система АТОМ строится следующим образом. Вычислительные алгоритмы разбиваются на стандартные блоки (модули). Многие из них являются общими для всех изучаемых процессов, например, вычисление кулоновской матрицы, определение  $3j$ - символа и др. Программа решения конкретной физической задачи собирается из этих модулей. Такой подход позволяет:

- в соответствии с исходной задачей при необходимости легко корректировать программу, внося изменение в отдельные модули;
- максимально использовать промежуточные результаты;
- расширять систему и дополнять новыми программами без затраты больших усилий на программирование;
- постоянно совершенствовать систему, улучшая ее характеристики, такие как время счета, использование памяти ЭВМ и др.

Входящие в состав системы модули делятся на управляющие, сервисные,

специальные и модули общего типа. Управляющие модули – это процедуры, позволяющие решать физические задачи, описанные в Главах 1-10, например, вычисление обобщенных сил осцилляторов, сечения фотоионизации и другие. Модули общего типа реализуют общие математические методы, которые могут быть использованы не только в приведенных задачах. В качестве таких модулей берутся, если возможно, процедуры, входящие в состав библиотеки стандартных программ ЭВМ, например, вычисление функций Бесселя, квадратичная интерполяция по методу Ньютона и другие. Специальные модули решают задачи, учитывающие специфику изучаемого физического процесса и их характеристик, например, расчет дипольных матричных элементов. Сервисные модули обеспечивают работу с входными и выходными данными в удобном для пользователя и разработчика виде, например, печать таблиц. Управляющие модули входят в систему в виде процедур без формальных параметров, для имени их используются названия изучаемых физических процессов. Управляющие модули собираются из модулей нижнего уровня, они осуществляют ввод исходных данных, счет и печать результатов в виде таблиц.

В состав системы АТОМ входит 21 управляющий модуль. Среди них, например, решение уравнений самосогласованного поля Хартри-Фока [35] и Хартри-Фока-Дирака [36] для атомов, вычисление хартри-фоковских волновых функций электронов, позитронов, мезонов в возбужденном состоянии (дискретный и сплошной спектры) в фиксированном поле всех атомных электронов [37], вычисление сечения фотоионизации атомов в приближении Хартри - Фока и в ПСФО в одном или нескольких (до десяти) переходах [38], и другие [39,40], а также база данных, содержащая различные физические характеристики [41]. Некоторые из этих программ, примеры их использования, а также часть базы данных записаны на дискету, являющуюся приложением к книге [40].

Система АТОМ, которая создавалась сначала как новый инструмент исследования для физика-теоретика, постепенно в ходе ее развития позволила перейти к комплексу исследований, называемому вычислительным экспериментом (термин введен акад. Самарским А.А в 1983 [42]) и позднее приступить к массовым расчетам различных физических характеристик. При этом вычислительный эксперимент [43,44], проводимый на ЭВМ быстрее и с меньшими затратами, чем эксперимент в лаборатории, позволял не только оперативно сопоставлять результаты расчетов с вновь появляющимися экспериментальными данными, но иногда и предсказать новые физические явления. Ряд примеров таких предсказаний приведен в предыдущих

разделах.

### ***11.2 Вычислительный эксперимент при изучении атомных процессов***

Основной задачей вычислительного эксперимента является разработка численных моделей для указанного круга задач в рамках заранее выбранного теоретического подхода.

Теоретическая модель любого изучаемого процесса в выбранном приближении должна давать удовлетворительное математическое описание эксперимента. Она включает выбор волновых функций атома и участвующих в процессе частиц. Волновые функции основного состояния определяются в приближении Хартри - Фока (ХФ). Функции возбужденных состояний в методе ХФ можно находить в самосогласованном поле или в поле «замороженного» остова атома для электронов, мезонов, позитронов. С помощью волновых функций определяются матричные элементы взаимодействия различных типов. Они входят в выражения для амплитуд физических процессов, что позволяет вычислить характеристики атомов или вероятности процессов в приближениях ХФ и ПСФО.

Волновые функции атома в приближении ХФ представляются в виде произведения радиальной, угловой и спиновой частей. Радиальная функция есть решение уравнения (или системы уравнений) ХФ методом последовательных приближений. Интегрирование по угловым переменным и суммирование по спинам проводится аналитически и входит в выражение для матричных элементов, которые в ПСФО являются результатом решения интегральных уравнений. Многомерные интегралы в этих уравнениях сводятся к одномерным после отделения угловых частей и интегрирования по угловым переменным. Уравнения ПСФО преобразуются в систему алгебраических, решение которых сводится к обращению матриц. Выражения для амплитуд физических процессов, определяемых через матричные элементы в ПСФО, часто содержат суммирование и интегрирование по промежуточным состояниям и могут иметь сингулярности из-за энергетических знаменателей. Интеграл от сингулярности берется аналитически. Полученное выражение "сшивается" с вкладом сингулярных областей, который находится в результате численного интегрирования. В этом случае наличие мнимой добавки к энергетическому знаменателю приводит к тому, что амплитуда процесса имеет мнимую часть.

Численное решение задачи, позволяющей изучать выбранный физический процесс, ищется с учетом физических соображений, которые позволяют производить

упрощения. Например, при дискретизации исходной модели важным элементом расчета является выбор достаточно высокого верхнего предела, до которого проводится суммирование на ЭВМ (вместо интегрирования по сплошному спектру). Практика расчетов показывает, что в физике атома приходится иметь дело с матричными элементами, которые достаточно быстро убывают по мере увеличения энергий входящих в них состояний. Кроме того, для повышения точности вычислений целесообразно выбирать точки дискретизации так, чтобы наибольшее число находилось в области сравнительно малых энергий  $E$ . Это условие обеспечивается использованием в качестве переменной интегрирования импульса электрона  $p = \sqrt{E}$ .

Оптимальная организация вычислительного процесса зависит от выбора теоретических и технических характеристик вычислительных алгоритмов. Теоретические параметры алгоритмов связаны с постановкой задачи. В них входят формальное описание задачи, метод решения, сам алгоритм и его реализация на выбранном языке. Технические характеристики зависят от используемой ЭВМ и включают системные средства, возможности и особенности используемых алгоритмических языков, форму представления и хранения исходной информации. Выбор стратегии при разработке самого алгоритма включает в себя ряд вопросов. Во-первых, во всех возможных случаях сложная исходная задача разбивается на ряд простых, которые легче реализовать на ЭВМ. Благодаря выделению подзадач в самостоятельные модули, такие, как вычисление дипольных и кулоновских матричных элементов, интегрирование с полюсом, обращение матрицы и др., упрощается проблема использования их при изучении новых процессов. Далее, в каждой из подзадач проводятся необходимые алгебраические упрощения. В частности, замена радиальной переменной, необходимая при расчете волновых функций, проводится при вычислении всех характеристик атомов, так как матричные элементы, используемые в них, выражаются через волновые функции. Доступ к вспомогательным (промежуточным) величинам так же важен для физика-теоретика, как измерения для экспериментатора в опыте. В изучаемых процессах это обычно относится к матричным элементам, которые используются для получения качественных оценок.

Одной из составных частей алгоритма является анализ точности вычислений. Точность теоретических моделей, как правило, неизвестна. Она устанавливается с помощью оценок, полученных в результате приближенных расчетов. Точность же вычислений на ЭВМ может быть очень высокой. Целесообразно ее выбирать такой,

чтобы она была несколько выше, чем ожидаемая погрешность самого физического результата. Часто более важна погрешность промежуточных результатов, так как получаемая в физическом эксперименте величина находится как разность больших чисел. Кроме того, в процессе вычислений на ЭВМ погрешность может накапливаться и, как правило, оценить ее трудно. Поэтому часто конечный результат на ЭВМ не требует такой точности, какая нужна для промежуточных данных, и реализуется на промежуточных этапах. Все это учитывается при выборе численных методов для решения задач [14].

Разработка вычислительных алгоритмов представляет собой второй этап вычислительного эксперимента. На следующих шагах составляются программы для ЭВМ, реализующие выбранные алгоритмы. В системе АТОМ применяются численные методы теоретического изучения структуры сложных атомов и процессов, протекающих при их участии [39,40]. Для записи алгоритмов в настоящее время используется алгоритмический язык Фортран. Для облегчения внедрения системы на других ЭВМ в ней не используются особенности и расширения языков, реализованных в некоторых трансляторах.

Запись алгоритмов ведется в соответствии со следующей технологией. Алгоритмы оформляются в виде модулей, которые делятся на три типа. Модули первого типа являются процедурами без формальных параметров и включают описание переменных, ввод и печать исходных данных, описание алгоритма, содержащее печати промежуточных величин, вывод результатов. Это - управляющие программы, каждая из которых решает самостоятельную физическую задачу. Модули второго типа - это процедуры или процедуры-функции с формальными параметрами. Они содержат описания переменных и алгоритма.

Модули первого и второго типов хранятся в библиотеке программных модулей. Вспомогательный архив включает модули третьего типа, которые являются фрагментами модулей 1 и 2 типов и содержат описания переменных, ввод и печать исходных данных и печать результатов. Эти незавершенные модули используются при разработке и сборке модулей первого типа. В целях наглядности и легкости поиска ошибок переменные в модулях группируются по их назначению; за общими для всех модулей переменными закрепляются постоянные идентификаторы, причем обычно имена переменных являются сокращенными названиями изучаемых физических характеристик. Ввод исходных данных сопровождается печатью всех физических величин. Это же делается для промежуточных величин и результатов работы

программы. Детальная печать превращает программный модуль в инструмент физика-теоретика; она играет здесь ту же роль, что и диагностика в натурном опыте для экспериментатора. Подзадачи, не связанные функционально, отлаживаются независимо во вспомогательном архиве, где они строятся на базе модулей третьего типа.

Система АТОМ включает в себя пакет прикладных программ (ППП) и базу данных (БД). ППП содержит более 65 взаимосвязанных модулей и имеет иерархическую структуру [14]. При его разработке учитывались следующие требования: модульный принцип организации, постоянное расширение возможностей системы, удобство пользователей, простота внедрения. Система АТОМ строится на базовых системных средствах, поэтому она легко внедряется на других ЭВМ.

База данных содержит волновые функции атомов (ионов) и характеристики процессов. В каждую запись входят энергия подоболочки атома, ее квантовые числа и волновая функция в приближении Хартри – Фока (или Хартри) для электрона (мезона или позитрона) в основном или возбужденном состоянии. Поиск ведется по номеру записи. В состав ППП входят специальные модули, которые используются для управления данными в БД, организованной на жестком диске РС. Основные требования к БД заключаются в следующем. БД должна быть удобна в использовании и легко организуема на других ЭВМ при внедрении.

Входной язык системы АТОМ относится к классу языков-заданий, позволяющих работать широкому классу пользователей, не имеющих специальной подготовки в программировании.

Важным этапом вычислительного эксперимента является проведение расчетов на ЭВМ, в ходе которых постоянно расширяются возможности созданных программ. В настоящее время система АТОМ позволяет решать следующие задачи [40]. В приближениях Хартри и Хартри - Фока можно получить различные волновые функции, а именно: волновые функции основного состояния атома, волновые функции возбужденных состояний, согласованные с функциями основного, волновые функции возбужденных состояний в сплошном спектре для заданных энергий в фиксированном поле атома с учетом ортогонализации к волновым функциям основного состояния или без нее; волновые функции возбужденных состояний в дискретном спектре для заданных значений главного квантового числа в фиксированном поле остова с учетом и без учета ортогонализации к волновым функциям основного состояния; волновые функции мезона; волновые функции позитрона.

Система АТОМ позволяет, имея набор необходимых волновых функций в БД, определять в приближениях ХФ и ПСФО матричные элементы в пределах одного или двух переходов, каждый из которых характеризуется одной волновой функцией основного состояния (дырочного) и совокупностью волновых функций возбужденных (частичных) состояний дискретного и сплошного спектров для конечного ряда энергий, а именно: дипольные матричные элементы оператора координаты или импульса; кулоновская матрица эффективного взаимодействия; матричные элементы членов разложения плоской волны в ряд по полиномам Лежандра; кулоновские матричные элементы типа «три частицы - одна дырка», «две частицы - две дырки», «три дырки - одна частица».

Полученные матричные элементы являются основой при изучении целого ряда процессов. Сечение фотоионизации (силы осцилляторов) и коэффициенты анизотропии углового распределения фотоэлектронов выражаются через дипольные матричные элементы координаты или импульса и определяются с учетом взаимодействия всех электронов исследуемой оболочки между собой, а также с учетом межоболочечных и межподоболочечных взаимодействий. Сечение неупругого рассеяния быстрых электронов на атомах определяется через обобщенные силы осцилляторов, которые вычисляются для переходов разных мультипольностей и описывают реакцию атома на передачу ему импульса и энергии.

При изучении рассеяния медленных электронов на атомах информацию о роли многоэлектронных корреляций и вероятности процесса можно получить, определяя собственно-энергетическую часть дырки или частицы одночастичной функции Грина в упрощенном ПСФО. Через матричный элемент собственно-энергетической части одночастичной функции Грина, взятой между волновыми функциями занятых состояний, выражается смещение потенциала ионизации по сравнению с его хартри-фоковским значением из-за корреляционного взаимодействия атомных электронов. Мнимая часть этого матричного элемента дает полную ширину дырочного уровня относительно Оже-распада. Кроме прямого Оже-распада, при котором в результате перехода электрона с занятого уровня на свободный происходит удаление другого атомного электрона, исследуется и более сложный процесс, идущий за счет эффективного взаимодействия электронов, учитываемого в ПСФО.

Тормозное излучение исследуется как в поле атома без учета его динамической реакции, так и с учетом влияния виртуальных возбуждений других электронов в рамках ПСФО.

При расчете характеристик захвата мю-мезонов атомами в зависимости от их энергии определяется сечение Оже-захвата или вероятность Оже-перехода.

Завершающим этапом вычислительного эксперимента является анализ результатов и сравнение их с экспериментальными данными. Система АТОМ реализует методику исследования структуры атомов на базе математического аппарата теории многих тел. Прежние подходы в этой области давали результаты, плохо согласующиеся с данными экспериментов. Использование подхода, основанного на приближении ПСФО, имеет несомненные преимущества при изучении атома, так как позволяет учитывать и многоэлектронные корреляции, используя методику ХФ в качестве исходного приближения.

Система АТОМ используется в течение многих лет, с ее помощью впервые удалось рассчитать различные характеристики с точностью, зачастую превосходящей достигнутую на эксперименте. Важным результатом данного вычислительного эксперимента является доказательство определяющей роли многоэлектронных корреляций в ряде изучаемых процессов [45]. Система АТОМ позволяет определять широкий спектр атомных характеристик и поэтому может использоваться в тех вычислительных экспериментах, где необходимы данные о структуре атомов и их взаимодействии с внешними полями.

## Литература к гл. 11.

1. *Чернышева Л.В., Черепков Н.А.* Программы вычисления атомных волновых функций в приближении Хартри-Фока. Препринт ФТИ-337, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1971. 60 с.
2. *Амусья М.Я., Черепков Н.А., Чернышева Л.В.* Программы вычисления сечения фотоионизации атомов с учетом многоэлектронных корреляций. Препринт 375, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН, 1971. 48 с.
3. *Чернышева Л.В., Черепков Н.А.* Программы вычисления сечений фотоионизации атомов с учетом корреляций в одном и двух переходах (Алгол-60). Препринт 459, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1974. 60 с.
4. *Чернышева Л.В., Черепков Н.А., Радоевич В.* Система АТОМ. 1. Программа решения уравнений самосогласованного поля Хартри-Фока для атомов. Препринт 486, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 1975. 32 с.
5. *Чернышева Л.В., Черепков Н.А., Радоевич В.* Система АТОМ. II. Программа решения уравнений самосогласованного поля Хартри-Фока для атомов. Препринт 487, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 1975. 35 с.
6. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Шефтель С.И.* Система АТОМ. III – Программа вычисления обобщенных сил осцилляторов атомов с учетом многоэлектронных корреляций в одном переходе Препринт 493, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1975. 56 с.
7. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Шефтель С.И.* Система АТОМ. IV – Программа вычисления обобщенных сил осцилляторов атомов с учетом многоэлектронных корреляций в двух переходах. Препринт 495, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1975. 53с.
8. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Шапиро С.Г.* Система АТОМ. V. Программа вычисления диагонального матричного элемента собственно энергетической части одночастичной функции Грина Препринт 504, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР 1976. 38 с.
9. *Chernysheva L.V., Cherepkov N.A., Radojevic V.* Comput. Phys. Commun. 1976. V. 11, P. 57-73.
10. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Иванов В.К., Шапиро С.Г.* Система АТОМ. VI. Программа вычисления ширины атомных уровней относительно Оже-распада с учетом многоэлектронных корреляций в двух переходах. Препринт 536, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1977. 52 с.

11. *Чернышева Л.В.* Изв. АН СССР, сер. физ. 1977. Т. 41, №12. С. 2665-2671.
12. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Черепков Н.А., Радоевич В.* Система АТОМ. VII. Программа вычисления сечения фотоионизации атомов и оптических сил осцилляторов в приближении Хартри-Фока и с учетом многоэлектронных корреляций в одном переходе. Препринт 589, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1978. 50 с.
13. *Chernysheva L.V., Cherepkov N.A., Radojevic V.* Comput. Phys. Commun. 1979. V. 18, P. 87-100.
14. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Давидович Д., Черепков Н.А.* Система АТОМ. VIII. Программа вычисления фаз рассеяния в упрощенном приближении случайных фаз с обменом. Препринт 663, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1980. 48 с.
15. *Чернышева Л.В., Черепков Н.А., Шефтель С.И.* Система АТОМ IX. Программа вычисления коэффициентов в уравнениях Хартри-Фока - Препринт 760, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1981. 28 с.
16. *Чернышева Л.В.* Комплекс программ для автоматизации атомных расчетов. Препринт, Л.: ЛНИВЦ АН СССР, 1981. 80 с.
17. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Шейнерман С.А.* Система АТОМ. X. – Программа вычисления сечения возбуждения триплетных уровней электронами во втором порядке метода искаженных волн. Препринт 776, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1982. 32с.
18. *Шейнерман С.А., Амусья М.Я., Кучиев М.Ю.* Система АТОМ. XI. Программы вычисления сечений ионизации атомов вблизи порогов неупругих процессов (Взаимодействие после столкновения). Препринт 777, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1982. 32 с.
19. *Семенов С.К., Черепков Н.А.* Система АТОМ. XII. Программа вычисления дипольной динамической поляризуемости атомов. Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН 835, Л., 1983. 19с.
20. *Чернышева Л.В., Авдоница Н.Б., Амусья М.Я., Кучиев М.Ю.* Система АТОМ. XIII. Программа вычисления спектра «атомного» тормозного излучения быстрых электронов. Препринт 865, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1983. 46с.
21. *Амусья М. Я., Чернышева Л. В.* Автоматизированная система исследований структуры атомов. Л.: Наука, 1983. 180 с.
22. *Чернышева Л.В., Черепков Н.А.* Система АТОМ. XIV. Программы вычисления волновых функций мезона в поле “замороженного” остова и сечения захвата

- мезона атомом. Препринт 943, Л.: ФТИ им А.Ф. Иоффе АН СССР, 1985. 44с.
23. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Килин В.А., Ли И.С.* Система АТОМ. XV. Программа вычисления вероятности сдвоенного Оже-распада. Препринт 944, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1985. 25с.
  24. *Шейнерман С.А., Кучиев М.Ю.* Система АТОМ. XVI. Программы вычисления сечения фотоионизации внутренних оболочек атомов с учетом послестолкновительного взаимодействия Препринт 977, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1985 . 48 с.
  25. *Чернышева Л.В., Кучиев М.Ю., Яхонтов В.Л.* Система АТОМ. XVII. Программа вычисления волновых функций основного состояния атомов в приближении Хартри-Фока-Дирака. Препринт 1015, Л.: им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1986. 38 с.
  26. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Килин В.А., Колесникова А.Н., Ли И.С.* Система АТОМ. XVIII. Программа вычисления вероятности однофотонного распада двухдырочных состояний. Препринт 1054. Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1986. 29с.
  27. *Чернышева Л.В., Черепков Н.А.* Система АТОМ. XIX. Программа вычисления сечения фотоионизации атома с незаполненной оболочкой с учетом корреляций в двух переходах. Препринт 1079, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1986. 49с.
  28. *Чернышева Л.В., Гульцев Б.В., Довганич М.М.* Система АТОМ. XX. Программа вычисления атомных волновых функций в приближении Хартри-Фока на ЕС ЭВМ, Материалы по математическому обеспечению ЭВМ. Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1987. 72 с.
  29. *Чернышева Л.В. Грибакин Г.Ф.* Система АТОМ. XXI. Программа вычисления волновых функций электрона в поле “замороженного” остова для состояний с термом 1S Материалы по математическому обеспечению, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 1987. 21 с.
  30. *Чернышева Л.В., Авдонина Н.Б., Амусья М.Я., Король А.В.* Система АТОМ. XXII. – Программа вычисления спектра тормозного излучения частиц промежуточных энергий Препринт 1314, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1988. 38с.
  31. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Орлов В.Ф., Семенов С.К., Черепков Н.А.* Система АТОМ. XXIII. Программа вычисления волновых функций электрона в поле “замороженного “ остова с возможностью различного задания недиагональных энергетических параметров. Препринт 1319, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1989. 38 с.

32. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Цемехман К.Л.* Система АТОМ. XXIV.- Программа вычисления сечений фотопоглощения и однократной фотоионизации промежуточных оболочек атомов с учетом собственно-энергетической части фотоэлектрона. Препринт 1492, Л.: ФТИ им. А.Ф.Иоффе АН СССР, 1990. 33 с.
33. *Гульцев Б.В., Грибакин Г.Ф.* Система АТОМ. XXV. Программы вычисления энергии и волновой функции наружного электрона в отрицательном ионе из уравнения Дайсона и вычисления фаз рассеяния электрона на атоме на ЕС-ЭВМ. – Материалы по математическому обеспечению. Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1991. 34 с.
34. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Хейфец А.С.* Система АТОМ. XXVI. Программы вычисления дифференциальных сечений возбуждения и ионизации атома электронным ударом. Препринт 1531, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1991. 38 с.
35. *Чернышева Л.В., Семенов С.К., Черепков Н.А.* Система АТОМ. XXVII. Программа вычисления хартри-фоковских волновых функций электрона в поле “замороженного” остова на ЕС ЭВМ. Препринт 1574, Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1991. 43 с.
36. *Чернышева Л.В., Семенов С.К., Черепков Н.А.* Система АТОМ. XXVIII. Программа вычисления парциальных сечений фотоионизации атомов с учетом корреляций в нескольких переходах. Препринт 1620 Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1993. 55 с.
37. *Chernysheva L.V., Yakhontov V.L.* The System АТОМ. - Two-program package to calculate the ground and excited state wave functions in the Hartree-Fock-Dirac approximation. Preprint HD-PY 96/06, Heidelberg, Germany, 1996. 37p.
38. *Chernysheva L.V., Yakhontov V.L.* Two-program package to calculate the ground and excited state wave functions in the Hartree-Fock-Dirac approximation. // *Comput. Phys. Commun.*, 1999. V. 119. P. 232-255.
39. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Черепков Н.А., Радоевич В.* Программы вычисления сечения фотоионизации атомов. // Системы автоматизации в науке и производстве, ред. В.М. Пономарев. М.: Наука, 1984. С. 87-96.
40. *Amusia M.Ya., Chernysheva L.V.* Computation of atomic processes. Bristol-Philadelphia: IOP Publishing, 1997. 253p.

41. *Чернышева Л.В.* Изучение атомных структур на базе автоматизированной системы. // Проблемы обработки информации и интегральной автоматизации производства. Ред. В.М. Пономарев. М.: Наука, 1990. С. 155-161.
42. Пакеты прикладных программ. Вычислительный эксперимент. ред. А.А. Самарский, М.: Наука, 146 с., 1983.
43. *Чернышева Л.В.* Вычислительный эксперимент при исследовании структуры атомов. // Проблемы автоматизации научных и производственных процессов, ред. В.М. Пономарев. М.: Наука, 1985. С.126-131.
44. *Чернышева Л.В.* Организация и возможности комплекса программ для проведения атомных расчетов. // Информационно-вычислительные проблемы автоматизации научных исследований, ред. В.М. Пономарев. М.: Наука, 1983. С. 115-120.
45. *Амусья М.Я., Иванов В.К., Черепков Н.А., Чернышева Л.В.* Теория многоэлектронных эффектов в атомных процессах. Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2001. 109с.