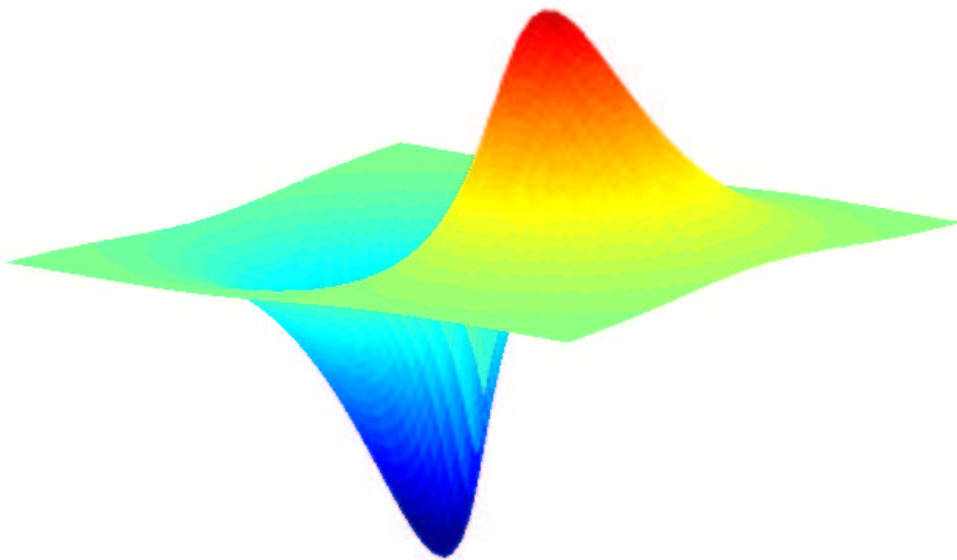


Háskóli Íslands
Raunvísindadeild
Eðlisfræðiskor

Tölvueðlisfræði
Vormisseri 2002
Kennari: Viðar Guðmundsson

Vetnisatóm í ytra rafsviði



Jens Hjörleifur Bárðarson

Jóel Karl Friðriksson

Efnisyfirlit

1	Inngangur	2
2	Ögn í miðlægu mætti	3
2.1	Schrödingerjafnan í kúluhnitum	3
2.2	Laguerre- og Legendre-margliður	4
3	Einnar-rafeindar-atóm í einsleitu ytra rafsviði	4
3.1	Diffurjöfnuhneppi bylgjufalls	4
3.2	Vörpun	5
3.3	Fylkisstök og skölun	6
3.4	Tvískautsvægi og líkindaþéttleiki	8
4	Fourier-ummyndun	9
5	Vetnisatóm í einsleitu ytra rafsviði	11
5.1	Tvískautsvægi atómsins	11
5.2	Líkindaþéttleiki rafeindarinnar	15
5.3	Fourier-greining	21
6	Forrit og prófanir	23
7	Lokaorð	26
A	Forritskóði	28
B	Teikning á þéttleika	46

1 Inngangur

Í verkefni þessu voru á tölulegan hátt athuguð áhrif einsleits tímaháðs rafsviðs á vetnisatóm.¹ Vetnisatómið er upphaflega í grunnástandi en lendir svo í rafsviði sem deyr út eins og veldisvísisfall. Bylgjufall rafeindarinnar sem fall af tíma var reiknað og út frá því skoðuð hegðun ýmissa stærða. Tvískautsvægi atómsins var athugað og Fourier-greining notuð til að skoða hvaða tíðnir og orkustig taka þátt í þeim sveiflum sem sjást í því. Einnig var líkindaþéttleiki rafeindarinnar athugaður sem fall af tíma og teiknaðar hreyfimyndir af honum og þær bornar saman við þá hegðun sem sést í tvískautsvæginu. Loks voru athuguð áhrif þess að breyta styrk rafsviðsins og tímastuðli þess.

Talsverðan hluta vinnunnar var unnt að gera á analýtískan hátt. Bylgjufallið var liðað í grunni eiginástanda ójónaðs vetnisatóms og leitt var út diffurjöfnuhneppi fyrir stuðlana í liðuninni. Til að leysa jöfnuhneppið þurfti að byrja á að reikna út fylkisstökin sem gefa stuðlana í hneppinu. Hluti þeirra var reiknaður út analýtískt en hluti á tölulegan hátt. Hneppið var svo leyst á tölulegan hátt og lausn þess ásamt hluta fylkisstakanna notuð til að reikna út tvískautsvægið og líkindaþéttleikann. Við alla tölulega útreikninga var notað forritunarmálið `Fortran 95` og voru notaðar tilbúnar stefjur úr `SLATEC`- og `NAG`-stefjusöfnunum þegar á þurfti að halda. Hreyfimyndirnar voru gerðar í `Matlab`.

Byrjað verður á að greina frá ýmsum fræðilegum grundvallaratriðum sem að notum komu í verkefninu og analýtíski hluti vinnunnar rakinn. Þá verður greint frá helstu niðurstöðum og þær túlkaðar og loks í stuttu máli fjallað um forritskóðann sem notaður var í verkefninu og prófanir á honum. Forritskóðinn er birtur í heild í viðauka A og `Matlab`-kóði notaður við teikningu á þéttleika í viðauka B.

¹Forsíðumyndin sýnir mismun á líkindaþéttleika rafeindarinnar í rafsviði annars vegar og í grunnástandi án rafsviðs hins vegar, sjá nánar í grein 5.2.

2 Ögn í miðlægu mætti

2.1 Schrödingerjafnan í kúluhnitum

Hamiltonvirkinn fyrir ögn með massa m í miðlægu mætti V er

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(R) \quad (2.1)$$

þar sem \mathbf{P} er skriðþungavirkinn og R er lengdin af staðsetningarráðgjafnum \mathbf{R} . Í $|\mathbf{r}\rangle$ -framsetningu verður Schrödingerjafnan

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}). \quad (2.2)$$

Mættið V er einungis háð fjarlægð frá upphafspunkti og því er þægilegt að nota kúluhnit (sjá mynd 1). Gerum nú ráð fyrir að mættið sé Coulombmætti milli rafeindar og kjarna með hleðslutölu Z , þ.e.

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (2.3)$$

Þá má skrifa eiginföll Hamiltonvirkjans (2.1) með hefðbundnu skammtatölurnar n, l og m í kúluhnitum sem [1]

$$\varphi_{nlm}(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\theta, \phi) R_{nl}(r) \quad (2.4)$$

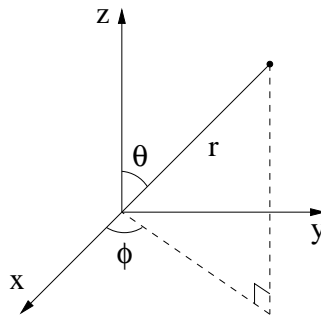
þar sem $Y_{lm}(\theta, \phi)$ eru kúluföllin og $R_{nl}(r)$ radíalföllin. Kúluföllin eru gefin með [1]

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}, & m \geq 0, \\ (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} P_l^{-m}(\cos\theta) e^{im\phi}, & m < 0, \end{cases} \quad (2.5)$$

þar sem $P_l^m(u)$ eru tengdu (*e. associated*) Legendre-margliðurnar (kafi 2.2). Radíalföllin eru gefin með [2, 3]

$$R_{nl}(r) = \left[\frac{4Z^3}{a_0^3 n^4} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right]^{1/2} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right). \quad (2.6)$$

Hér eru $L_\alpha^n(u)$ tengdu Laguerre-margliðurnar (kafi 2.2) og a_0 er Bohr-radíusinn.



Mynd 1: Kúluhnit.

2.2 Laguerre- og Legendre-margliður

Skilgreinum tengdar Laguerre-margliður með [4]

$$L_n^\alpha(u) = \frac{1}{n!} e^x x^{-\alpha} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha}). \quad (2.7)$$

Stöðlunin er valin þannig að

$$L_n^0(0) = 1. \quad (2.8)$$

Margliður P sem uppfylla jöfnuna

$$(1 - u^2) \frac{d^2 P}{du^2} - 2u \frac{dP}{du} + l(l + 1)P = 0 \quad (2.9)$$

þar sem l er heiltala, kallast Legendre-margliður. Þær má skrifa [4]

$$P_l(u) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (1 - u^2)^l. \quad (2.10)$$

Stöðlun margliðanna er valin þannig að

$$P_l(1) = 1. \quad (2.11)$$

Tengdu Legendre-margliðurnar eru skilgreindar sem

$$P_l^m(u) = (-1)^m \sqrt{(1 - u^2)^m} \frac{d^m}{du^m} P_l(u), \quad -1 \leq u \leq 1, \quad (2.12)$$

með $0 \leq m \leq l$. Speglnartala tengdu Legendre-margliðunnar P_l^m er $(-1)^{l+m}$.

3 Einnar-rafeindar-atóm í einsleitum ytra rafsviði

3.1 Diffurjöfnuhneppi bylgjufalls

Hamiltonvirki einnar-rafeindar-atóms í ytra rafsviði er á forminu

$$H(t) = H_0 + U(t) + W \quad (3.1)$$

þar sem H_0 er venjulegi óafstæðilegi Hamiltonvirkinn fyrir ögn í miðlægu mætti gefinn með jöfnu (2.1), $U(t)$ er liður tilkominn vegna ytra rafsviðsins og W eru viðbótarliðir sem gefa fíngerð og örfíngerð orkurófsins og bætast við þegar tekið er tillit til þátta eins og innra segulsviðs, spuna og áhrifa takmörkuðu afstæðiskenningarinnar [5]. Hér munum við með öllu sleppa viðbótarliðunum W en leiðrétting vegna þeirra er af stærðargráðunni $10^{-4} H_0$. Hið einsleita ytra rafsvið í þessu verkefni er $\exp(-t/\tau)\mathcal{E}$ í jákvæða stefnu z -ássins fyrir tíma $t > 0$ en 0 annars. Liðurinn $U(t)$ er þá

$$U(t) = \begin{cases} 0 & \text{ef } t \leq 0, \\ \exp(-t/\tau)e \mathcal{E} Z & \text{ef } t > 0, \end{cases} \quad (3.2)$$

þar sem $-e$ er hleðsla rafeindarinnar. Gert er ráð fyrir að kerfið sé í grunnástandi þar til kveikt er á rafsviðinu.

Látum $|\varphi_j\rangle$ tákna eiginástönd bundinnar rafeindar í miðlægu mætti kjarna þegar ekkert ytra rafsvið er til staðar og ekki er tekið tillit til W , þ.e. eiginástönd H_0 (sjá umfjöllun um þau í $|\mathbf{r}\rangle$ -framsetningu í grein 2.1). Ástand rafeindarinnar á tíma t þegar kveikt hefur verið á rafsviðinu má þá skrifa

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t) |\varphi_j\rangle \quad (3.3)$$

ef atómið er ekki jónað því að $|\varphi_j\rangle$ -ástöndin mynda grunn fyrir bundin ástönd. Hér mun alltaf vera reiknað með að rafsviðið sé nógu veikt til að atómið sé ójónað. Schrödingerjafnan gefur þá (þegar W er sleppt)

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle = (H_0 + U(t)) |\psi(t)\rangle, \quad (3.4)$$

$$i\hbar \sum_j \dot{c}_j(t) |\varphi_j\rangle = \sum_j c_j(t) (E_j + U(t)) |\varphi_j\rangle \quad (3.5)$$

þar sem E_j eru eiginildi H_0 svarandi til $|\varphi_j\rangle$. Ofanvarp þessarar jöfnu á $\langle\varphi_i|$ gefur

$$\langle\varphi_i| i\hbar \sum_j \dot{c}_j(t) |\varphi_j\rangle = \langle\varphi_i| \sum_j c_j(t) (E_j + U(t)) |\varphi_j\rangle, \quad (3.6)$$

$$i\hbar \dot{c}_i(t) = c_i(t) E_i + \sum_j c_j(t) U_{ij}(t) \quad (3.7)$$

þar sem $U_{ij}(t) = \langle\varphi_i| U(t) |\varphi_j\rangle$ og við höfum notfært okkur að $\langle\varphi_i| \varphi_j\rangle = \delta_{ij}$. Á fylkjaformi verður þetta

$$i\hbar \dot{\mathbf{c}}(t) = (E + U(t)) \mathbf{c}(t) \quad (3.8)$$

þar sem $U(t) = (U_{ij}(t))$, E er hornalínufylki með E_i á hornalínunni og \mathbf{c} er dálkvigur með stuðlunum c_i . Ef við skiptum \mathbf{c} upp í raunhluta og þverhluta fæst

$$\dot{\mathbf{c}}_{\text{Re}}(t) + i\dot{\mathbf{c}}_{\text{Im}}(t) = -\frac{i}{\hbar} (E + U(t)) (\mathbf{c}_{\text{Re}}(t) + i\mathbf{c}_{\text{Im}}(t)) = \frac{1}{\hbar} (E + U(t)) (\mathbf{c}_{\text{Im}}(t) - i\mathbf{c}_{\text{Re}}(t)) \quad (3.9)$$

sem gefur

$$\frac{d}{dt} \mathbf{c}_{\text{Re}}(t) = \frac{1}{\hbar} (E + U(t)) \mathbf{c}_{\text{Im}}(t) \quad (3.10)$$

og

$$\frac{d}{dt} \mathbf{c}_{\text{Im}}(t) = -\frac{1}{\hbar} (E + U(t)) \mathbf{c}_{\text{Re}}(t). \quad (3.11)$$

Við höfum því rauntölugilt fyrsta stigs línulegt diffurjöfnuhneppi fyrir raun- og þverhlutum stuðlanna $c_j(t)$ í jöfnu (3.3).

3.2 Vörpun

Hér að ofan hefur aðeins verið notaður einn lágvísir til að auðkenna ástöndin $|\varphi_j\rangle$. Í umfjölluninni í kafla 2.1 voru, eins og venja er, notaðar skammtatölurnar þrjár, n , l og m , til að

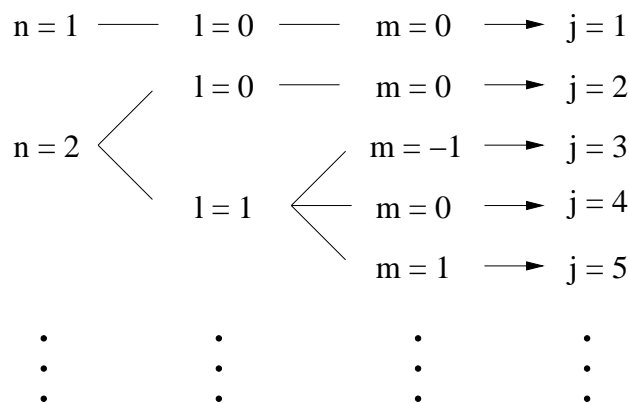
auðkenna ástöðin. Við þurfum því að finna gagntæka vörpun milli þrenndarinnar (n, l, m) og náttúrlegu tölunnar j . Við vitum að leyfileg gildi á n eru $1, 2, \dots$, leyfileg gildi á l fyrir hvert n eru $0, 1, \dots, n - 1$ og leyfileg gildi á m fyrir hvert l eru $-l, -l + 1, \dots, l$. Auðvelt er að sannfæra sig um að gagntæk vörpun frá (n, l, m) yfir í $j \in \{1, 2, 3, \dots\}$ fæst með því að gefa j gildið

$$j = \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=0}^{k-1} (2i + 1) + \sum_{i=0}^{l-1} (2i + 1) + (l + m + 1) \quad (3.12)$$

Ef summurnar eru reiknaðar fæst að vörpunin er

$$(n, l, m) \rightarrow j = \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} + l^2 + l + m + 1. \quad (3.13)$$

Hegðun vörpunarinnar er best skýrð með mynd, sjá mynd 2.



Mynd 2: Vörpunin $(n, l, m) \rightarrow j$.

3.3 Fylkisstök og skölun

Til að leysa diffurjöfnuhneppið (3.10) og (3.11) þurfum við að reikna fylkisstökin og skala hneppið. Framvegis notum við vörpunina (3.13) óspart án þess að taka það sérstaklega fram þegar það er augljóst af samhenginu. Hvorki hér né eftirleiðis verður tekið tillit til þess að massi kjarnans er endanlegur. Skekkjan vegna þessa er lítil, hlutfallsleg skekkja er af stærðargráðunni 10^{-3} fyrir vetnisatóm og minni fyrir þyngri kjarna. Fylkisstökin E_{ij} eru einföld [1]:

$$E_{ij} = \langle \varphi_i | H_0 | \varphi_j \rangle = E_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = -\frac{Z^2}{n^2} E_0 \delta_{ij} \quad (3.14)$$

þar sem $E_0 = 13,6056981$ eV er jónunarorka vetnisatóms. Fylkisstökin $U_{ij}(t)$ fást sem

$$U_{ij}(t) = \langle \varphi_i | U(t) | \varphi_j \rangle = \langle \varphi_i | \exp(-t/\tau) e \mathcal{E} Z | \varphi_j \rangle = \exp(-t/\tau) e \mathcal{E} \langle \varphi_i | Z | \varphi_j \rangle. \quad (3.15)$$

Í kúluhnitum er $z = r \cos \theta$ og með því að fara yfir í $|\mathbf{r}\rangle$ -framsetningu í kúluhnitum og nota (2.4) fæst að

$$\begin{aligned} \langle \varphi_i | Z | \varphi_j \rangle &= \int r R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) r^2 dr \int Y_{lm}^*(\theta, \phi) \cos \theta Y_{l'm'}(\theta, \phi) d\Omega \\ &=: a_0 J_{ij} I_{ij} \end{aligned} \quad (3.16)$$

þar sem ómerktu lágvísarnir svara til i og merktu til j (sbr. vörpunina í grein 3.2) og $a_0 J_{ij}$ stendur fyrir radíalheildið og I_{ij} fyrir hornheildið.

Kúluföllin eru hornrétt,

$$\int Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (3.17)$$

og uppfylla [1]

$$\begin{aligned} \cos \theta Y_{lm}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1,m}(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1,m}(\theta, \phi) \\ &=: A_{lm} Y_{l+1,m}(\theta, \phi) + B_{lm} Y_{l-1,m}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Við fáum því að hornheildið er

$$\begin{aligned} I_{ij} &= \int Y_{lm}^*(\theta, \phi) \{A_{l'm'} Y_{l+1,m'}(\theta, \phi) + B_{l'm'} Y_{l-1,m'}(\theta, \phi)\} d\Omega \\ &= [A_{l'm'} \delta_{l, l'+1} + B_{l'm'} \delta_{l, l'-1}] \delta_{mm'}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Með því að skilgreina einingarlausu stærðina

$$\rho = \frac{r}{a_0}, \quad (3.20)$$

og nota jöfnu (2.6) fæst að

$$\begin{aligned} J_{ij} &= \frac{4 \mathcal{Z}^{3+l+l'} 2^{l+l'}}{n^{2+l} n'^{2+l'}} \left[\frac{(n-l-1)!(n'-l'-1)!}{(n+l)!(n'+l')!} \right]^{1/2} \int_0^\infty \rho^{3+l+l'} \exp \left[-\mathcal{Z} \left(\frac{1}{n} + \frac{1}{n'} \right) \rho \right] \\ &\quad \times L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2\mathcal{Z}}{n} \rho \right) L_{n'-l'-1}^{2l'+1} \left(\frac{2\mathcal{Z}}{n'} \rho \right) d\rho. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Við viljum nú skala diffurjöfnuhneppið (3.10) og (3.11). Skilgreinum eftirtaldar einingarlausar stærðir:

$$\tilde{E} := \frac{E}{E_0}, \quad (3.22)$$

$$\alpha := \frac{e \mathcal{E} a_0}{E_0}, \quad (3.23)$$

$$\tilde{U} := \frac{U(t)}{\exp(-t/\tau) e \mathcal{E} a_0} = \frac{U(t)}{\alpha \exp(-t/\tau) E_0}, \quad (3.24)$$

$$\tilde{t} := \frac{E_0}{\hbar}t, \quad (3.25)$$

$$\tilde{\tau} := \frac{E_0}{\hbar}\tau, \quad (3.26)$$

$$\tilde{Z} = \frac{Z}{a_0}, \quad (3.27)$$

og samsvarandi fyrir \tilde{X} og \tilde{Y} . Athugum að þetta gefur að

$$\tilde{E}_{ij} = -\frac{Z^2}{n^2}\delta_{ij}, \quad (3.28)$$

$$\tilde{U}_{ij} = \langle \varphi_i | \tilde{Z} | \varphi_j \rangle = J_{ij} I_{ij}. \quad (3.29)$$

Diffurjöfnuhneppið (3.10) og (3.11) má með þessum skilgreiningum rita

$$\frac{d}{d\tilde{t}} \mathbf{c}_{\text{Re}}(\tilde{t}) = (\tilde{E} + \alpha \exp(-\tilde{t}/\tilde{\tau})\tilde{U}) \mathbf{c}_{\text{Im}}(\tilde{t}), \quad (3.30)$$

$$\frac{d}{d\tilde{t}} \mathbf{c}_{\text{Im}}(\tilde{t}) = -(\tilde{E} + \alpha \exp(-\tilde{t}/\tilde{\tau})\tilde{U}) \mathbf{c}_{\text{Re}}(\tilde{t}). \quad (3.31)$$

3.4 Tvískautsvægi og líkindaþéttleiki

Við höfum áhuga á að reikna út raftvískautsvægi atómsins. Tvískautsvægisvirki einnar-rafeindar-atóms er, ef ekki er tekið tillit til endanlegs massa kjarnans, gefinn með formúlunni

$$\mathbf{D} = -e\mathbf{R} \quad (3.32)$$

þar sem virkinn \mathbf{R} er staðsetningarvirki rafeindarinnar í hnitakerfi með upphafspunkt í miðju kjarnans. Væntigildi x -, y -, og z -þátta tvískautsvægisvirkjans eru þá gefin með

$$\langle D_x \rangle = -e \langle \psi | X | \psi \rangle, \quad (3.33)$$

$$\langle D_y \rangle = -e \langle \psi | Y | \psi \rangle, \quad (3.34)$$

$$\langle D_z \rangle = -e \langle \psi | Z | \psi \rangle, \quad (3.35)$$

þar sem $|\psi(t)\rangle$ er ástand rafeindarinnar. Rafsviðið hefur bara z -þátt svo að væntigildi x - og y -þátta tvískautsvægisvirkjans ættu að vera 0. Til að reikna út væntigildi z -þáttarins notum við jöfnu (3.3) og fáum að

$$\langle \psi(t) | Z | \psi(t) \rangle = a_0 \sum_{i,j} c_i^*(t) c_j(t) \langle \varphi_i | \tilde{Z} | \varphi_j \rangle \quad (3.36)$$

en fylkisstökin $\langle \varphi_i | \tilde{Z} | \varphi_j \rangle$ hafa þegar verið tekin fyrir (sbr. jöfnu (3.29)) og c -stuðlarnir fást úr jöfnuhneppinu (3.30) og (3.31).

Förum nú yfir í $|\mathbf{r}\rangle$ -framsetninguna og fáum með hjálp (3.3):

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = \sum_j c_j(t) \langle \mathbf{r} | \varphi_j \rangle = \sum_j c_j(t) \varphi_j(\mathbf{r}) = \sum_j c_j(t) \varphi_j(r, \theta, \phi) \quad (3.37)$$

þar sem í lokaskrefinu er farið yfir í kúluhnit. Við höfum áhuga á að reikna líkindaþéttleika bylgjufalls rafeindarinnar. Við fáum með hjálp jöfnu (2.4):

$$\begin{aligned} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 &= \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j} c_i^*(t)c_j(t)\varphi_i^*(r, \theta, \phi)\varphi_j(r, \theta, \phi) \\ &= \sum_{i,j} c_i^*(t)c_j(t)Y_{lm}^*(\theta, \phi)Y_{l'm'}(\theta, \phi)R_{nl}(r)R_{n'l'}(r) \end{aligned} \quad (3.38)$$

þar sem ómerktu lágvísarnir svara til i og merktu lágvísarnir til j .

4 Fourier-ummyndun

Endanleg strjál Fourier-ummyndun runu N tvinntalna z_j er skilgreind með

$$\hat{z}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} z_j \exp\left(-i\frac{2\pi jk}{N}\right), \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (4.1)$$

Tökum eftir að jafna (4.1) er vel skilgreind fyrir öll heiltölu k og með þeirri útvíkkun er \hat{z}_k lotubundið með lotu N , þ.e. $\hat{z}_k = \hat{z}_{k \pm N}$ og sér í lagi $\hat{z}_{-k} = \hat{z}_{N-k}$. Upprunalegu gildin z_j má fá út frá ummynduðu gildunum \hat{z}_k með strjálu andhverfu Fourier-ummynduninni

$$z_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{z}_k \exp\left(+i\frac{2\pi jk}{N}\right), \quad j = 0, 1, \dots, N-1. \quad (4.2)$$

Ef upprunalega runan er raungild, þ.e. $z_j = x_j$, skrifum við

$$\hat{z}_k = a_k + ib_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j \exp\left(-i\frac{2\pi jk}{N}\right), \quad (4.3)$$

og þá gildir að \hat{z}_{N-k} er samoka tala \hat{z}_k . Strjál Fourier-ummyndun rauntalnarunu er því ákveðin tegund tvinntalnarunu, svokölluð hermísk runa, með eiginleikann

$$a_{N-k} = a_k, \quad b_{N-k} = -b_k, \quad b_0 = 0 \quad (4.4)$$

og ef N er slétt tala er $b_{N/2} = 0$.

Hefðbundin notkun strjállar Fourier-ummyndunar er nálgun á samfelldri Fourier-ummyndun,

$$F(s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \exp(-i2\pi st) dt, \quad (4.5)$$

þegar $f(t)$ er hverfandi utan einhvers bils $(0, c)$ eða einungis þekkt á því bili. Með því að skrifa

$$\omega = 2\pi s \quad (4.6)$$

verður jafnan

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \exp(-i\omega t) dt. \quad (4.7)$$

Með því að skipta bilinu $(0, c)$ upp í N jöfn hlutbil gefur jafna (4.5)

$$F(s) \simeq \frac{c}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f_j \exp\left(-i \frac{2\pi s j c}{N}\right). \quad (4.8)$$

Til að geta notað strjálu Fourier-ummyndunina (4.3) ritum við

$$F_k \simeq \frac{c}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f_j \exp\left(-i \frac{2\pi j k}{N}\right) \quad (4.9)$$

fyrir $k = 0, 1, \dots, N-1$, þar sem $f_j = f(jc/N)$ og $F_k = F(k/c)$. Strjála Fourier-ummyndunin gefur sem sagt nálgun á samfelldu Fourier-ummynduninni á bilinu frá $s = 0$ til $s = N/c$.

Gerum nú ráð fyrir að við séum með gefin strjál gildi á einhverri stærð, t.d. tvískautsvægi, sem falli af tíma á tímabilinu $(0, T)$ með bili Δt milli gilda. Þar sem við notum strjála Fourier-ummyndun er ljóst að við fáum strjál gildi á horntíðninni

$$\omega_k = 2\pi \frac{k}{T}. \quad (4.10)$$

og gildið á $|F_k|$ segir til um þátt tíðninnar í kerfinu. Ef við gerum ráð fyrir að

$$E = \hbar\omega \quad (4.11)$$

fæst að strjálu orkugildin verða

$$E_k = 2\pi\hbar \frac{k}{T}. \quad (4.12)$$

Toppur í $|F_k|$ við ákveðið E_k segir okkur að þar sé um orkustig að ræða. Ef við erum með kerfi með strjálu orkurófi, t.d. ójónað vetnisatóm, má líta á mismun þessara orkugilda sem mat á mismuni orkustiganna í kerfinu. Í einingalausri framsetningu í samræmi við grein 3.3 verður (4.12)

$$\tilde{E}_k = 2\pi \frac{k}{T}. \quad (4.13)$$

Athugum einnig að þar sem $\tilde{T} = N\Delta\tilde{t}$ fæst að

$$\Delta\tilde{E}\Delta\tilde{t} = \frac{2\pi}{N}, \quad (4.14)$$

sem svipar til óvissulögmáls Heisenbergs. Þetta segir okkur að til að fá nákvæmara gildi á orkunni þarf að stækka tímaskrefin eða fjölga punktum. Ekki má þó stækka tímaskrefið um of því að verði það of stórt næst ekki að greina hröðustu sveiflurnar. Einnig þarf að athuga að ef tímaskrefið er stækkað þarf einnig að lengja tímabilið sem er Fourier-ummyndað ef gagnapunktum á ekki að fækka.

Athugum að lokum á hvaða orkubili við höfum upplýsingar. Eins og áður sagði höfum við Fourier-ummyndun á bilinu $(0, N/c)$ sem í okkar tilfalli er $(0, N/T)$. Nú er $|\hat{z}_{-k}| = |\hat{z}_{N-k}|$ og þar sem það eina sem hefur eðlisfræðilega merkingu í okkar tilviki er lengdin

á tvinntölunum \hat{z}_k er ljóst að einu upplýsingarnar sem við höfum eru á bilinu $(0, N/2T)$. Orkubilið sem við höfum upplýsingar um er því

$$2\pi\hbar \left(0, \frac{N}{2T}\right) = 2\pi\hbar \left(0, \frac{1}{2\Delta t}\right). \quad (4.15)$$

Í einingalausri framsetningu gildir því eftirfarandi um þau orkugildi sem við höfum upplýsingar um:

$$\tilde{E} \in \left(0, \frac{\pi}{\Delta \tilde{t}}\right). \quad (4.16)$$

Við sjáum af þessu að ef við stækjum tímaskrefið til að fá betri upplausn verður orkubilið sem við fáum upplýsingar um jafnframt minna.

5 Vetrnisatóm í einsleitu ytra rafsviði

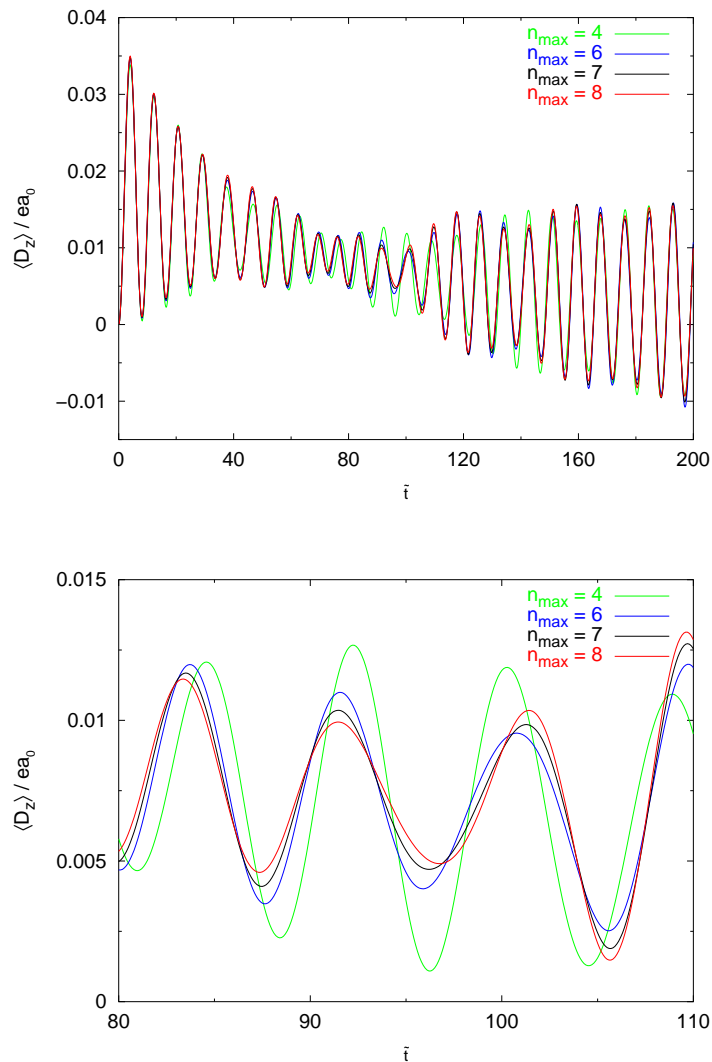
Til að leysa jöfnuhneppið (3.30) og (3.31) er nauðsynlegt að klippa á grunninn, þ.e. leyfa aðeins gildi á n upp í eitthvað hámarksgildi n_{\max} . Síðan þarf að reikna fylkisstökin (3.28) og (3.29) fyrir þau i - og j -gildi sem vörpunin (3.13) gefur fyrir endanlega grunninn. Þá er hægt að leysa jöfnuhneppið og fá gildin á c -stuðlunum (sem eru þá nálganir á réttu gildunum) fyrir einhvern gefinn tímapunkt. Að þekkja c -stuðlana er jafngilt því að þekkja bylgjufall rafeindarinnar og því er fræðilega hægt að reikna allar mælistærðir. Við setjum í öllum tilvikum $\mathcal{Z} = 1$, þ.e. við skoðum vetrnisatóm.

5.1 Tvískautsvægi atómsins

Með c -stuðlunum og fylkisstökunum (3.29) er hægt að reikna væntigildi z -þáttar raftvískautsvægisvirkjans með jöfnum (3.35) og (3.36). Þetta má gera fyrir röð af tímapunktum og fá þannig hegðun tvískautsvægisins með tíma ef punktarnir eru teknir nógu þétt. Í nær öllum tilfellum var tímaskrefið haft $\Delta \tilde{t} = 0, 1$. Tímahegðun tvískautsvægisins var á þennan hátt reiknuð frá $\tilde{t} = 0$ upp í eitthvað $\tilde{t} = \tilde{T}$, oftast 200, fyrir mismunandi gildi á styrk rafsviðsins (þ.e. α) og tímastuðli þess ($\tilde{\tau}$).

Þegar skoða skal hegðun tvískautsvægisins fyrir ákveðið α þarf að byrja á að ákvarða n_{\max} sem gefur ásættanlega nákvæmni. Þetta var gert með því að skoða gróf af tímahegðun tvískautsvægisins fyrir ýmis gildi á n_{\max} og sjá hvenær hækkun á n_{\max} breytti grafinu lítið. Miðað var við að nákvæmni væri orðin ásættanleg þegar nokkurn veginn rétt hegðun var komin fram. Á sumum stöðum (einkum í toppunum þar sem skekkjan er yfirleitt mest) getur þó verið talsverð skekkja í útslaginu. Skekkjan í tíðninni er mun minni. Auðvitað væri best að hafa þetta sem nákvæmast en með vaxandi n_{\max} eykst hins vegar reiknitíminn mjög hratt. Það er líka hegðunin sem við höfum áhuga á, ekki nákvæm töluleg gildi.

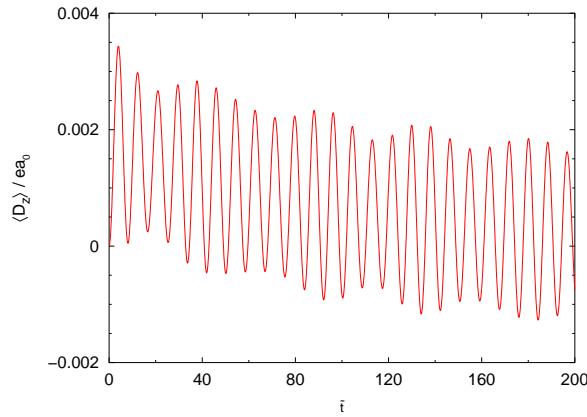
Byrjað var á að skoða $\alpha = 0, 01$ (það er nógu lítið til að atómið ætti alls ekki að geta jónast) og $\tilde{\tau} = 100$. Með samanburði á gröfum var valið gildið $n_{\max} = 7$ (sjá mynd 3). Það ætti að gefa sæmilega skýra mynd af hegðuninni. Graf af væntigildi z -þáttar tvískautsvægisins (í einingunni ea_0) sem falli af \tilde{t} fyrir fyrrnefnd gildi á α , $\tilde{\tau}$ og n_{\max} má sjá á mynd 4(b). Við sjáum að tvískautsvægið er að sveiflast um jafnvægisstöðu sem virðist falla eins og veldisvísifallið í rafsviðinu, alveg eins og við mátti búast. Í þessum sveiflum má einnig sjá áberandi hviðu, meira um þetta síðar.



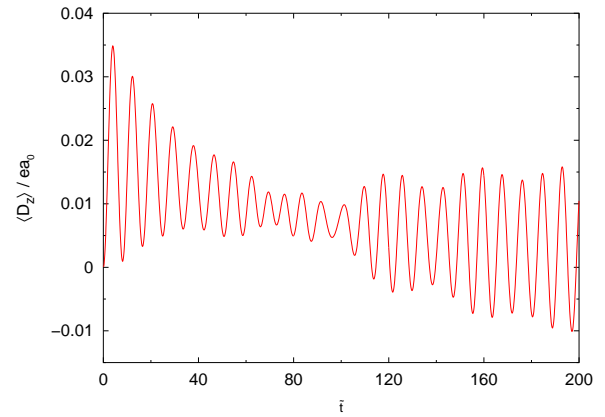
Mynd 3: Tímabróun tvískautsvægisins fyrir mismunandi gildi á n_{\max} með $\bar{\tau} = 100$ og $\alpha = 0,01$.

Á mynd 4(a) má sjá sams konar graf þar sem α -gildinu hefur verið breytt í 0,001 (10 sinnum veikara rafsvið). Sem fyrr má sjá veldisvísislögunina í hliðrun jafnvægisstöðunnar en grafið er mun reglulegra, hviðurnar eru minni og reglubundnari. Fyrir 10 sinnum sterkara rafsvið, $\alpha=0,1$ (sem þó ætti ekki að vera nóg til að jóna atómið), var farið í gegnum sams konar athugun og áður á því hvaða n_{\max} -gildi væri heppilegt að nota. Varð $n_{\max} = 8$ fyrir valinu. Á mynd 4(c) má sjá sams konar graf og áður fyrir $n_{\max} = 8$, $\alpha = 0,1$ og $\bar{\tau} = 100$. Enn má greina veldisvísislögunina en hviðurnar eru orðnar meiri og flóknari eins og búast má við þegar sterkara rafsvið á í hlut. Við sjáum líka að tvískautsvægið tífaldast u.þ.b. á milli mynda 4(a) og 4(b) annars vegar og mynda 4(b) og 4(c) hins vegar í samræmi við að rafsviðið tífaldast í hvoru tilfelli.

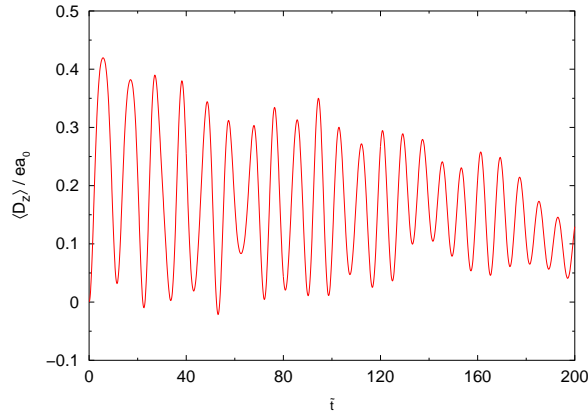
Nú var prófað að breyta gildinu á $\bar{\tau}$ en halda α föstu. Sams konar gröf og áður fyrir



(a) $\alpha = 0,001$ og $n_{\max} = 7$



(b) $\alpha = 0,01$ og $n_{\max} = 7$



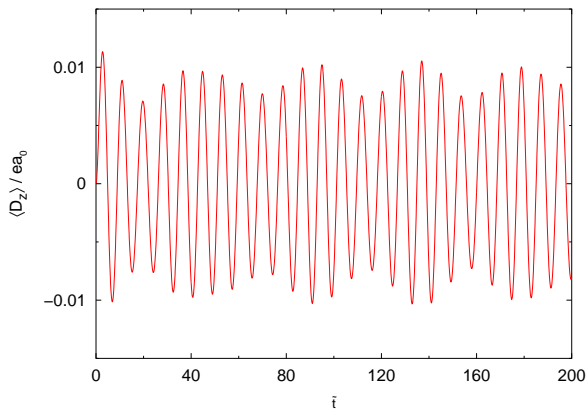
(c) $\alpha = 0,1$ og $n_{\max} = 8$

Mynd 4: Tímabróun tvískautsvægisins fyrir mismunandi gildi á α með $\tilde{\tau} = 100$.

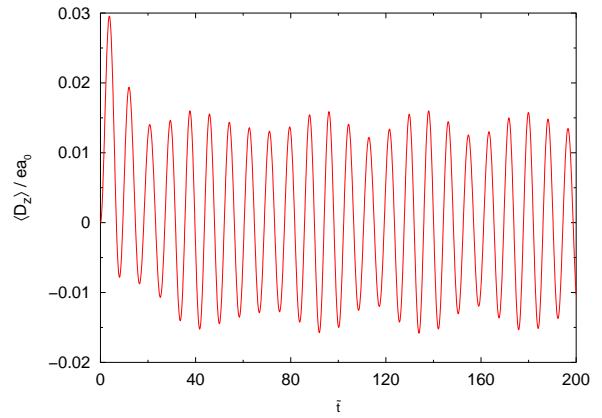
$n_{\max} = 7$, $\alpha = 0,01$ og $\tilde{\tau} = 1$, $\tilde{\tau} = 10$, $\tilde{\tau} = 100$ og $\tilde{\tau} = 1000$ má sjá á mynd 5. Fyrir $\tilde{\tau} = 1$ og $\tilde{\tau} = 10$ má sjá hvernig rafsviðið og þar með hliðrun jafnvægisstöðunnar frá núlli deyr hratt út. Rafsviðið verkar í skamman tíma og hviðurnar eru tiltölulega einfaldar. Fyrir $\tilde{\tau} = 100$ og einkum $\tilde{\tau} = 1000$ verkar rafsviðið í lengri tíma og hefur meiri áhrif og hegðunin verður flóknari.

Tíðustu sveiflurnar á fyrrnefndum gröfum svara til orkumunarins milli grunnástands og fyrsta örvaða ástands. Hviðurnar sem sjást eru tilkomnar vegna samspils við hærri örvuð ástönd. Vegna Stark-hrifa (meira um þau í grein 5.3) minnkar orkubilið milli grunnástands og fyrsta örvaða ástands með auknu rafsviði. Þegar rafsviðið deyr út ætti því tíðni tíðustu sveiflanna að aukast. Það er nákvæmlega það sem sést ef grannt er skoðað.

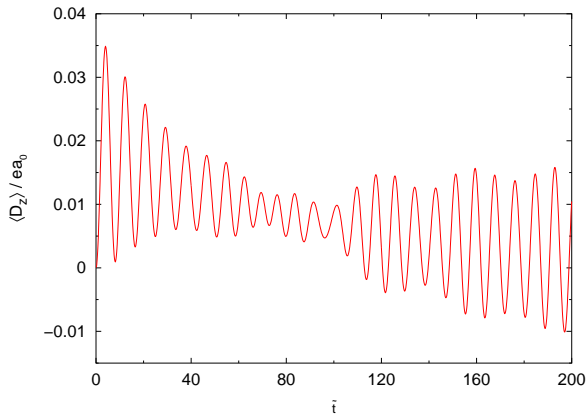
Við tökum að lokum eftir að jákvætt formerki er á tvískautsvæginu. Þetta er í samræmi við það að rafsvið í jákvæða z -stefnu hliðrar rafeindinni í neikvæðu stefnuna og veldur þar með tvískautsvægi í jákvæða z -stefnu.



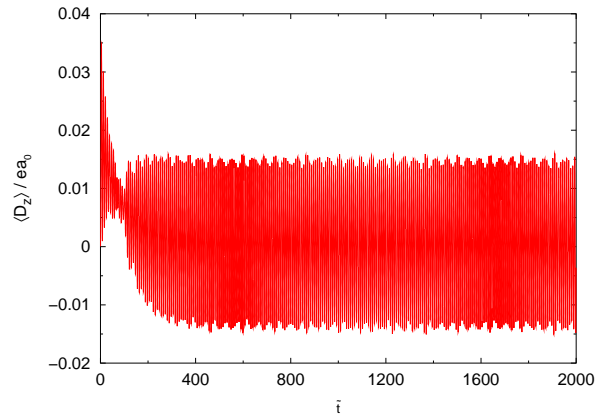
(a) $\bar{\tau} = 1$



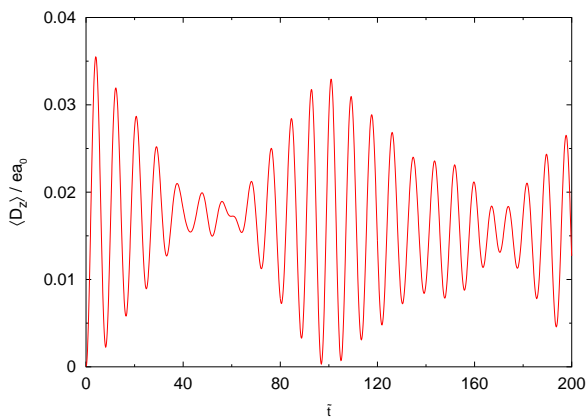
(b) $\bar{\tau} = 10$



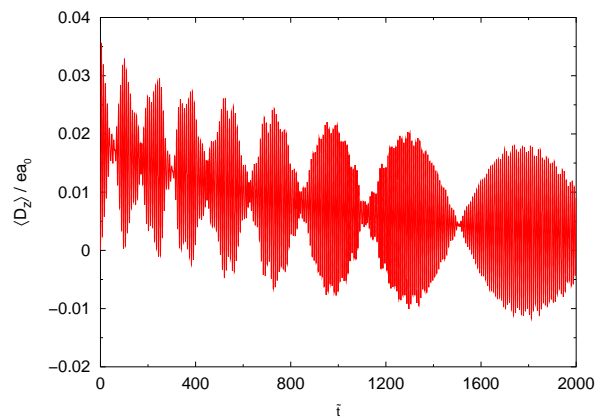
(c) $\bar{\tau} = 100$



(d) $\bar{\tau} = 100$



(e) $\bar{\tau} = 1000$



(f) $\bar{\tau} = 1000$

Mynd 5: Tímabróun tvískautsvægisins fyrir mismunandi gildi á $\bar{\tau}$ með $\alpha = 0,01$ og $n_{\max} = 7$.

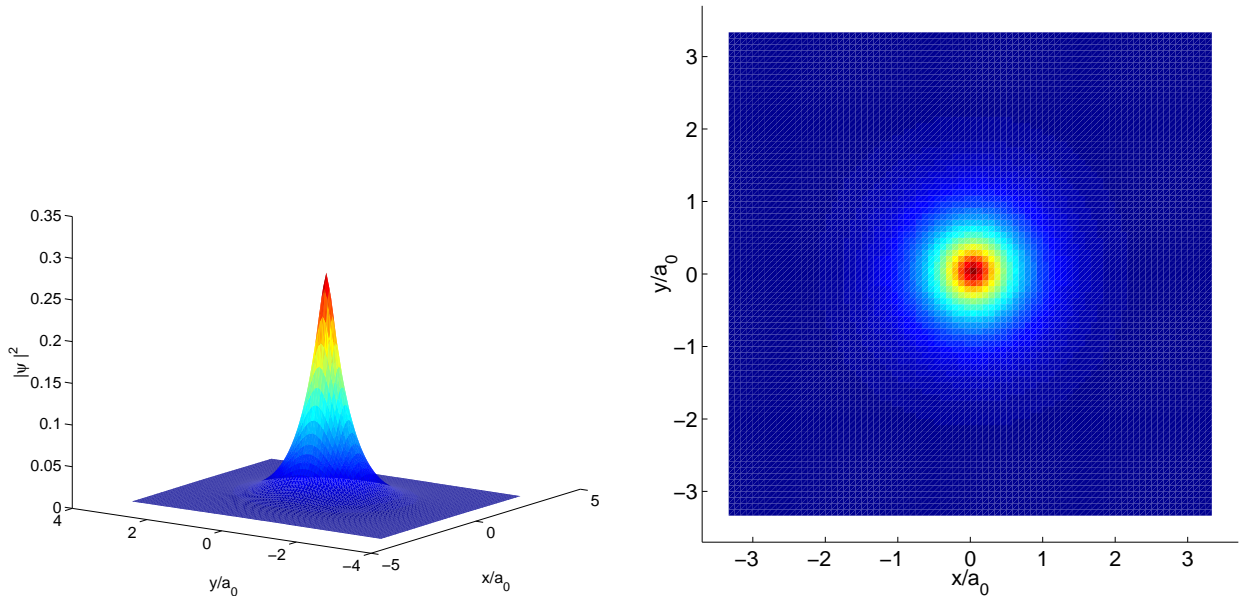
5.2 Líkindaþéttleiki rafeindarinnar

Með c -stuðlunum, kúluföllunum og radíalföllunum er hægt að reikna líkindaþéttleika bylgjufalls rafeindarinnar með jöfnu (3.38). Þar sem aðeins er um eina rafeind að ræða er líkindaþéttleikinn sama stærð og agnaþéttleikinn. Eftirleiðis munum við oft nota orðið þéttleiki um þessar stærðir. Til að skoða graf af þéttleikanum er nauðsynlegt að skoða hann í einhverju plani, þannig að aðeins tvö rúmhnit séu að breytast, og nota þriðju víddina fyrir þéttleikann.

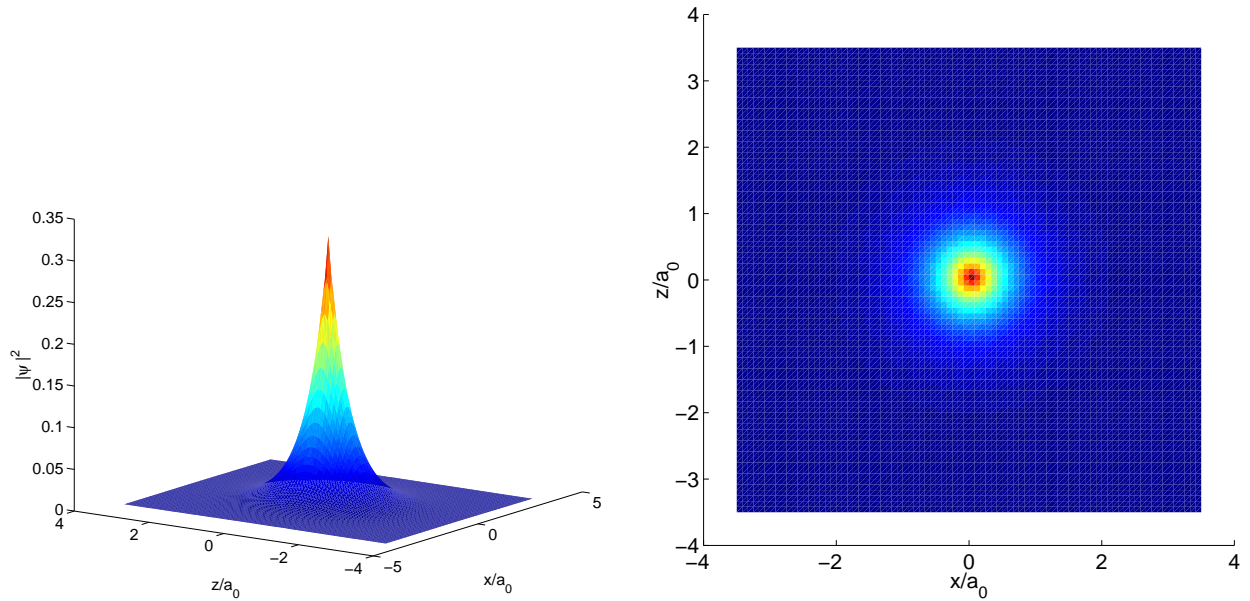
Í reikningum og teikningu á þéttleika leggjum við hnitakerfið þannig að \tilde{z} -ásinn liggja samsíða rafsviðinu í gegnum miðju kjarnans. Upphafspunktur hnitakerfisins er settur í miðju kjarnans. Þegar þéttleikinn er skoðaður í plani samsíða rafsviðinu er það látið vera $\tilde{x}\tilde{z}$ -planið (þ.e. $\tilde{y} = 0$).

Byrjað var á að skoða líkindaþéttleikann í plani sem er hornrétt á ytra rafsviðið og í dálítilli fjarlægð frá miðju kjarnans. Þetta var gert fyrir nokkur \tilde{z} -gildi og nokkra tímapunkta valda af handahófi á grafinu á mynd 5(c). Með þessu var athugað hvort sívalningssamhverfa um \tilde{z} -ásinn væri í þéttleikanum eins og við má búast. Skemmst er frá því að segja að sú samhverfa var í öllum tilfellum nákvæmlega til staðar. Eitt af þessum gröfum er mynd 6. (Öll gröf af þéttleika voru teiknuð í `Matlab`.) Þéttleiki grunnástandsins, þ.e. kerfisins á tíma $\tilde{t} = 0, 0$, í $\tilde{x}\tilde{z}$ -planinu er á mynd 7 og sýnir sömu sívalningssamhverfu og í tilfelli plans hornrétt á ytra rafsvið. Þetta bendir til þess að grunnástandið sé kúlusamhverft eins og við vitum að það á að vera.

Eftirleiðis var líkindaþéttleikinn skoðaður í plani samsíða rafsviðinu gegnum miðju kjarnans. Vegna sívalningssamhverfunnar um \tilde{z} -ásinn skiptir ekki máli hvernig planið snýr, þ.e.a.s. það breytir engu þótt því sé snúið um \tilde{z} -ásinn. Fróðlegt er að skoða hvernig þéttleikinn

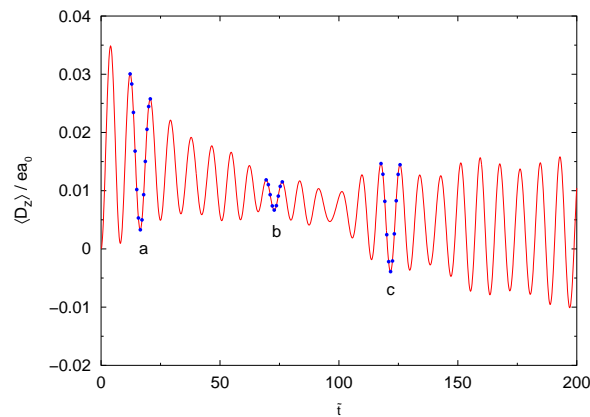


Mynd 6: Þéttleiki kerfis á tímanum $\tilde{t} = 94, 0$ í planinu $\tilde{z} = 1, 0$. $\tilde{\tau} = 100$, $\alpha = 0, 01$ og $n_{\max} = 7$.



Mynd 7: Þéttleiki kerfis á tímanum $\tilde{t} = 0,0$ í planinu $\tilde{y} = 0,0$. $\tilde{\tau} = 100$, $\alpha = 0,01$ og $n_{\max} = 7$.

breytist yfir heila lotu í sveiflunum í tvískautsvæginu. Valdir voru þrjú staðir á grafinu á mynd 5(c) og þéttleikinn teiknaður með stuttu millibili yfir heila lotu á hverjum stað. Mynd 8 sýnir þá punkta sem þéttleikinn var reiknaður í. Hér eftir köllum við sveiflurnar sem valdar voru a , b og c í samræmi við mynd 8.



Mynd 8: Sama mynd og 5(c) en bætt hefur verið inn þeim punktum sem þéttleikinn var reiknaður í. Skoðaðar eru sérstaklega þrjár sveiflur nefndar a , b og c .

Þar sem breytingar á þéttleikanum eru litlar er hentugt að skoða mismun á honum á gefnum tímamarki og þéttleika grunnástandsins. Þannig má sjá greinilegar hvaða breytingar verða. Eðlilegt er að skoða myndirnar í hverri sveiflu sem hreyfimynd í tíma. Slíkar

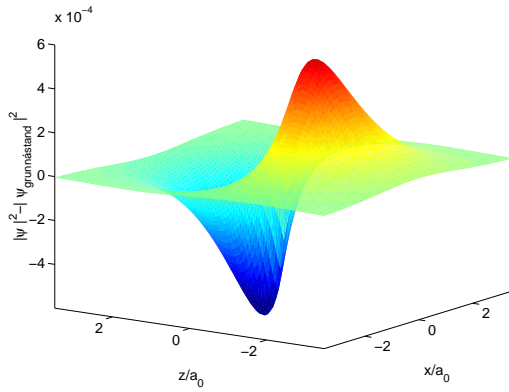
myndir voru búnar til í Matlab og má nálgast þær á slóðinni www.hi.is/~jensba/tolvuedl.html eða www.raunvis.hi.is/~jensba/tolvuedl.html. Rammar fyrir valda tímapakta úr hreyfimyndunum eru á mynd 9 fyrir sveiflu a , mynd 10 fyrir sveiflu b og mynd 11 fyrir sveiflu c .

Lítum aðeins betur á þéttleikamyndirnar og tökum hverja sveiflu fyrir. Í sveiflu a sjáum við að mismunurinn er jákvæður fyrir neikvæð \tilde{z} -gildi í samræmi við að rafeindin leitar í neikvæða \tilde{z} -stefnu. Aðeins ein rafeind er til staðar á öllum tímapakta og því þarf mismunurinn á móti að vera neikvæður fyrir jákvæð \tilde{z} -gildi. Augljóst er af þessum myndum hvernig tvískautsvægið sem verður til í kerfinu er tilkomið.

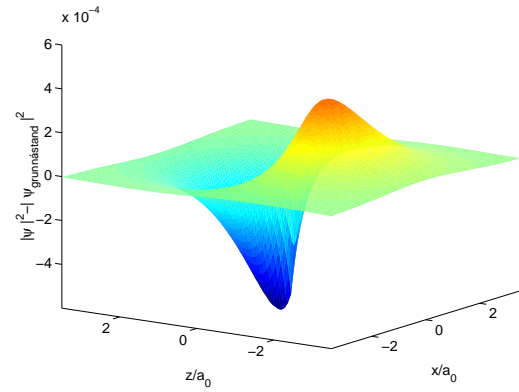
Í sveiflu b og c sjáum við aðra hegðun. Útslagið er mun meira sem segir okkur að breytingarnar eru meiri. Í sveiflu b fáum við ekki mjög augljóst tvískaut eins og í sveiflu a sem skýrist að hluta til af því að tvískautsvægið er minna (sbr. mynd 8). Ljóst er því að komnir eru einhverjir aðrir sveifluhættir inn í kerfið sem yfirgnæfa tvískautssveifluháttinn. Af lögun þéttleikans má ætla að það sé m.a. einhvers konar einskaut eða öndunarháttur (*e. breathing mode*). Hann lýsir sér í því að atómið blæs út og dregst saman til skiptis sem þýðir að þéttleiki rafeindarinnar er til skiptis minni eða meiri í kringum kjarnann.

Í sveiflu c , einkum á hreyfimyndunum, má sjá samspil tvískauts- og einskautssveifluháttar. Það lýsir sér í því að einskautstoppur eins og í sveiflu b hliðrast fram og til baka í \tilde{z} -stefnuna eins og tvískautsvægið.

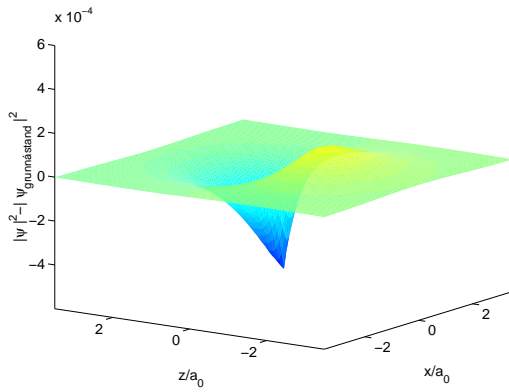
Þetta eru auðvitað atriði sem kanna mætti betur en við höfum ekki komist í á þeim tíma sem ætlaður var þessu verkefni.



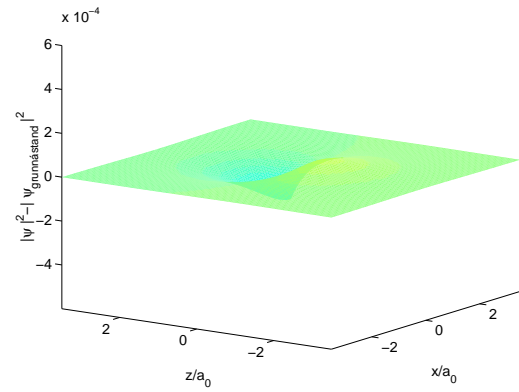
(a) $\bar{t} = 12,2$



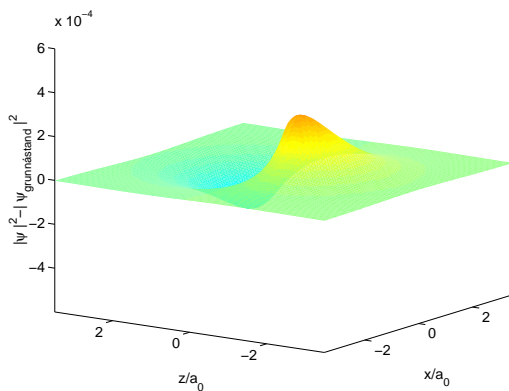
(b) $\bar{t} = 13,6$



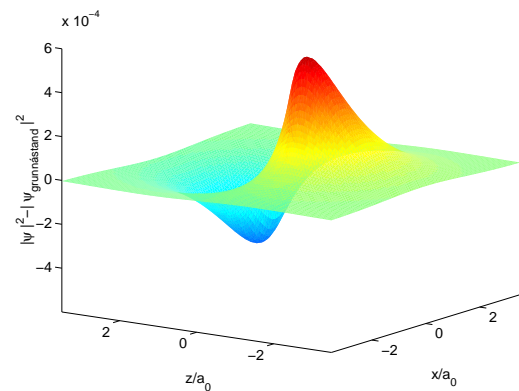
(c) $\bar{t} = 15,0$



(d) $\bar{t} = 16,5$

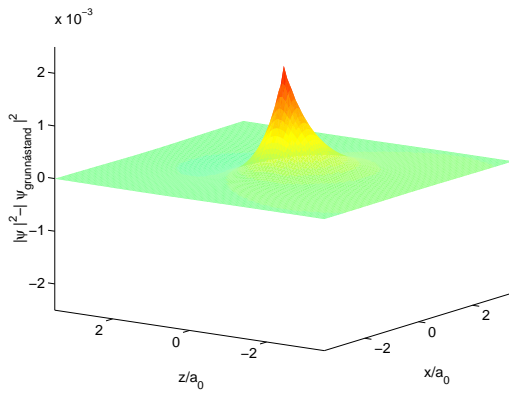


(e) $\bar{t} = 17,9$

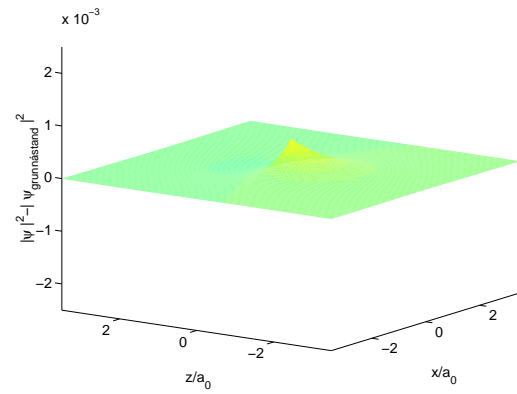


(f) $\bar{t} = 19,3$

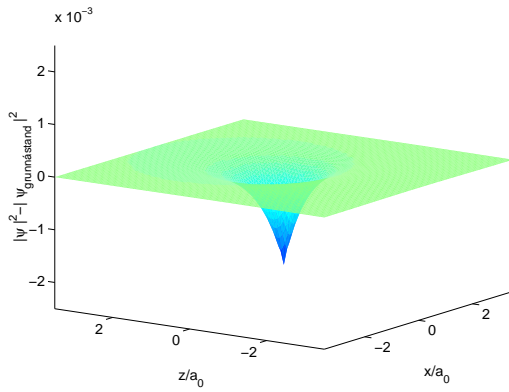
Mynd 9: Mismunur á þéttleika og þéttleika grunnástands fyrir mismunandi tímapunnta. $n_{\max} = 7$, $\alpha = 0,01$ og $\bar{\tau} = 100$.



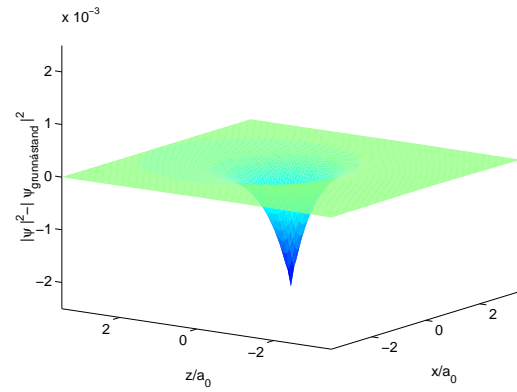
(a) $\bar{t} = 69,4$



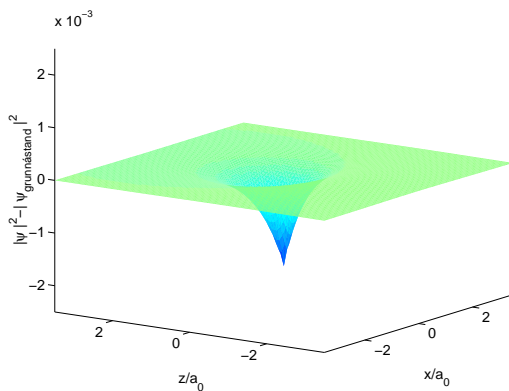
(b) $\bar{t} = 71,1$



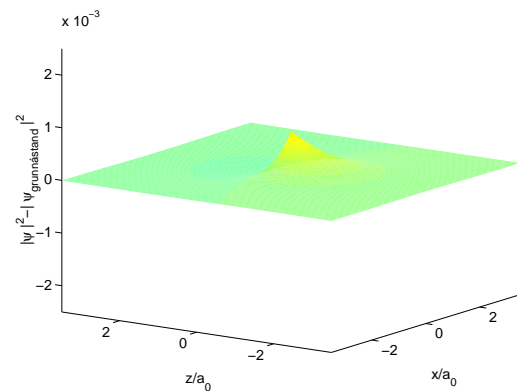
(c) $\bar{t} = 72,8$



(d) $\bar{t} = 73,7$

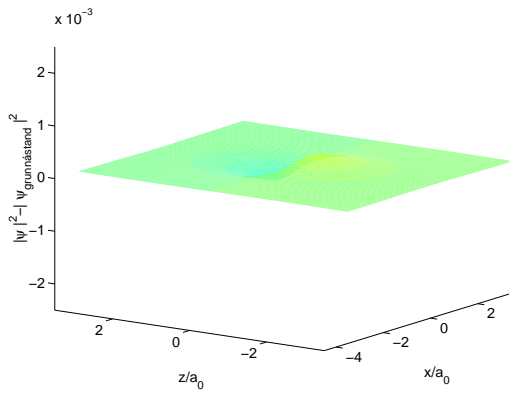


(e) $\bar{t} = 74,5$

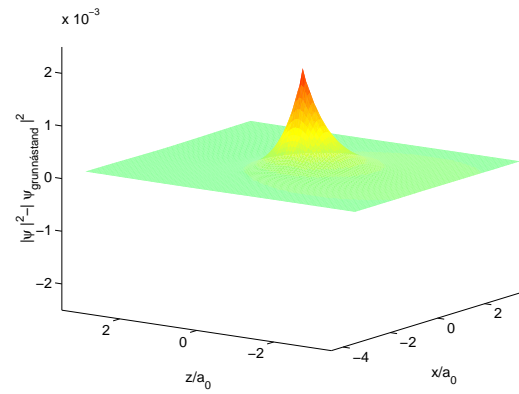


(f) $\bar{t} = 76,2$

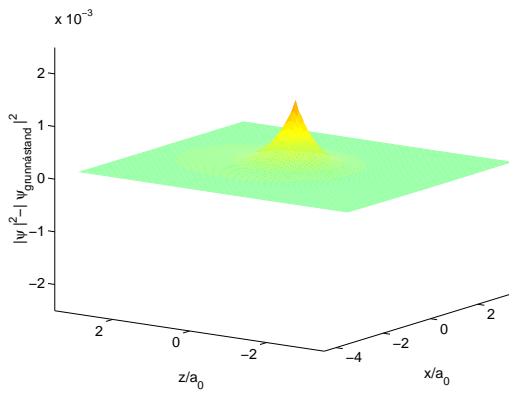
Mynd 10: Mismunur á þéttleika og þéttleika grunnástands fyrir mismunandi tímapunnta. $n_{\max} = 7$, $\alpha = 0,01$ og $\bar{\tau} = 100$.



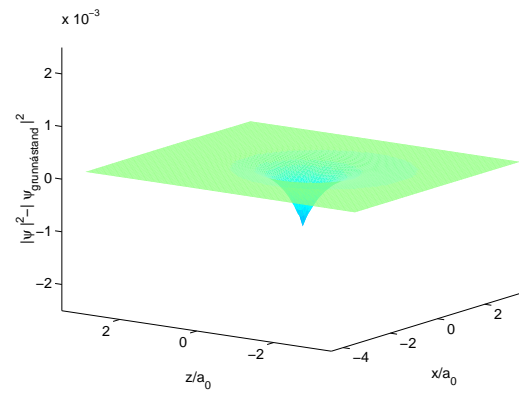
(a) $\bar{t} = 117,7$



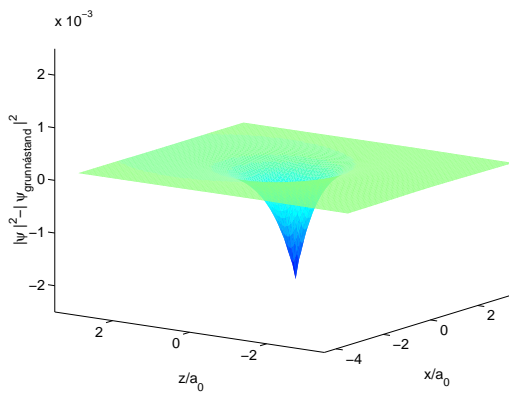
(b) $\bar{t} = 119,3$



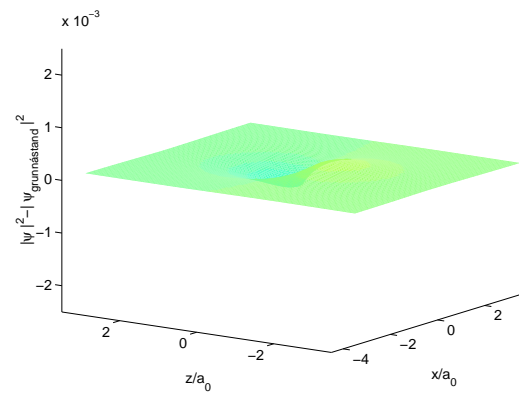
(c) $\bar{t} = 120,9$



(d) $\bar{t} = 122,5$



(e) $\bar{t} = 124,1$

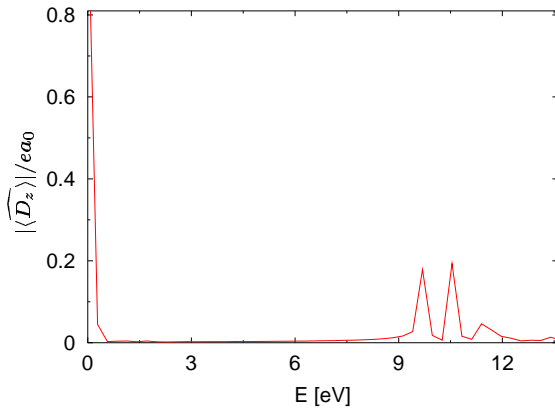


(f) $\bar{t} = 125,7$

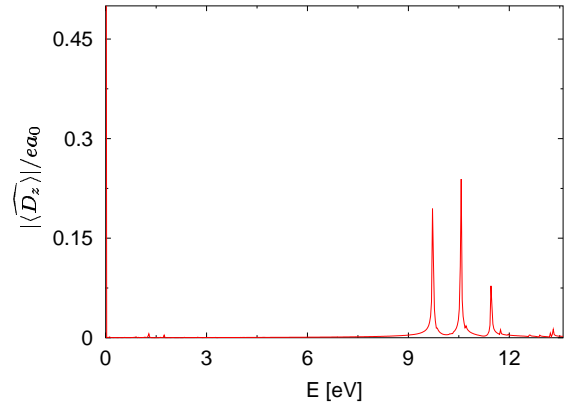
Mynd 11: Mismunur á þéttleika og þéttleika grunnástands fyrir mismunandi tímapunnta. $n_{\max} = 7$, $\alpha = 0,01$ og $\bar{\tau} = 100$.

5.3 Fourier-greining

Til að fá upplýsingar um hvaða orkustig eru að taka þátt í sveiflunum í tvískautsvæginu var strjál Fourier-ummyndun (sbr. jöfnur (4.3) og (4.9)) notuð á gögnin. Til að góð upplausn fáið er oft nauðsynlegt að hafa bilið milli tímapunkta, $\Delta\tilde{t}$, stórt (en ekki of stórt, sbr. umfjöllun í kafla 4). Þá þarf hins vegar líka að Fourier-ummynda stórt bil til að fjöldi gagnapunkta, N , sé ekki of lítil (sjá jöfnu (4.14)). Þetta getur stundum leitt til vandamála ef bilið sem rafsviðið er ekki hverfandi á er mjög lítil hluti af heildartímabilinu sem er Fourier-ummyndað. Þá getur verið að tíðniþættir, sem eru mikilvægir þegar rafsviðið er sterkt í upphafi en koma lítið við sögu síðar, hverfi í Fourier-ummynduninni í skuggann af þeim tíðniþáttum sem eru mikilvægir þegar rafsviðið er dáíð út. Taka ber fram að rafsviðið hliðrar orkustigunum í kerfinu og klýfur sum þeirra sem eru margföld. Það er því ekki hægt að tala um nein föst orkustig í kerfinu þegar rafsviðið er að breytast.



(a) $\Delta\tilde{t} = 0,1$ og $\tilde{T} = 300$ ($n_{\max} = 15$)



(b) $\Delta\tilde{t} = 0,5$ og $\tilde{T} = 3000$ ($n_{\max} = 10$)

Mynd 12: *Fourier-ummyndun tvískautsvægis í föstu sviði ($\tilde{\tau} = \infty$, $\alpha = 0,01$) fyrir mismunandi tímaskref og tímabil. Á (a) fást toppar í 9,7 eV, 10,5 eV og 11,4 eV með 0,3 eV óvissu en á (b) eru topparnir í 9,72 eV, 10,57 eV og 11,46 eV með óvissu 0,03 eV.*

Byrjað var á að Fourier-greina gögn fyrir fast svið ($\tilde{\tau} = \infty$, $\alpha = 0,01$). Þar sem sviðið er fast eru orkustigin í kerfinu vel skilgreind. Þetta var annars vegar gert fyrir $\Delta\tilde{t} = 0,1$ og $\tilde{T} = 300$, og hins vegar fyrir fimmfalt lengra bil milli punkta og tífalt lengra tímabil, sem gaf tífalt betri upplausn í samræmi við jöfnu (4.14) (mynd 12). Staðsetningar toppanna þriggja ættu að gefa orkubilin milli grunnástandsins og orkustiganna sem topparnir svara til. Fróðlegt er að bera þetta saman við niðurstöður fyrsta stigs truflanareiknings. Hliðrun orkustiga í vetnisatómi vegna fasts einsleits rafsviðs er kölluð Stark-hrif. Orka grunnástandsins hliðrast ekki neitt til skv. fyrsta stigs truflanareikningi en rafsviðið klýfur $n = 2$ orkustigið. Fyrir $m = 1$ og $m = -1$ er engin hliðrun en $m = 0$ orkustigin ($l = 0$ og $l = 1$) klofna og er klofnunin gefin með [6]

$$\Delta E_{\pm} = \pm 3a_0 e |\mathbf{E}| \quad (5.1)$$

þar sem \mathbf{E} er rafsviðið. Í okkar tilfalli er $|\mathbf{E}| = \mathcal{E}$ og skilgreiningin á α (jafna (3.23)) gefur

þá að

$$\Delta E_{\pm} = \pm 3\alpha E_0. \quad (5.2)$$

Fyrir $\alpha = 0,01$ fæst

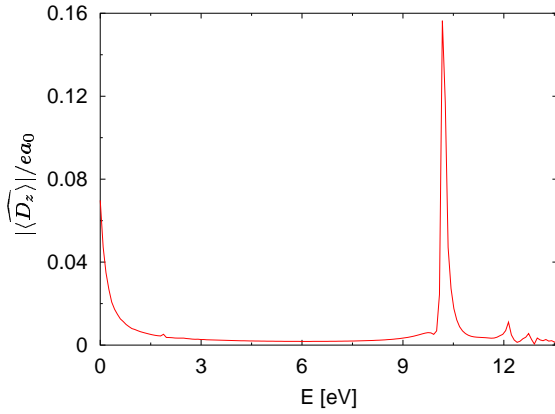
$$\Delta E_{\pm} = \pm 0,408 \text{ eV}. \quad (5.3)$$

Þar sem óhliðruðu orkustigin eru gefin með [1]

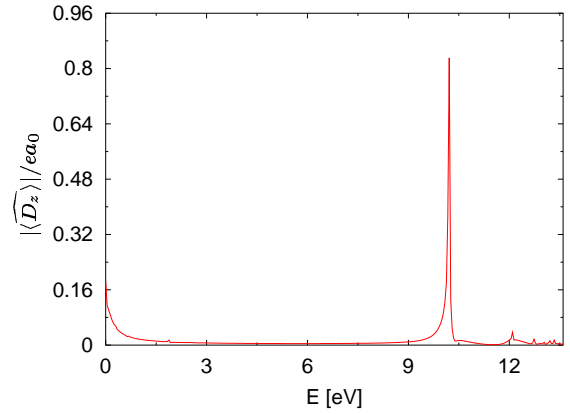
$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} E_0 \quad (5.4)$$

fæst að orkubilið milli grunnástandsins og neðsta $n = 2$ stigsins er 9,80 eV og milli grunnástandsins og efsta $n = 2$ stigsins er 10,61 eV. Staðsetningar fyrstu tveggja toppanna á grafinu með betri upplausnina eru hins vegar $(9,72 \pm 0,03)$ eV og $(10,57 \pm 0,03)$ eV. Þetta passar ágætlega saman þegar tekið er tillit til þess að aðeins er um fyrsta stigs truflanareikning að ræða, ekki nákvæm samanburðargildi. Við tökum eftir því að það er enginn toppur svarandi til óhliðruðu $m = \pm 1$ stiganna. Þetta er í fullkomnu samræmi við það að valreglur fyrir tvískautsgeislun leyfa engin stökk milli grunnástandsins og þessara stiga vegna þess að m -gildin eru mismunandi. Þriðji toppurinn á grafinu svarar væntanlega til einhvers $n = 3$ orkustigs.

Einnig voru Fourier-ummynduð gögn fyrir $\alpha = 0,01$ eins og áður en tímaháð rafsvið, $\tilde{\tau} = 100$ (sjá mynd 5(c)). Til að fá almennilega upplausn hér þurfti að Fourier-ummynda langt tímabil. Við sjáum á mynd 13 að það er einn mjög stór toppur og nokkrir minni fyrir aftan. Staðsetningar toppanna á grafinu með betri upplausnina eru 10,22 eV, 12,10 eV og 12,74 eV með óvissu 0,04 eV í hverju tilfalli. Til samanburðar gefur jafna (5.4) að ótrufluðu orkubilin milli grunnástandsins og $n = 2$, $n = 3$ og $n = 4$ stiganna eru 10,20 eV, 12,09 eV og 12,76 eV. Við erum því bara að sjá ótruflaða orkurófið á grafinu. Skýringin er sú að á stærstum hluta tímabilsins sem verið er að Fourier-ummynda er rafsviðið alveg hverfandi og orkustigin nánast alveg ótrufluð. Áhrifin frá þeim hluta tímabilsins þegar rafsviðið er verulegt eru yfirgnæfð af hinum hlutanum. Við sjáum líka á útslagi toppanna að fyrsta örvaða ástandið leikur langstærst hlutverk í sveiflunum í tvískautsvæginu þegar rafsviðið er dáið út og regla hefur komist á sveiflurnar. Hærri örvuðu ástöndin koma svo lítillega inn og valda væntanlega hviðunum sem sjást á grafinu af tvískautsvæginu. Á fyrsta hluta grafsins eru þau væntanlega að koma inn með mun sterkari hætti en til til að skoða það þarf að Fourier-ummynda styttra tímabil og þá verða gagnapunkturarnir færri og upplausnin verri.



(a) $\Delta\tilde{t} = 1$ og $\tilde{T} = 1000$



(b) $\Delta\tilde{t} = 0,1$ og $\tilde{T} = 2000$

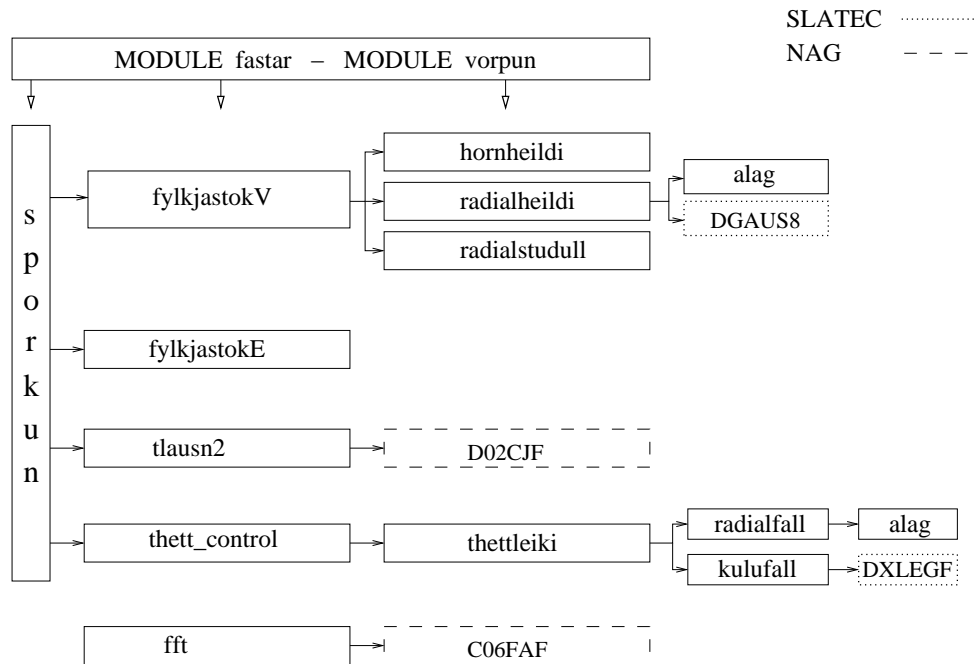
Mynd 13: *Fourier-ummyndun tvískautsvægis í sviði með $\alpha = 0,01$, $\tilde{\tau} = 100$ og $n_{\max} = 7$. Á (a) fást toppar í 10,2 eV, 12,1 eV og 12,7 eV með 0,1 eV óvissu en á (b) eru topparnir í 10,22 eV, 12,10 eV og 12,74 eV með óvissu 0,04 eV.*

6 Forrit og prófanir

Forritið sem notað var til reikninga var skrifað í **Fortran 95** og er forritskóðinn í viðauka A. Hér ætlum við ekki að fara í smáatriðum gegnum hvernig forritið virkar heldur segja frá því í grófum dráttum. Uppbyggingu forritsins er best lýst með mynd, sjá mynd 14. Grunneiningin er aðalforritið **sporkun**, sem sér um að halda utan um alla reikninga, og tvö module, **fastar** og **vorpun**, sem notuð eru víðs vegar í kóðanum. Inniheldur **fastar** eins og nafnið bendir til ýmsa fasta sem nota þarf hér og þar og **vorpun** inniheldur stefjur með vörpuninni $(n, l, m) \rightarrow j$ (sbr. jöfnu (3.13)) og andhverfu hennar sem oft þarf að nota.

Aðalforritið **sporkun** byrjar á því að kalla á stefjuna **fylkjastokV** til að reikna fylkisstökin U_{ij} (þau eru kölluð V_{ij} í kóðanum). Til að reikna þessi fylkisstök kallar **fylkjastokV** á undirstefjurnar **hornheildi**, **radialheildi** og **radialstudull** til að reikna mismunandi þætti fylkisstakanna. Undirstefjan **radialheildi** lætur stefjuna **alag** reikna út fyrir sig gildi tengdra Laguerre-margliða og SLATEC-stefjan **DGAUS8** sér um heildunina. Aðalforritið **sporkun** kallar næst á stefjuna **fylkjastokE** til að reikna út fyrir sig fylkisstökin E_{ij} . Þegar heildarfylkisstökin fyrir hneppið (3.30) og (3.31) eru komin (þau eru kölluð H_{ij} í kóðanum) sendir **sporkun** þau til stefjunnar **tlausn2** sem skilar lausn diffurjöfnuhneppisins en til að leysa jöfnuhneppið notar hún NAG-stefjuna **D02CJF**. Þegar jöfnuhneppið hefur verið leyst reiknar **sporkun** sjálf út væntigildi z -þáttar tvískautsvægisvirkjans en kallar á stefjuna **thett_control** sem heldur utan um þéttleikareikningana. Um reikningana sjálfa sér undirstefjan **thettleiki**. Til að reikna út gildi radíalfalla kallar hún á undirstefjuna **radialfall** sem kallar sjálf á fyrrnefnda stefju **alag**. **thettleiki** kallar einnig á undirstefjuna **kulufall** til að reikna út gildi kúlufalla en sú stefja notar SLATEC-stefjuna **DXLEGF** til að reikna út gildi tengdra Legendre-margliða.

Staka stefjan **fft** reiknar strjála Fourier-ummyndun af einhverju inntaki. Í okkar tilfelli



Mynd 14: Uppbygging forrits og tengsl stefja. Stefjur úr stefjusöfnunum NAG og SLATEC eru sérstaklega merktar.

notum við hana til að reikna Fourier-ummyndun tvískautsvægisins. Við útreikningana notar hún NAG-stefjuna C06FAF.

Ýmislegt var gert til að staðfesta að forritið ynni rétt. Fyrir allar stefjur sem reikna t.d. gildi einhvers þekktis falls í gefnum punkti var tekið mikið af stikkprufum og borið saman við handbókargildi til að ganga úr skugga um að stefjan virkaði rétt.

Í sérhvert skipti sem diffurjöfnuhneppið (3.30) og (3.31) var leyst var summan

$$\sum_j |c_j|^2 \quad (6.1)$$

reiknuð og athugað hvort hún væri jöfn 1, þ.e. hvort bylgjufallið héldist staðlað eins og það á að gera. Þetta reyndist passa upp á a.m.k. 20 aukastafi í sérhverju tilfelli.

Að snúa við stefnu rafsviðsins og láta það vera í neikvæðu z -stefnuna í stað þeirrar jákvæðu jafngildir því að við skiptum um formerki á stærðinni α . Við þessa breytingu skiptir seinni liðurinn innan sviganna í jöfnum (3.30) og (3.31) um formerki og lausnin á hneppinu breytist. Hins vegar er augljóst að gildi eðlisfræðilegara stærða eins og væntigildis tvískautsvægisvirkjans ættu ekki að breytast við þetta nema að formerki til. Prófað var að reikna tvískautsvægið fyrir nokkur α og $-\alpha$ og í öllum tilfellum fékkst nákvæmlega sama niðurstaða með gagnstæðu formerki.

Eins og sagt var frá í grein 5.2 helst alltaf sívalningssamhverfa í líkindaþéttleika rafeindarinnar um z -ás, í samræmi við það sem við má búast. Einnig sést kúlusamhverfa í þéttleika grunnástandsins eins og vera ber.

Loks ber að nefna hið góða samræmi sem fékkst þegar orkugildin sem fengust með Fouriergreiningu á tvískautsvæginu voru borin saman við hið þekkta orkuróf vetnisatóms og fyrsta stigs truflanareikning á hliðrun orkustiganna í rafsviði (sbr. grein 5.3).

Ofangreind atriði benda í sameiningu sterklega til þess að forritið virki rétt.

7 Lokaorð

Þegar vetnisatóm er sett í einsleitt tímaháð rafsvið hliðrast rafeindin og fer að sveiflast. Þessar sveiflur koma fram á ýmsan hátt, líkindaþéttleikinn breytist og vegna hliðrunar kemur fram tvískautsvægi í atóminu. Þetta tvískautsvægi sveiflast um jafnvægisstöðu sem nálgast núllið eins og veldisvísifall með tímastuðli rafsviðsins. Með Fourier-greiningu má finna tíðniróf þessara sveiflna sem eru tilkomnar vegna samspils grunnástands og örvaðra ástanda. Tíðnirófið má tengja orkurófi kerfisins en orkustigin breytast þó með rafsviðinu og því e.t.v. ekki rétt að tala um orkustig nema sviðið sé fast. Fourier-ummyndun á tvískautsvægi í föstu sviði gaf einmitt gildi á orkustigum vetnisatómsins sem voru í samræmi við þekkt gildi fengin með fyrsta stigs truflanareikningi. Einnig voru orkugildi sem fengust með Fourier-ummyndun þar sem áhrif rafsviðsins voru hverfandi í samræmi við orkuróf vetnis.

Sveiflur í tvískautsvægi voru ekki einu sveifluhættirnir sem sáust heldur komu einnig fram sveiflur sem e.t.v. má tengja við einskaut eða einhvers konar öndunarhátt. Þetta lýsir sér í því að atómið þenst út og dregst saman til skiptis. Ekki gafst tími til að kanna þetta frekar en áhugavert væri að kanna betur þennan og aðra sveifluhætti atómsins.

Í þessu verkefni einbeittum við okkur að því að rannsaka vetnisatóm. Í framhaldinu mætti skoða frumeind með fleiri rafeindir, t.d. Li sem hefur þrjár. Þá þyrfti að taka tillit til einsetulögmáls Paulis sem og víxlverkana milli rafeindanna en það myndi flækja útreikninga mikið. Því mætti hugsa sér að sleppa því að taka tillit til víxlverkana en þannig fengist ekki jafn eðlisfræðilega áhugavert kerfi.

Reykjavík, 22. apríl 2002

Jens Hjörleifur Bárðarson

Jóel Karl Friðriksson

Heimildir

- [1] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu og Franck Laloë. *Quantum Mechanics*, fyrra bindi. Hermann, París og John Wiley & Sons, Inc., New York, 1977.
- [2] Ira N. Levine. *Quantum Chemistry*, 4. útgáfa. Prentice-Hall International, Inc., London, 1991.
- [3] Anton Z. Capri. *Nonrelativistic Quantum Mechanics*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., Menlo Park, California, 1985.
- [4] I. S. Gradshteyn og I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series, and Products*, 5. útgáfa. Academic Press, Inc., San Diego, 1994.
- [5] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu og Franck Laloë. *Quantum Mechanics*, seinna bindi. Hermann, París og John Wiley & Sons, Inc., New York, 1977.
- [6] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*, 3. útgáfa. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1998.

A Forritskóði

Í þessum viðauka er allur kóðinn sem notaður var í verkefninu. Hann var skrifaður í Fortran 95 og þýddur með ifc (intel fortran compiler).

Fyrst kemur aðalforritið sporkun en á undan því eru tvö module, **fastar** og **vorpun**.

```
! Fastar skilgreindir. Long gefur double precision nákvæmnina sem við viljum nota.
! Z er sætistala kjarnans, n_max er hæsta gildi á aðalskammtatölunni n sem
! við notum í reikningunum. i_max og i_max2 eru tilsvareandi gildi á i.
```

```
MODULE fastar
  IMPLICIT NONE
  INTEGER, PARAMETER :: long = SELECTED_REAL_KIND(15,307)
  REAL(long), PARAMETER :: pi = 3.14159265358979324D0
  INTEGER, PARAMETER :: n_max = 7
  REAL(long), PARAMETER :: Z = 1D0
  REAL(long), PARAMETER :: alfa = 1D-2
  REAL(long), PARAMETER :: t_0 = 0D0
  REAL(long), PARAMETER :: tau = 1D2
  REAL(long), PARAMETER :: tskref = 8D-1
  ! n_max og i_max2 eru tengdar stærðir
  ! n_max 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16
  ! i_max2 30 55 91 140 204 285 385 506 650 819 1015 1240 1496
  INTEGER, PARAMETER :: i_max2 = 140
  INTEGER :: i_max
END MODULE
```

```
! Vörpun milli (n,l,m) og i
```

```
MODULE vorpun
  IMPLICIT NONE
  CONTAINS

  SUBROUTINE i_visir(n,l,m,i)
    INTEGER, INTENT(IN) :: n
    INTEGER, INTENT(IN) :: l
    INTEGER, INTENT(IN) :: m
    INTEGER, INTENT(OUT) :: i
    i=n*(2*n-1)*(n-1)/6+l**2+m+1+1
  END SUBROUTINE i_visir

  SUBROUTINE nlmvisar(i,n,l,m)
    INTEGER, INTENT(IN) :: i
    INTEGER, INTENT(OUT) :: n,l,m
    INTEGER :: tala
    LOGICAL :: flag
    tala=i
    flag=.TRUE.
    n=1
```

```

DO WHILE (flag)
  IF (tala <= (n+1)*(2*(n+1)-1)*((n+1)-1)/6) THEN
    flag=.FALSE.
  ELSE
    n=n+1
  END IF
END DO
flag=.TRUE.
tala=tala-n*(2*n-1)*(n-1)/6
l=0
DO WHILE (flag)
  IF (tala <= (l+1)**2) THEN
    flag=.FALSE.
  ELSE
    l=l+1
  END IF
END DO
m=tala-l**2-l-1
END SUBROUTINE nlmvisar

```

END MODULE vorpun

```

! -----
! Hér hefst aðalforritið.
! Sér um að kalla á stefjur sem reikna fylkisstök og leysa
! diffurjöfnuhneppi.
! -----

```

```

PROGRAM Main
  USE fastar
  USE vorpun
  IMPLICIT NONE

```

```

! Bý til interface til að tala við aðrar stefjur
INTERFACE

```

```

  SUBROUTINE fylkjastokV(i,j,V_ij)
    USE fastar
    USE vorpun
    IMPLICIT NONE
    INTEGER, INTENT(IN) :: i
    INTEGER, INTENT(IN) :: j
    REAL (long), INTENT(OUT) :: V_ij
  END SUBROUTINE fylkjastokV

```

```

  SUBROUTINE fylkjastokE(i,E_i)
    USE fastar

```

```

    USE vorpun
    IMPLICIT NONE
    INTEGER, INTENT(IN) :: i
    REAL(long), INTENT(OUT) :: E_i
END SUBROUTINE fylkjastokE

SUBROUTINE tlausn2(E,V,t_upph,t_loka,c_upph,c_loka)
    USE fastar
    IMPLICIT NONE
    REAL(long), DIMENSION(i_max2,i_max2), INTENT(IN) :: E,V
    REAL(long), INTENT(IN) :: t_loka,t_upph
    REAL(long), DIMENSION(2*i_max2), INTENT(IN) :: c_upph
    REAL(long), DIMENSION(2*i_max2), INTENT(OUT) :: c_loka
END SUBROUTINE tlausn2

END INTERFACE

! Skilgreini fylki og aðrar breytur sem nota þarf í reikningum
REAL(long), DIMENSION(:,), ALLOCATABLE :: V
REAL(long), DIMENSION(:,), ALLOCATABLE :: E
REAL(long), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: c,c_loka
COMPLEX(long), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: c_loka_compl
REAL(long) :: t_upph,t_loka,summa
COMPLEX(long) :: tvipoll
INTEGER :: i,j,n,l,m,deltat

! Reikna víddina á fylkinu sem við notum og skilgreini þannig stærð þess
CALL i_visir(n_max,n_max-1,n_max-1,i_max)

! Set víddina á fylkin V og E
ALLOCATE(V (1:i_max, 1:i_max))
ALLOCATE(E (1:i_max, 1:i_max))

! Reikna fylkisstökin V_{ij}
DO j = 1,i_max
    DO i = 1,i_max
        CALL fylkjastokV(j,i,V(j,i))
    END DO
END DO

! Reikna fylkisstökin E
DO i = 1,i_max
    CALL fylkjastokE(i,E(i,i))
END DO

! Bý til upphafsástandið
ALLOCATE(c (1:2*i_max))

```

```

c = 0D0
c(1) = 1D0

ALLOCATE(c_loka (1:2*i_max))

! Reikna allt sem fall af t
ALLOCATE(c_loka_compl (1:i_max))
OPEN(UNIT=2,FILE='dataskrar/fft/adalb.dat',STATUS = 'NEW')
OPEN(UNIT=3,FILE='dataskrar/fft/adalbre.dat',STATUS = 'NEW')
t_upph = 0D0
t_loka = 0D0

! Byrjum á að reikna þéttleikann fyrir grunnástandið
CALL thettleiki(c,t_loka,'dataskrar/thettleiki/grunn.dat', &
               'dataskrar/thettleiki/grunnre.dat')

! Tímanum breytt, skrefstærðin er tskref
DO deltat = 1,20000

t_upph = t_loka
t_loka = tskref*deltat

! Reikna lausn jöfnunnar  $dc/dt = Hc$  á tímanum t
! og fæ þannig stuðlana í bylgjufallinu
CALL tlausn2(E,V,t_upph,t_loka,c,c_loka)

! thett_control sér um að stjórna þéttleikareikningum
CALL thett_control(c_loka,t_loka)

! Reikna summu tölugilda stuðlanna í öðru veldi
summa = 0D0
DO i=1,i_max
  summa = summa + c_loka(i)**2+c_loka(i+i_max)**2
END DO
print*,summa,t_upph,t_loka

! Reikna tvískautsvægið í z-stefnu
DO i = 1,i_max
  c_loka_compl(i) = CMPLX(c_loka(i),c_loka(i+i_max))
END DO

tvipoll = (0D0,0D0)
DO i = 1,i_max
  DO j = 1,i_max
    tvipoll = tvipoll - CONJG(c_loka_compl(i))*c_loka_compl(j)*V(i,j)
  END DO
END DO

```



```

! Skrifa niðurstöðurnar í skrá.
! Byrja á því að búa til haus ef við erum í fyrsta tím punkti.
IF (deltat == 1) THEN
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) '#-----'
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) '# Niðurstöður reikninga úr forritinu sporkun'
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) '# Breyturnar í keyrslunni voru valdar eftirfarandi: '
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) '# alfa = ', alfa
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) '# tau = ', tau
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) '# Z = ', Z
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) '# n_max = ', n_max
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) '# Í fyrsta dálki er tíminn og'
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) '# í öðrum dálki er z-þáttur tvískautsvægisins'
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) '#-----'
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) ' '

  WRITE(UNIT=3,FMT=*) '#-----'
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) '# Niðurstöður reikninga úr forritinu sporkun'
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) '# Breyturnar í keyrslunni voru valdar eftirfarandi: '
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) '# alfa = ', alfa
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) '# tau = ', tau
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) '# Z = ', Z
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) '# n_max = ', n_max
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) '# Í fyrsta dálki er tíminn og'
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) '# í öðrum dálki er raunhluti z-þátts tvískautsvægisins'
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) '#-----'
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) ' '
END IF

  WRITE(UNIT=2,FMT=*) t_loka, tvipoll
  WRITE(UNIT=3,FMT=*) t_loka, REAL(tvipoll)

! Læt nýja gildið á c vera jafnt c_loka því að c er upphafsgildið í næstu umferð
c = c_loka

END DO

! Loka opnum skráum
CLOSE(2)
CLOSE(3)

END PROGRAM Main

```

Fylkisstökin U_{ij} eru reiknuð með stefjunni fylkjastokV. Hún notar undirstefjurnar hornheildi, radialheildi og radialstudull til að reikna mismunandi þætti fylkisstakanna.

! Purfum að skilgreina fallið F í module til að Slatec-stefjan DGAUS8 geti notað það

```

! Búum þess vegna til eftirfarandi module
MODULE fylkjastok
USE fastar
IMPLICIT NONE
INTEGER :: n_i,l_i,m_i, n_j,l_j,m_j

CONTAINS

! Fallið F reiknar gildi heildisstofnsins í radíalheildinu
FUNCTION F(rho)
REAL(long), INTENT(IN) :: rho
REAL(long) :: F,alag,laguerre_i,laguerre_j
laguerre_i = alag(rho*2*Z/(FLOAT(n_i)),n_i-1_i-1,2*1_i+1)
laguerre_j = alag(rho*2*Z/(FLOAT(n_j)),n_j-1_j-1,2*1_j+1)

F = laguerre_i*laguerre_j*(rho**(3D0+1_i+1_j))*exp(-Z*(1/FLOAT(n_i)+1/FLOAT(n_j))*rho)

END FUNCTION F

END MODULE fylkjastok

! Þessi stefja reiknar fylkisstökin V_{ij}
SUBROUTINE fylkjastokV(i,j,V_ij)
USE fastar
USE vorpun
USE fylkjastok
IMPLICIT NONE
INTEGER, INTENT(IN) :: i
INTEGER, INTENT(IN) :: j
REAL(long), INTENT(OUT) :: V_ij
LOGICAL :: trivial
REAL(long) :: A_lm, B_lm, I_ij, R_ij, R_studull

! Frumstilli breytur
trivial = .TRUE.

! Byrja á því að fá n,m,l gildin út frá i gildinu
CALL nlmvisar(i,n_i,l_i,m_i)
CALL nlmvisar(j,n_j,l_j,m_j)

! Athuga hvort fylkisstakið er frábrugðið núlli
IF ((m_i == m_j) .AND. ((1_i == 1_j + 1) .OR. (1_i == 1_j - 1))) THEN
trivial = .FALSE.
ENDIF

! Ef svo er þarf að reikna það út
IF (trivial) THEN
V_ij = 0.0

```

```

ELSE
  ! Byrja á því að reikna hornheildið I_{ij}
  CALL hornheildi(l_i,m_i,l_j,m_j,I_ij)
  CALL radialstudull(n_i,n_j,l_i,l_j,R_studull)
  ! Þá er að reikna radíalheildið
  CALL radialheildi(n_i,n_j,l_i,l_j,R_ij)

  ! Setjum saman í fylkisstak
  V_ij = I_ij*R_studull*R_ij
ENDIF

CONTAINS

! Þessi stefja reiknar stuðul framan við radíalheildi
SUBROUTINE radialstudull(n_i,n_j,l_i,l_j,studull)

  INTEGER, INTENT(IN) :: n_i,n_j,l_i,l_j
  INTEGER :: k
  REAL(long) :: hropm_i,hropm_j
  REAL(long), INTENT(OUT) :: studull
  REAL(long) :: AAA,BBB

  hropm_i=n_i-l_i
  DO k=1,2*l_i
    hropm_i=hropm_i*(n_i-l_i+FLOAT(k))
  END DO
  hropm_j=n_j-l_j

  DO k=1,2*l_j
    hropm_j=hropm_j*(n_j-l_j+FLOAT(k))
  END DO

  AAA = 4D0*Z**(FLOAT(3+l_i+l_j))*2**(FLOAT(l_i+l_j))/&
        (n_i**(FLOAT(2+l_i))*n_j**(FLOAT(2+l_j)))
  BBB = hropm_i*hropm_j
  studull = AAA/SQRT(REAL(BBB))
END SUBROUTINE radialstudull

! Þessi stefja reiknar radíalheildið
SUBROUTINE radialheildi(n_i,n_j,l_i,l_j,R)
  INTEGER, INTENT(IN) :: n_i,n_j,l_i,l_j
  REAL(long), INTENT(OUT) :: R
  REAL(long) :: eps,A,heildi,summa,k
  INTEGER :: i,IERR
  INTEGER, PARAMETER :: i_max = 1D7
  eps = 1D-15
  k = -1D0
  i = 0

```

```

A = ODO
summa = ODO

! Heildið er reiknað með því að heilda yfir hlutbil og leggja saman heildisbútana
! Lengd bilanna er háð því hversu langt út í rho við erum komin, stjórnað með k
! Hættum ef viðbót er mjög lítil eða ef fjöldi hlutbila er kominn yfir i_max
DO
  ! Slatec-stefja sem sér um að heilda yfir hlutbil
  CALL DGAUS8(F,A,A+10**k,1D-17,heildi,IERR)
  i = i+1
  A = A + 10**k
  IF (i > 100) THEN
    k = 0
  ENDIF
  summa = summa + heildi

  ! Athugum hvort halda eigi áfram að heilda
  IF ((ABS(heildi) < eps) .OR. (i > i_max)) EXIT

END DO

! Skilum gildinu á heildinu
R = summa
END SUBROUTINE radialheildi

! Þessi stefja reiknar hornheildið
SUBROUTINE hornheildi(l_i,m_i,l_j,m_j,I)
  INTEGER, INTENT(IN) :: l_i,m_i,l_j,m_j
  REAL(long), INTENT(OUT) :: I

  ! Stuðlarnir A_{lm} og B_{lm} reiknast fyrst
  A_lm = SQRT(((l_i+m_i+1.0D0)*(l_i-m_i+1.0D0)/((2.0D0*l_i+1.0D0)*(2.0D0*l_i+3.0D0))))
  B_lm = SQRT((FLOAT((l_i+m_i))*FLOAT((l_i-m_i))/((2.0D0*l_i+1.0D0)*(2.0D0*l_i-1.0D0))))

  ! Hornheildið er síðan sett saman í lokagildið og skilað
  IF (l_j == l_i + 1) THEN
    I = A_lm
  ELSEIF (l_j == l_i - 1) THEN
    I = B_lm
  ENDIF

END SUBROUTINE hornheildi

END SUBROUTINE fylkjastokV

```

Við sjáum að stefjan radialheildi notar SLATEC-stefjuna DGAUS8 til að heilda og er heildis-

stofninn gefinn með fallinu F sem lætur stefjuna `alag` reikna fyrir sig gildi tengdra Laguerre-margliða. Stefjan `alag` var fengin að láni frá Viðari Guðmundssyni með góðfúslegu leyfi hans. Hún er skrifuð í Fortran 77 og er því nokkuð frábrugðin öðrum hlutum kóðans:

```

C -----
C   Laguerre-margliður  $L_n^m(x)$ 
C -----
C
   function alag(x,n,m)
   implicit real*8 (a-h,o-z)
   al1m=dfloat(m)+1.D0-x
   nt=n-1
   aql=1.D0
   bql=0.D0
   do i=1,nt
       sbq=-dfloat(n-i+m)/dfloat(n-i+1)
       saq=(dfloat(2*(n-i)+m+1)-x)/dfloat(n-i+1)
       aq=aql*saq+bql
       bq=aql*sbq
       aql=aq
       bql=bq
   end do
   alag=aql*al1m+bql
   if(n.eq.0) alag=1.D0
   end
C
C
C

```

Fylkisstökin E_{ij} eru reiknuð með stefjunni fylkjastokE:

```

! Þessi stefja reiknar fylkisstök E
SUBROUTINE fylkjastokE(i,stak)

USE fastar
USE vorpun

IMPLICIT NONE

INTEGER, INTENT(IN) :: i
REAL(long), INTENT(OUT) :: stak
INTEGER :: n,l,m

! Þurfum að þekkja gildið á n til að reikna fylkisstakið.
CALL nlmvisar(i,n,l,m)

```

```
! Stakið er í þessu tilfalli mjög einfalt
stak=-(Z**2)/(n**2)
```

```
END SUBROUTINE fylkjastokE
```

Diffurjöfnuhneppið er leyst með stefjunni tlausn2:

```
! Þessi stefja reiknar lausn á diffurjöfnuhneppinu
MODULE hneppisfall
USE fastar
USE vorpun
IMPLICIT NONE
REAL(long), DIMENSION(i_max2,i_max2) :: Ework, Vwork
REAL(long) :: rot
CONTAINS

! Stefja sem reiknar gildið á fallinu í diffurjöfnuhneppinu:
! dc/dt = F(c,t)
SUBROUTINE FCN(t_inn,c,F)
  REAL(long), INTENT(IN) :: t_inn
  REAL(long), DIMENSION(2*i_max), INTENT(IN) :: c
  REAL(long), DIMENSION(2*i_max), INTENT(OUT) :: F
  REAL(long), DIMENSION(i_max) :: c_re_dot, c_im_dot, c_re, c_im
  REAL(long), DIMENSION(i_max,i_max) :: Hwork

  Hwork = Ework + alfa*exp(-t_inn/tau)*Vwork      !Þetta er venjulegi liðurinn
!   Hwork = Ework + alfa*Vwork                    !Notaður fyrir fast svið

  c_re = c(1:i_max)
  c_im = c(i_max+1:2*i_max)
  c_re_dot = MATMUL(Hwork,c_im)
  c_im_dot = MATMUL(-Hwork,c_re)

  F = (/c_re_dot,c_im_dot/)

END SUBROUTINE FCN

! NAG-stefjan sem leysir diffurjöfnuhneppið krefst þess að notuð sé stefja
! sem sér um að prenta út gildi í millipunktum og ef þess er ekki óskað að notuð
! sé "tóma" NAG-stefjan. "Tóma" stefjan virkaði ekki þannig að búa þurfti til stefju
! sem prentar bara út gildi í tímupunktinum sem óskað er eftir.
SUBROUTINE output(Xsol,c)
  REAL(long), INTENT(INOUT) :: Xsol
  REAL(long), DIMENSION(2*i_max), INTENT(IN) :: c
  Xsol = rot
```

```

END SUBROUTINE output

! NAG-stefjan býður einnig upp á leit að rót á falli samhliða lausn á hneppi.
! Ef þess er ekki óskað þarf að nota "tómu" NAG-stefjuna en þar sem hún virkaði
! ekki var búið til fall með rót í tímapunktinum sem óskað er eftir.
FUNCTION G(x,c)
  REAL(long), INTENT(IN) :: x
  REAL(long), DIMENSION(2*i_max), INTENT(IN) :: c
  REAL(long) :: G
  G = rot - x
END FUNCTION G

END MODULE hneppisfall

! Þá kemur sjálf stefjan sem sér um að leysa gefið diffurjöfnuhneppi.
SUBROUTINE tlausn2(E,V,t_upph,t_loka,c_upph,c_loka)
  USE fastar
  USE hneppisfall
  IMPLICIT NONE
  ! Skilgreinum breytur og vinnufylki fyrir NAG-stefjuna.
  REAL(long), DIMENSION(i_max,i_max), INTENT(IN) :: E,V
  REAL(long), INTENT(IN) :: t_loka,t_upph
  REAL(long), DIMENSION(2*i_max), INTENT(IN) :: c_upph
  REAL(long), DIMENSION(2*i_max), INTENT(OUT) :: c_loka
  REAL(long) :: t,tol
  REAL(long), DIMENSION(2*i_max) :: c
  CHARACTER(1) :: relabs
  REAL(long), DIMENSION(28+21*2*i_max) :: W
  INTEGER :: ifail

  ! Gefum fylkjum gildi
  Ework = E
  Vwork = V
  rot = t_loka
  c = c_upph
  t = t_upph
  relabs = 'M'
  tol = 1D-15
  ifail = 0
  ! NAG-stefja sem leysir diffurjöfnuhneppið
  CALL D02CJF(t,t_loka,2*i_max,c,FCN,tol,relabs,output,G,W,ifail)
  c_loka = c

END SUBROUTINE tlausn2

```

Þéttleikinn er reiknaður yfir þrjár mismunandi sveiflur. Velja þarf í hvaða punktum reikna á þéttleikann því að reiknitíminn er talsverður fyrir hvern punkt. Stefjan `thett_control` sér

um að stjórna í hvaða punktum þéttleikinn er reiknaður:

```
! Þessi stefja sér um að stjórna því í hvaða punktum þéttleikinn er reiknaður
! Tekur inn tímapunkt og ákvarðar hvort reikna eigi þéttleikann í honum
! og ef svo er ákveður nöfn á skrár fyrir niðurstöður.
SUBROUTINE thett_control(c_loka,t_loka)
  USE fastar
  IMPLICIT NONE
  REAL(long), DIMENSION(2*i_max2), INTENT(IN) :: c_loka
  REAL(long), INTENT(IN) :: t_loka
  INTEGER :: t_int

  t_int = INT(t_loka*1000)

  ! Stór og mikil case-setning inniheldur alla tímapunkta sem reikna á þéttleikann í
  SELECT CASE(t_int)
  CASE(122)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a01.dat','dataskrar/thettleiki/a01re.dat')
  CASE(129)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a02.dat','dataskrar/thettleiki/a02re.dat')
  CASE(136)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a03.dat','dataskrar/thettleiki/a03re.dat')
  CASE(143)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a04.dat','dataskrar/thettleiki/a04re.dat')
  CASE(150)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a05.dat','dataskrar/thettleiki/a05re.dat')
  CASE(157)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a06.dat','dataskrar/thettleiki/a06re.dat')
  CASE(165)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a07.dat','dataskrar/thettleiki/a07re.dat')
  CASE(172)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a08.dat','dataskrar/thettleiki/a08re.dat')
  CASE(179)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a09.dat','dataskrar/thettleiki/a09re.dat')
  CASE(186)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a10.dat','dataskrar/thettleiki/a10re.dat')
  CASE(193)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a11.dat','dataskrar/thettleiki/a11re.dat')
  CASE(200)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a12.dat','dataskrar/thettleiki/a12re.dat')
  CASE(207)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/a13.dat','dataskrar/thettleiki/a13re.dat')
  CASE(694)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/b01.dat','dataskrar/thettleiki/b01re.dat')
  CASE(703)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/b02.dat','dataskrar/thettleiki/b02re.dat')
  CASE(711)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/b03.dat','dataskrar/thettleiki/b03re.dat')
  CASE(720)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/b04.dat','dataskrar/thettleiki/b04re.dat')
  CASE(728)
    CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/b05.dat','dataskrar/thettleiki/b05re.dat')
  CASE(737)
```



```

CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/b06.dat','dataskrar/thettleiki/b06re.dat')
CASE(745)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/b07.dat','dataskrar/thettleiki/b07re.dat')
CASE(753)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/b08.dat','dataskrar/thettleiki/b08re.dat')
CASE(762)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/b09.dat','dataskrar/thettleiki/b09re.dat')
CASE(1177)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c01.dat','dataskrar/thettleiki/c01re.dat')
CASE(1185)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c02.dat','dataskrar/thettleiki/c02re.dat')
CASE(1193)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c03.dat','dataskrar/thettleiki/c03re.dat')
CASE(1201)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c04.dat','dataskrar/thettleiki/c04re.dat')
CASE(1209)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c05.dat','dataskrar/thettleiki/c05re.dat')
CASE(1217)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c06.dat','dataskrar/thettleiki/c06re.dat')
CASE(1225)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c07.dat','dataskrar/thettleiki/c07re.dat')
CASE(1233)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c08.dat','dataskrar/thettleiki/c08re.dat')
CASE(1241)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c09.dat','dataskrar/thettleiki/c09re.dat')
CASE(1249)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c10.dat','dataskrar/thettleiki/c10re.dat')
CASE(1257)
CALL thettleiki(c_loka,t_loka,'dataskrar/thettleiki/c11.dat','dataskrar/thettleiki/c11re.dat')
END SELECT

END SUBROUTINE thett_control

```

Ef thett_control ákveður að reikna eigi þéttleikann í gefnum punkti lætur hún stefjuna thettleiki reikna hann:

```

! Þessi stefja reiknar þéttleikann fyrir gefið ástand og skrifar út í skrá
SUBROUTINE thettleiki(c,t,skra,skrare)
USE fastar
USE vorpun
IMPLICIT NONE
! Skilgreinum breytur
REAL(long), DIMENSION(2*i_max2), INTENT(IN) :: c
REAL(long), INTENT(IN) :: t
CHARACTER(30), INTENT(IN) :: skra
CHARACTER(32), INTENT(IN) :: skrare
REAL(long) :: z_plan
REAL(long) :: rho,theta,phi
INTEGER :: n_i,n_j,l_i,l_j,m_i,m_j,x,y,i,j,z_hnit
REAL(long) :: R_i,R_j

```

```
COMPLEX(long) :: Y_i,Y_j,psi_squared,c_i_cplx, c_j_cplx
CHARACTER(18) :: plan
```

```
! z_plan er notað þegar plan hornrétt á rafsvið er reiknað
z_plan = 1D0
! Þegar plan samsíða rafsviði er reiknað höfum við kosið að reikna y=0
y = 0
plan = 'samsíða rafsviði'
```

```
! Opnum skrár til að skrifa niðurstöður reikninga í
OPEN(UNIT=4,FILE=skra,STATUS = 'NEW')
OPEN(UNIT=5,FILE=skrare,STATUS = 'NEW')
```

```
! Byrjum á að búa til haus fyrir skrárnar
```

```
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '%-----'
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '% Niðurstöður reikninga úr stefjunni thettleiki'
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '% Breyturnar í keyrslunni voru valdar eftirfarandi: '
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '% alfa = ', alfa
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '% tau = ', tau
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '% Z = ', Z
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '% n_max = ', n_max
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '% t = ', t
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '% plan = ', plan
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '% Í fyrsta dálki er x, í öðrum z og þriðja þéttleikinn'
WRITE(UNIT=4,FMT=*) '%-----'
WRITE(UNIT=4,FMT=*) ' '
```

```
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '%-----'
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '% Niðurstöður reikninga úr stefjunni thettleiki'
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '% Breyturnar í keyrslunni voru valdar eftirfarandi: '
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '% alfa = ', alfa
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '% tau = ', tau
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '% Z = ', Z
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '% n_max = ', n_max
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '% t = ', t
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '% plan = ', plan
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '% Í fyrsta dálki er x, í öðrum z, þriðja RE(þéttleikinn)'
WRITE(UNIT=5,FMT=*) '%-----'
WRITE(UNIT=5,FMT=*) ' '
```

```
! Reiknum þéttleikann á neti
```

```
DO x = -42,42
DO z_hnit = -42,42
rho = SQRT(REAL((REAL(x)/12D0)**2+(REAL(y)/12D0)**2+REAL(z_hnit/12D0)**2))
phi = ATAN2(REAL(y)/12D0,REAL(x)/12D0)
theta = ATAN2(SQRT(REAL((REAL(x)/12D0)**2+(REAL(y)/12D0)**2)),REAL(z_hnit/12D0))
psi_squared = (0D0,0D0)
```

```

! Summum yfir öll gildi á i og j
DO i = 1,i_max2
  DO j = 1,i_max2
    ! finna n,l og m
    CALL nlmvisar(i,n_i,l_i,m_i)
    CALL nlmvisar(j,n_j,l_j,m_j)
    ! Reikna þéttleikann í punktinum rho,phi
    CALL radialfall(rho,n_i,l_i,R_i)
    CALL kulufall(theta,phi,l_i,m_i,Y_i)
    CALL radialfall(rho,n_j,l_j,R_j)
    CALL kulufall(theta,phi,l_j,m_j,Y_j)
    c_i_cmplx = CMPLX(c(i),c(i+i_max2))
    c_j_cmplx = CMPLX(c(j),c(j+i_max2))
    psi_squared = psi_squared + CONJG(c_i_cmplx)*c_j_cmplx*Y_i*Y_j*R_i*R_j
  END DO
END DO
! Skrifum niðurstöðurnar í skrá
WRITE(UNIT=4,FMT=*) REAL(x)/12D0,REAL(z_hnit)/12D0,psi_squared
WRITE(UNIT=5,FMT=*) REAL(x)/12D0,REAL(z_hnit)/12D0,REAL(psi_squared)
END DO
END DO

! Lokum skránum
CLOSE(4)
CLOSE(5)

END SUBROUTINE thettleiki

```

thettleiki lætur stefjurnar radialfall og kulufall reikna annars vegar gildið á radíalfallinu í gefnum punkti:

```

! Þessi stefja reiknar gildi radíalfallsins R_{n,l} í punktinum rho
SUBROUTINE radialfall(rho,n,l,R)
  USE fastar
  IMPLICIT NONE
  REAL(long), INTENT(IN) :: rho
  INTEGER, INTENT(IN) :: n,l
  REAL(long), INTENT(OUT) :: R
  REAL(long) :: hropm, AAA,studull,laguerre,alag
  INTEGER :: k

  ! Reiknum stuðulinn við radíalfallið
  hropm=n-1
  DO k=1,2*1
    hropm=hropm*(n-1+FLOAT(k))
  END DO

```

```

AAA = Z**(3D0/2D0+FLOAT(1))*2**(FLOAT(1)+1D0)*(REAL(n))**(-2D0-FLOAT(1))
studull = AAA/SQRT(REAL(hropm))

! Reiknum gildi tengdu Laguerre-margliðunnar  $L_{\{n-1-1\}}^{\{2l+1\}}$  í punktinum rho
laguerre = alag(rho*2*Z/(FLOAT(n)),n-1-1,2*1+1)

! Setjum saman í gildi radíalfallsins í punktinum rho
R = studull*(rho**1)*exp(-Z*rho/(FLOAT(n)))*laguerre

END SUBROUTINE radialfall

```

og hins vegar gildið á kúlufallinu í gefnum punkti:

```

! Þessi stefja reiknar gildi kúlufallsins  $Y_{\{lm\}}$  í punktinum (theta,phi)
SUBROUTINE kulufall(theta_inn,phi,l,m,Y)
USE fastar
IMPLICIT NONE
REAL(long), INTENT(IN) :: theta_inn,phi
INTEGER, INTENT(IN) :: l,m
COMPLEX(long), INTENT(OUT) :: Y
REAL(long) :: l_real,pqa,ipqa,AA,BB,studull,theta
INTEGER :: nudiff,m1,m2,id,ierror,k
LOGICAL :: staerra

! Núllstillum breyturarnar
theta = theta_inn
nudiff = 0
l_real = REAL(1)
id = 3
staerra = .FALSE.
ierror = 0

! Athugum hvort spegla þurfi theta-gildið
IF (theta > pi/2D0) THEN
  theta = pi - theta
  staerra = .TRUE.
END IF
m1 = abs(m)
m2 = m1

! Reiknum stuðul við kúlufall
BB = 1D0
DO k = (1-abs(m)+1),(1+abs(m))
  BB = BB*REAL(k)

```

```

ENDDO
AA = (2D0*l_real+1)/(4*pi)

IF (m < 0) THEN
  studull = ((-1)**m)*SQRT(REAL(AA/BB))
ELSE
  studull = SQRT(REAL(AA/BB))
END IF

! Reiknum gildið á tengdu Legendre-margliðunni
IF (theta == 0D0) THEN
  IF (m == 0) THEN
    pqa = 1D0
  ELSE
    pqa = 0D0
  END IF
ELSEIF (theta == pi) THEN
  IF (m == 0) THEN
    pqa = (-1)**1
  ELSE
    pqa = 0D0
  END IF
ELSE
  ! Slatec-stefja sem reiknar gildi tengdrar Legendre-margliðu
  CALL DXLEGF (l_real, nudiff, m1, m2, theta, id, pqa, ipqa,ierror)
END IF

! Reiknum lokagildið
IF ((ierror == 0)) THEN
  IF (staerra) THEN
    Y = CMPLX((( -1)**(1+abs(m)))*studull*pqa*cos(m*phi), &
              (( -1)**(1+abs(m)))*studull*pqa*sin(m*phi))
  ELSE
    Y = CMPLX(studull*pqa*cos(m*phi), studull*pqa*sin(m*phi))
  END IF
ELSE
  print*, 'ERROR, annaðhvort var ipqa eða ierror frábrugðið núlli'
END IF

END SUBROUTINE kulufall

```

Að lokum reiknar stefjan `fft` Fourier-ummyndun inntaksstærðar (í okkar tilfalli væntigildis z -þáttar tvískautvægisvirkja kerfisins) og nýtur við það aðstoðar NAG-stefjunnar `C06FAF`.

! Þessi stefja reiknar Fourier-ummyndun inntaksstærðar sem gefin er
! í strjálum punktum. Úttakið er tíðniróf inntakstærðarinnar sem einnig

```

! er sett fram sem orkuróf.
Program fft
  IMPLICIT NONE
  INTEGER, PARAMETER :: long = selected_real_kind(15,307)
  REAL(long), PARAMETER :: pi = 3.14159265358979324D0
  REAL(long), PARAMETER :: E_ryd = 13.6056981D0
  INTEGER, PARAMETER :: imax2 = 20000
  REAL(long), PARAMETER :: tskref = 8D-1
  REAL(long), DIMENSION(imax2) :: X
  REAL(long), DIMENSION(imax2) :: work
  INTEGER :: ifail,i

  ! Opnum skrána sem geymir inntaksstærðina
  OPEN(UNIT=3,FILE='adalbre.dat',STATUS='OLD')
  READ(UNIT=3,FMT=*) X
  ! Köllum á NAG-stefju sem reiknar strjálu Fourier-ummyndunina
  CALL C06FAF(X,imax2,work,ifail)

  ! Opnum úttakskrá
  OPEN(UNIT=2,FILE='fft_adalb2re.dat',STATUS='New')

  ! Skrifum út lausnina
  WRITE(UNIT=2,FMT=*) ODO,ODO,ABS(X(1))
  IF (MOD(imax2,2)==0) THEN
    DO i = 2,imax2/2
      WRITE(UNIT=2,FMT=*) (i-1)*2D0*pi/imax2/tskref,(i-1)*2D0*pi/imax2/tskref*E_ryd,&
        ENDDO
      WRITE(UNIT=2,FMT=*) (imax2/2)*2D0*pi/imax2/tskref,(imax2/2)*2D0*pi/imax2/tskref*E_ryd,&
        ABS(X(imax2/2+1))
    ELSE
      DO i = 2,(imax2+1)/2
        WRITE(UNIT=2,FMT=*) (i-1)*2D0*pi/imax2/tskref,(i-1)*2D0*pi/imax2/tskref*E_ryd,&
          Sqrt(REAL(X(i)**2+X(imax2-i+2)**2))
        ENDDO
      END IF

  ! Lokum opnum skrá
  CLOSE(2)
  CLOSE(3)

  END PROGRAM fft

```

B Teikning á þéttleika

Þéttleikamyndir voru teiknaðar í Matlab. Til að búa til hreyfimyndir voru notaðar stefjurnar `movie2avi` og `mpgwrite`. Fyrirnefnda stefjan er hluti af Matlab 6.0 en ná þarf sérstaklega í þá síðarnefndu og má t.d. nálgast hana á slóðinni <http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/Files.jsp?fileId=309>. Matlab-kóðinn er hér að neðan.

```
% Byrjum á að taka inn gögn og teikna þéttleikann í plani hornrétt á rafsviðið
x = -40/12:1/12:40/12;
m = length(x);

plan_horn = load('094tre.dat');
plan_hornz = reshape(plan_horn(:,3),m,m);
surf(x,x,plan_hornz);

xlabel('x/a_0');
ylabel('y/a_0');
zlabel('|psi|^2');
shading flat;
grid off;
view(-55,15);
print -depsc plan_horn.eps;
view(2);
axis([-3.7,3.7,-3.7,3.7]);
axis equal;
axis([-3.7,3.7,-3.7,3.7]);
print -depsc plan_horn_ofan.eps;

% Tökum inn gögn fyrir grunnástandið og teiknum það
grunn = load('grunnre.dat');
x = -42/12:1/12:42/12;
m = length(x);
grunnz = reshape(grunn(:,3),m,m);

surf(x,x,grunnz);
xlabel('x/a_0');
ylabel('z/a_0');
zlabel('|psi|^2');
shading flat;
grid off;
view(-55,15);
print -depsc grunn.eps;
view(2);
axis([-4,4,-4,4]);
axis equal;
axis([-4,4,-4,4]);
print -depsc grunn_ofan.eps;
```

```

%-----
% Tökum inn gögn fyrir a sveiflu
skrar = char(['a01re.dat';'a02re.dat';'a03re.dat';'a04re.dat';...
            'a05re.dat';'a06re.dat';'a07re.dat';'a08re.dat';'a09re.dat';...
            'a10re.dat';'a11re.dat';'a12re.dat';'a13re.dat'];]);
nofn = char(['a01re.eps';'a02re.eps';'a03re.eps';'a04re.eps'; ...
            'a05re.eps';'a06re.eps';'a07re.eps';'a08re.eps';'a09re.eps'; ...
            'a10re.eps';'a11re.eps';'a12re.eps';'a13re.eps'];]);
%-----

% Veljum ásana og litina
lim = [-3.5 3.5 -3.5 3.5 -6e-4 6e-4];
color = [-6e-4 6e-4];

% Tökum frá pláss fyrir rammanna í kvikmynd
Ma = moviein(length(skrar));
Ma2 = moviein(length(skrar));

% Teiknum myndir og ramma í kvikmynd fyrir a sveiflu
for i=1:length(skrar)
    plan = load(skrar(i,:));
    planz = reshape(plan(:,3),m,m);
    surf(x,x,planz-grunnz);

    caxis(color);
    axis(lim);
    grid off;
    xlabel('x/a_0');
    ylabel('z/a_0');
    zlabel('\psi |^2-| \psi_{grunnastand} |^2');
    shading flat;
    view(-55,15);
    Ma(:,i) = getframe;
    print('-depsc', nofn(i,:));
    view(2);
    axis([-4,4,-4,4]);
    axis equal;
    axis([-4,4,-4,4]);
    Ma2(:,i) = getframe;
end

movie2avi(Ma,'thetta','fps',3,'compression','none');
movie2avi(Ma2,'thetta2','fps',3,'compression','none');
% Stefjan mpgwrite er geymd í möppunni mpgwrite/
cd mpgwrite
mpgwrite(Ma,[],'thetta');
mpgwrite(Ma2,[],'thetta2');
cd ..

```



```

%-----
% Tökum inn gögn fyrir b sveiflu
skrar = char(['b01re.dat';'b02re.dat';'b03re.dat';'b04re.dat'; ...
             'b05re.dat';'b06re.dat';'b07re.dat';'b08re.dat';'b09re.dat'];]);
nofn = char(['b01re.eps';'b02re.eps';'b03re.eps';'b04re.eps'; ...
            'b05re.eps';'b06re.eps';'b07re.eps';'b08re.eps';'b09re.eps'];]);
%-----
% Veljum ásana og litina
lim = [-3.5 3.5 -3.5 3.5 -0.0025 0.0025];
color = [-0.0025 0.0025];

% Tökum frá pláss fyrir ramma í kvikmynd
Mb = moviein(length(skrar));
Mb2 = moviein(length(skrar));

% Teiknum myndir og ramma í kvikmynd fyrir b sveiflu
for i=1:length(skrar)
    plan = load(skrar(i,:));
    planz = reshape(plan(:,3),m,m);
    surf(x,x,planz-grunnz);

    caxis(color);
    axis(lim);
    grid off;
    xlabel('x/a_0');
    ylabel('z/a_0');
    zlabel('\psi |^2-| \psi_{grunnastand} |^2');
    shading flat;
    view(-55,15);
    Mb(:,i) = getframe;
    print('-depsc', nofn(i,:))
    view(2);
    axis([-4,4,-4,4]);
    axis equal;
    axis([-4,4,-4,4]);
    Mb2(:,i) = getframe;
end
movie2avi(Mb,'thettb','fps',3,'compression','none');
movie2avi(Mb2,'thettb2','fps',3,'compression','none');

% Stefjan mpgwrite er geymd í mpgwrite/
cd mpgwrite
mpgwrite(Mb,[],'thettb');
mpgwrite(Mb2,[],'thettb2');
cd ..

```

```

%%-----
%% Tökum inn gögn fyrir c sveiflu
skrar = char(['c01re.dat';'c02re.dat';'c03re.dat';'c04re.dat';'c05re.dat'; ...
             'c06re.dat';'c07re.dat';'c08re.dat';'c09re.dat';'c10re.dat';'c11re.dat'];]);
nofn = char(['c01re.eps';'c02re.eps';'c03re.eps';'c04re.eps';'c05re.eps'; ...
            'c06re.eps';'c07re.eps';'c08re.eps';'c09re.eps';'c10re.eps';'c11re.eps'];]);
%%-----
% Veljum ásana og litina
lim = [-4.5 3.5 -3.5 3.5 -0.0025 0.0025];
color = [-0.0025 0.0025];

% Tökum frá pláss fyrir rammuna í kvikmynd
Mc = moviein(length(skrar));
Mc2 = moviein(length(skrar));

% Teiknum myndir og ramma í kvikmynd í c sveiflu
for i=1:length(skrar)
    plan = load(skrar(i,:));
    planz = reshape(plan(:,3),m,m);
    surf(x,x,planz-grunnz);

    caxis(color);
    axis(lim);
    grid off;
    xlabel('x/a_0');
    ylabel('z/a_0');
    zlabel('\psi |^2-| \psi_{grunnástand} |^2');
    shading flat;
    view(-55,15);
    Mc(:,i) = getframe;
    print('-depsc', nofn(i,:))
    view(2);
    axis([-4,4,-4,4]);
    axis equal;
    axis([-4,4,-4,4]);
    Mc2(:,i) = getframe;
end
movie2avi(Mc,'thettc','fps',3,'compression','none');
movie2avi(Mc2,'thettc2','fps',3,'compression','none');
% Stefjan mpgwrite er geymd í mpgwrite/
cd mpgwrite
mpgwrite(Mc,[],'thettc');
mpgwrite(Mc2,[],'thettc2');
cd ..

```
