



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
GESELLSCHAFT MIT BESCHRÄNKTER HAFTUNG
Institut für Festkörperforschung

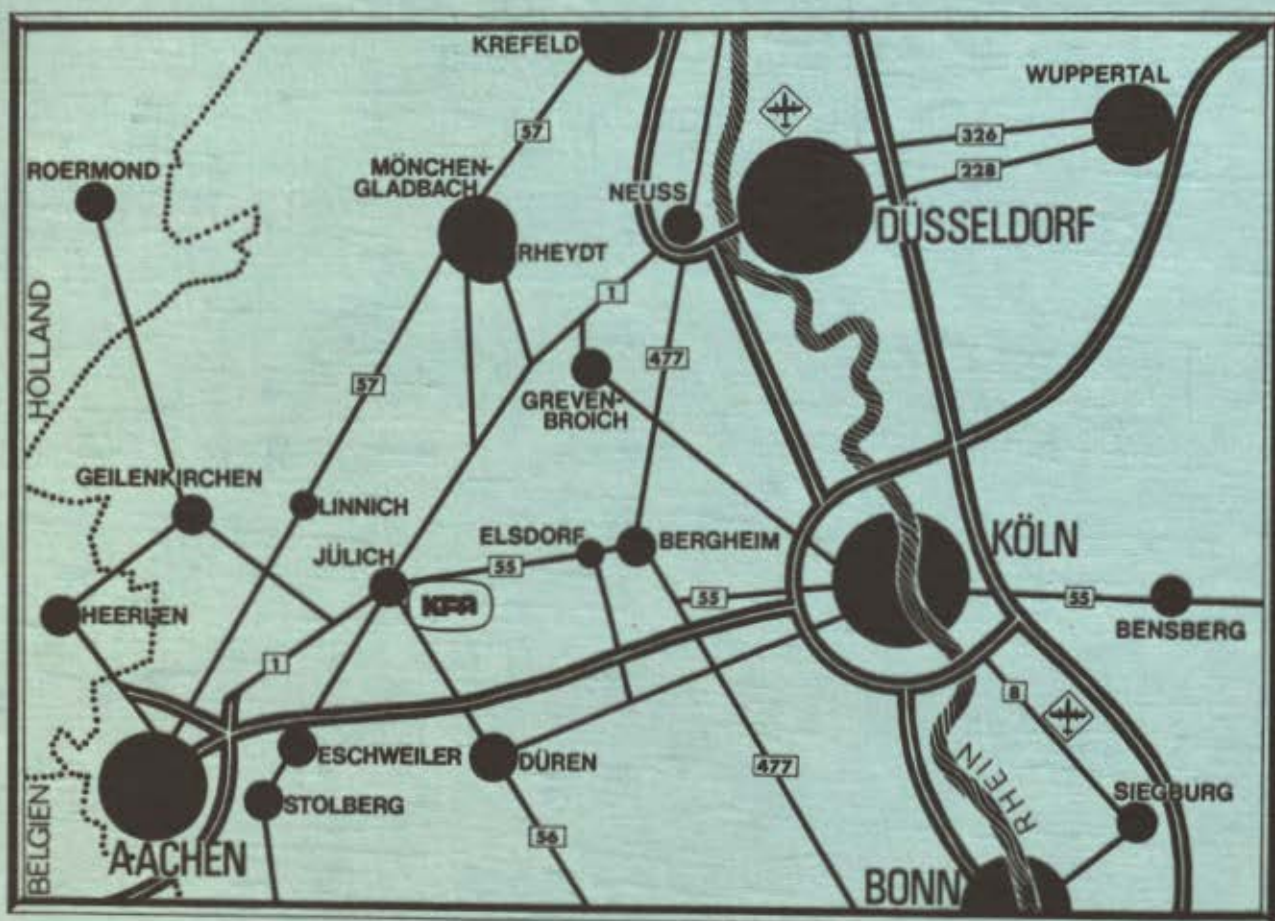
**Berechnung der Wirbelstruktur und des unteren
kritischen Feldes von Typ II Supraleitern bei
beliebiger Temperatur in Abhängigkeit von der
freien Weglänge**

von

L. Kramer, W. Pesch und R. von Seggern

Jül - 1149 - FF
Dezember 1974

Als Manuskript gedruckt



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 1149

Institut für Festkörperforschung Jül - 1149 - FF

Dok.: Superconductor Type 2 - Theory, Vortex Structure
Ellenberger Equation - Computer Program

Im Tausch zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH,
Jülich, Bundesrepublik Deutschland

Berechnung der Wirbelstruktur und des unteren kritischen Feldes von Typ II Supraleitern bei beliebiger Temperatur in Abhängigkeit von der freien Weglänge

von

L. Kramer, W. Pesch und R. von Seggern

BERECHNUNG DER WIRBELSTRUKTUR UND DES UNTEREN KRITISCHEN
FELDES VON TYP II SUPRALEITERN BEI BELIEBIGER TEMPERATUR
IN ABHÄNGIGKEIT VON DER FREIEN WEGLÄNGE

Lorenz Kramer und Werner Pesch⁺

Institut für Festkörperforschung der Kernforschungsanlage
Jülich.

und

Rainer von Seggern

Zentralinstitut für Angewandte Mathematik der Kernforschungs-
anlage, Jülich.

Wir danken vor allem Herrn Professor Dr. G.Eilenberger für
seine ständige Unterstützung und zahlreiche Anregungen bei
der Durchführung dieses Projektes. Den Herren Dr. Hoßfeld und
Dr. Profant danken wir für wertvolle Hilfe bei der Bewältigung
einiger numerischer Probleme. Schließlich sei noch hervor-
gehoben, daß die Untersuchung des schmutzigen Grenzfalles in
Zusammenarbeit mit Herrn Dr.Richard Watts-Tobin stattfand.

⁺Jetzige Anschrift: Institut für theoretische Physik der
Technischen Universität Hannover.

Abstract

The method used previously to solve Eilenberger's version of the Gorkov equations for vortices in type II superconductors at arbitrary temperature is described in detail. Some new results including the lower critical field for intermediate mean free path are presented and printouts of the computer programs are added.

1. EINLEITUNG

Diese Arbeit ist eine Art (vorläufiger) Abschlussbericht eines Projektes zur Untersuchung der Struktur und der thermodynamischen Eigenschaften von Typ II Supraleitern bei beliebiger Temperatur mit Hilfe der mikroskopischen Theorie. Den Ausgangspunkt der Untersuchung bildeten die von Eilenberger [1] aus der Gorkov Theorie hergeleiteten transportartigen Gleichungen. Die meisten Ergebnisse für den reinen [2,3,4] und den schmutzigen [5] Grenzfall sind bereits veröffentlicht worden. Im schmutzigen Grenzfall wurden auch die Zustandsdichte und einige Transporteigenschaften berechnet [6]. Hier werden zusätzlich Ergebnisse zur Struktur von isolierten Wirbeln und des unteren kritischen Feldes H_{c1} bei mittlerer Verschmutzung (mittlere freie Weglänge $\approx$ Kohärenzenlänge) vorgestellt. Die Ergebnisse zeigen, daß man eine monotone Abhängigkeit der physikalischen Eigenschaften vom Verunreinigungsgrad erwarten kann (zumindest bei isotroper Steuerung an Verunreinigungen). In der Praxis werden daher die Ergebnisse für den reinen und schmutzigen Grenzfall gute Anhaltspunkte für den Zwischenbereich geben können. Vor allem aber werden in dieser Arbeit die mathematische Methoden und die im reinen und schmutzigen Fall verwendeten Computerprogramme so ausführlich beschrieben, daß die Rechnungen nachvollzogen werden können. Die bei mittlerer Verschmutzung verwendeten Methoden sind denen des reinen Falles ähnlich.

Im Teil 2 sind die allgemeinen Eilenberger Gleichungen und

ihre Spezialisierung auf den schmutzigen Grenzfall [7] zusammengefasst. Ausserdem wird die Ginzburg-Landau Entwicklung angegeben. Im Teil 3 werden die oben erwähnten Ergebnisse für den Fall mittlerer Verschmutzung kurz diskutiert und mit den Ergebnissen im reinen und schmutzigen Grenzfall verglichen. Im Teil 4 werden die für die numerische Rechnung im reinen Fall wesentlichen Dinge besprochen. Der Teil 5 befasst sich in gleicher Weise mit dem schmutzigen Grenzfall. Am Schluß sind schließlich die beiden Fortran-Programme, so wie sie auf der IBM 370/165 verwendet wurden, abgedruckt.

2. ALLGEMEINE GRUNDLAGEN

a. Die Eilenberger Gleichungen

Das System der Eilenberger Gleichungen für Supraleiter mit sphärischer Fermioberfläche bei Vorhandensein von Verunreinigungen mit s- und p-Wellen Streuung ist gegeben durch [1]

$$[2\omega_{\ell} + v_F \hbar \hat{k} \cdot \vec{\sigma}] f(\omega_{\ell}, \hat{k}, \tau) = 2\Delta g + g \mathcal{I} f - f \mathcal{I} g; \quad (2.1)$$

$$[2\omega_{\ell} - v_F \hbar \hat{k} \cdot \vec{\sigma}^*] f^+(\omega_{\ell}, \hat{k}, \tau) = 2\Delta^* g + g \mathcal{I} f^+ - f^+ \mathcal{I} g;$$

$$\Delta(\tau) \ln T/T_c = -2\pi k_B T_c \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{\Delta(\tau)}{\omega_{\ell}} - \oint \frac{d^2 \hat{k}}{4\pi} f(\omega_{\ell}, \hat{k}, \tau) \right]; \quad (2.2)$$

$$\text{rot rot } \underline{A}(\underline{r}) = - \frac{8\pi e}{c} 2\pi k_B T N(0) v_F \sum_{\ell=0}^{\infty} \oint \frac{d^2 \hat{k}}{4\pi} \frac{\hat{k}}{i} g(\omega_{\ell}, \hat{k}, \underline{r}); \quad (2.3)$$

$$g = (1 - f f^+)^{1/2} \quad ; \quad \text{Re } g > 0 \quad ;$$

$$I h(\hat{k}) = \oint \frac{d^2 \hat{q}}{4\pi} \left(\frac{\hbar}{\tau} + 3 \frac{\hbar}{\tau_1} \hat{k} \cdot \hat{q} \right) h(\hat{q}) \quad ;$$

$$\omega_{\ell} = \pi k_B T (2\ell + 1) \quad ; \quad N(0) = k_F^2 / 2\pi^2 \hbar v_F.$$

Hierbei ist $\hat{k}$ ein Einheitsvektor, der die Richtung des Elektronenimpulses angibt und $\underline{\mathcal{D}} = \underline{\nabla} - i \frac{2e}{\hbar c} \underline{A}$ die eichinvariante Ableitung. Es gelten die Symmetrierelationen

$$f^*(-\hat{k}) = f^+(\hat{k}) \quad ; \quad g^*(-\hat{k}) = g(\hat{k}) \quad . \quad (2.4)$$

Zur Berechnung der freien Energie kann das folgende Funktional verwendet werden

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = & \int d^3 r \left\{ \frac{1}{8\pi} (\text{rot } \underline{A})^2 + |\Delta(\underline{r})|^2 N(0) \ln T/T_c \right. \\ & \left. + 2\pi k_B T N(0) \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{|\Delta(\underline{r})|^2}{\omega_{\ell}} - \oint \frac{d^2 \hat{k}}{4\pi} J(\omega_{\ell}, \hat{k}, \underline{r}) \right] \right\} ; \end{aligned} \quad (2.5)$$

mit

$$\begin{aligned} J(\omega_e, \hat{k}, \tau) = & \Delta^* f + \Delta f^+ \\ & - (1-g) \left(2\omega_e + \frac{\hbar v_F}{2} \hat{k} \cdot \left[\frac{1}{f} \partial f - \frac{1}{f^+} \partial^* f^+ \right] \right) \\ & + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} f I f^+ + \frac{1}{2} f^+ I f + g I g - \hbar/\tau \right] \end{aligned}$$

Variiert man $\mathcal{F}$ nach Δ, A, f und f^+ so erhält man die Gleichungen (2.1)-(2.3) als Euler-Lagrange Gleichungen.

b. Schmutziger Grenzfall

Man sieht sofort, daß sich die obigen Gleichungen im reinen Grenzfall ($1/\tau, 1/\tau_1 = 0$) stark vereinfachen. Noch viel bedeutender sind die Vereinfachungen allerdings im umgekehrten Grenzfall $1/\tau, 1/\tau_1 \rightarrow \infty$ (schmutziger Grenzfall), der von Usadel [7] behandelt wurde. Hier entwickelt man f, f^+ und g bezüglich $\hat{k}$ in Kugelflächenfunktionen und nutzt aus, daß angenähert Isotropie vorliegt. Damit kann die $\hat{k}$ -Abhängigkeit vollständig eliminiert werden. Man erhält die Gleichungen

$$\omega_e f(\omega_e, \tau) - \frac{\hbar}{2} D \left[g \partial^2 f - f \nabla^2 g \right] = \Delta g ; \quad (2.6)$$

$$\Delta(\tau) \ln T/T_c = -2\pi k_B T \sum_{e=0}^{\infty} \left[\frac{\Delta(\tau)}{\omega_e} - f(\omega_e, \tau) \right]; \quad (2.7)$$

$$\text{rot rot } \vec{A} = -\frac{4\pi e}{c} 2\pi k_B T N(0) \mathcal{D} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{i} [\vec{f}^* \vec{\sigma} \vec{f} - \vec{f} \vec{\sigma}^* \vec{f}^*]; \quad (2.8)$$

$$g = (1 - |\vec{f}|^2)^{1/2} \quad ; \quad \text{Re } g > 0 \quad ,$$

$$\mathcal{D} = v_F \ell / 3 \quad ; \quad \ell = v_F \tau$$

Zur Berechnung der freien Energie kann das folgende Funktional verwendet werden

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = \int d^3r \left\{ \frac{1}{8\pi} (\text{rot } \vec{A})^2 + |\Delta(\vec{r})|^2 N(0) \ln T/T_c \right. \\ \left. + 2\pi k_B T N(0) \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{|\Delta(\vec{r})|^2}{\omega_{\ell}} - \mathcal{J}(\omega_{\ell}, \vec{r}) \right] \right\}; \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\omega_{\ell}, \vec{r}) = \Delta^* \vec{f} + \Delta \vec{f}^* - (1-g) 2\omega_{\ell} \\ - \frac{\hbar}{2} \mathcal{D} \left[|g \vec{\sigma} \vec{f} - \vec{f} \vec{\sigma} g|^2 + \frac{1}{4} |\vec{f} \vec{\sigma}^* \vec{f}^* - \vec{f} \vec{\sigma} \vec{f}|^2 \right]. \end{aligned}$$

Variiert man $\mathcal{F}$ nach Δ , $\vec{A}$, und $\vec{f}$, so erhält man die Gln. (2.6)-(2.8) als Euler-Lagrange Gleichungen.

c. Ginzburg-Landau (GL) Entwicklung

Da für das von uns verwendete Lösungsverfahren die GL Entwicklung von Bedeutung ist, wollen wir sie hier angeben.

Eine Entwicklung von Gl. (2.1) nach Potenzen von Δ und Q bis zur dritten Ordnung liefert *

$$\begin{aligned} \phi = & \frac{\Delta}{\sqrt{\omega_e^2 + |\Delta|^2}} - \frac{\hbar v_F}{\omega_e (2\omega_e + \hbar/\tau_{tr})} \hat{k} \cdot Q \Delta \\ & + \frac{(\hbar v_F)^2}{\omega_e (2\omega_e + \hbar/\tau) (2\omega_e + \hbar/\tau_{tr})} \left[(\hat{k} \cdot Q)^2 \Delta + \frac{\hbar}{6\omega_e \tau} Q^2 \Delta \right] \end{aligned} \quad (2.10)$$

mit $\tau_{tr}^{-1} = \tau^{-1} - \tau_1^{-1}$ (man entnehme f^+ aus Gl. (2.4)). Durch Einsetzen in die Selbstkonsistenzgleichungen (2.2), (2.3) erhält man die GL Gleichungen (gültig für alle Verschmutzungsgrade)

$$\begin{aligned} \Delta(\tilde{r}) \ln T/T_c = & - 2\pi k_B T \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{\Delta(\tilde{r})}{\omega_e} \right. \\ & \left. - \frac{\Delta(\tilde{r})}{\sqrt{\omega_e^2 + |\Delta(\tilde{r})|^2}} - \frac{1}{6} \frac{(\hbar v_F)^2}{\omega_e^2 (2\omega_e + \hbar/\tau_{tr})} Q^2 \Delta(\tilde{r}) \right], \end{aligned} \quad (2.11)$$

* Der erste Term auf der rechten Seite wurde hier noch nicht entwickelt, da er in dieser Form später verwendet wird.

$$\text{rot-rot } A_{\sim} = - \frac{8\pi e}{c} N(0) \frac{v_F^2 \hbar}{6} 2\pi k_B T i \quad (2.12)$$

$$+ \sum_{e=0}^{\infty} \frac{1}{\omega_e (2\omega_e + \hbar/\tau_{tr})} \left(\Delta_{\sim}^{\dagger} \Delta_{\sim}^* - \Delta_{\sim}^* \Delta_{\sim}^{\dagger} \right)$$

Aus (2.11) und (2.12) gewinnt man mit $\tau_{tr}^{-1} \rightarrow 0$ den reinen Grenzfall und mit $2\omega_e + \hbar/\tau_{tr} \rightarrow \hbar/\tau_{tr}$ den schmutzigen Grenzfall.

Zur Herleitung des freien Energiefunktional in der GL Näherung setzt man zweckmäßigerweise zunächst die Bewegungsgleichungen (2.1) in das Funktional (2.5) ein. Damit ergibt sich

$$J(\omega_e, \hat{k}, \tau) = \frac{\Delta^* \psi + \Delta \psi^*}{1+g} + \frac{1}{4} (\psi I \psi^* + \psi^* I \psi)$$

$$+ \frac{1-g}{1+g} + (1-g) I g + \frac{1}{2} (g I g - \hbar/\tau)$$

Hier muß man nun Gl.(2.10) einsetzen und in Δ und ψ bis zur vierten Ordnung entwickeln. Man sieht zunächst leicht, daß es bis zu dieser Ordnung keine Terme gibt, die vom anisotropen Anteil von J herrühren. Dann erhält man

$$\oint \frac{d^2 k}{4\pi} J(\omega_e, \hat{k}, \tau) \equiv \bar{J} = \frac{\Delta^* \psi + \Delta \psi^*}{1+g} + \frac{1}{4} \frac{\hbar}{\tau} \bar{\psi} \bar{\psi}^*$$

$$+ (1-\bar{g}) - \frac{1}{2} \frac{\hbar}{\tau} (1-\bar{g})^2 \cong \frac{\Delta^* \psi + \Delta \psi^*}{1+g}$$

und damit

$$\mathcal{F} = \int d^3r \left\{ \frac{1}{8\pi} (\text{rot } \vec{A})^2 + |\Delta(\vec{r})|^2 N(0) \ln T/T_c \right. \quad (2.13)$$

$$\left. + 2\pi \hbar T N(0) \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{1}{4} \frac{|\Delta|^4}{\omega_{\ell}^3} + \frac{(\hbar v_F)^2 |\vec{\sigma} \Delta|^2}{6 \omega_{\ell}^2 (2\omega_{\ell} + \hbar/\tau_{tr})} \right] \right\}$$

3. DISKUSSION DER ERGEBNISSE

Bevor wir die zur Lösung der Gleichungen verwendeten Methoden ausführlich behandeln, sollen hier kurz einige Ergebnisse diskutiert werden. Wir wollen unsere Aufmerksamkeit vor allem auf die vergleichende Betrachtung des reinen ($\tau = \infty$), mittel verschmutzten ($\tau = 1$) und extrem schmutzigen ($\tau = 0$) Grenzfall-les richten. Ausführliche Diskussionen des reinen und schmutzigen Grenzfalles findet man in Ref. [2-4] und [5,6].

Figur 1 zeigt den radialen Verlauf des Ordnungsparameters und Figur 2 das lokale Magnetfeld eines ziemlich isolierten Wirbels für die drei Verschmutzungsgrade bei gleichem GL Parameter $\kappa = 0.9^*$ und reduzierter Temperatur $t = 0.2$. Längen werden in Einheiten $R = R_0 [\chi(1/\tau)]^{-1/2}$ mit $R_0 = 0.882 \xi_0$ (siehe Teil 4a) gemessen.

* $\kappa = \kappa_0 \chi^{-1}(1/\tau)$, wo κ_0 der GL Parameter des reinen Materials und $\chi(\alpha) = (75(3)/8)^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{(2\ell+1)^2(2\ell+1+\alpha)}$ die Gorkov Funktion ist.

Ausserdem wurde der Ordnungsparameter weit weg vom Wirbelkern auf eins normiert und das Magnetfeld in Einheiten des (von der Verschmutzung unabhängigen) thermodynamischen Magnetfeldes H_c gemessen. In diesen Einheiten hängen die GL Gleichungen (2.11), (2.12) nur noch von den Parameter κ ab und die Wirbelstruktur wird daher bei gleichem κ für $t \rightarrow 1$ unabhängig von τ . Figur 1 und 2 geben daher einen Eindruck des unterschiedlichen Temperaturverlaufs der drei Fälle.

Bemerkenswert ist die zunehmende Aufsteilung der Strukturen mit abnehmendem Verschmutzungsgrad. Der steilere Ordnungsparameter geht Hand in Hand mit einem steileren Anstieg des Suprastroms im Wirbelkern und führt damit zu einem schnelleren Abfall des Magnetfeldes. Wegen der Quantisierung des Gesamtflusses hat das eine Erhöhung des Magnetfeldes in der Wirbelmitte $H_{\max}$ zur Folge. Der Temperaturverlauf von $H_{\max}$ ist in Fig.3 gezeigt. Man sieht auch hier, daß die Felder bei tiefen Temperaturen stark auseinanderklaffen und für hohe Temperaturen gleich werden. Die Rechnungen zeigen, daß die Abweichungen von $H_{\max}$ von den experimentellen Werten (siehe z.B. [3], Tabelle IV), die allerdings mit Unsicherheiten behaftet sind, nicht im Rahmen einer einfachen Gorkov Theorie unter Einschluß von isotroper Verunreinigungsstreuung zu erklären sind. Im schmutzigen Grenzfall ist der Temperaturverlauf von $H_{\max}$ ähnlich dem von H_c während mit abnehmendem Verunreinigungsgrad das Sättigungsverhalten bei tiefen Temperaturen abgeschwächt wird. Es sei noch erwähnt, daß für

$\tau \rightarrow \infty$ und $t \rightarrow 0$ der Anstieg des Ordnungsparameters und des Suprastroms im Wirbelzentrum divergiert [3,4] .

Ausgeprägtere Strukturen führen, grob gesagt, zu einer Erhöhung der freien Energie des Zustandes und man findet daher, daß das untere kritische Feld H_{c1} für Supraleiter mit gleichem GL Parameter κ bei zunehmendem Verunreinigungsgrad abnimmt. Dies Verhalten wird deutlich in Fig.4 und 5 wo H_{c1}/H_c als Funktion von t gezeigt ist für $\kappa=0.9$ und 1.75 . Die Ergebnisse der verallgemeinerten GL Theorie [8] sind zum Vergleich eingezeichnet. In allen Fällen wird H_{c1} durch die verallgemeinerte GL Theorie überschätzt.

4. BERECHNUNG VON WIRBELSTRUKTUREN IM REINEN GRENZFALL

Im Abschnitt a) dieses Teils werden die Eilenberger Gleichungen (2.1)-(2.3) für den Fall zylindersymmetrischer Potentiale in die Form gebracht, die der numerischen Auswertung zugrunde liegen. In b) wird das Computer Programm allgemein beschrieben, um die inneren Zusammenhänge zu klären. In c) finden wir eine mehr operative Beschreibung, welche ausreichen sollte um das Programm auf dem Computer rechnen zu lassen. Dort sind dann auch die wichtigsten Arrays und Unterprogramme erklärt.

a) Die Eilenberger Gleichungen in Wirbelsymmetrie

Bei der Auswertung der Gleichungen werden die folgenden reduzierten Einheiten verwendet :

$$\tilde{r} = R_0 \tilde{r}$$

$$R_0 = \hbar v_F / 2\pi k_B T_c = 0.882 \hbar v_F / \pi \Delta_{BCS}(0) = 0.882 \xi_0$$

$$\tilde{H}(\tilde{r}) = H_0 \tilde{h}(\tilde{r}) ; \quad H_0 = \hbar c / 2e R_0^2$$

$$\psi(\tilde{r}) = \Delta(\tilde{r}) / \pi k_B T_c ; \quad \tilde{\omega}_L = \omega_L / \pi k_B T_c = \ell(2\ell+1);$$

(die Tilden werden weiterhin weggelassen). Die Potentiale ψ und a variieren nur in der x-y Ebene (Magnetfeld in z-Richtung). Wir schreiben

$$\psi(\tilde{r}) = F(r) e^{i\varphi_r} ; \quad a(\tilde{r}) = a(r) (-\sin\varphi_r, \cos\varphi_r) \quad (4.1)$$

wo ebene Polarkoordinaten

$$\tilde{r} = (x, y) ; \quad x = r \cos\varphi_r ; \quad y = r \sin\varphi_r$$

eingeführt wurden. Ferner führen wir einen Einheitsvektor $\hat{k}_0$ ein, der in Richtung der Projektion von $\hat{k}$ auf die x-y Ebene weist. Es sei

$$\hat{k}_0 = (\cos\varphi_k, \sin\varphi_k) ; \quad \hat{k}_0 \cdot \hat{k} = \cos\varphi ;$$

$$r_{||} = \hat{k}_0 \cdot \tilde{r} = r \cos\varphi ; \quad r_{\perp} = r \sin\varphi ; \quad \varphi = \varphi_r - \varphi_k$$

An Stelle des Vektorpotentials wird im Programm die Hilfsgrösse

$$\Phi(r) = r a(r) - 1 \quad (4.2)$$

verwendet. Das Magnetfeld ergibt sich als

$$h(r) = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \Phi(r) \quad (4.3)$$

Schließlich wird a (bzw. Φ) in einem Phasenfaktor absorbiert

$$\begin{aligned} \Theta(r_{||}, r_{\perp}) &= \int_0^{r_{||}} \hat{k}_0 a(r) dr_{||} - \varphi = - \int_0^{r_{||}} \frac{r_{\perp}}{r} a(r) dr_{||} - \varphi \\ &= - \int_0^{r_{||}} \frac{r_{\perp}}{r_{||}^2 + r_{\perp}^2} \Phi([r_{||}^2 + r_{\perp}^2]^{1/2}) dr_{||} - \frac{\pi}{2} \text{sign}(r_{\perp}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

und es gilt

$$\Phi(r_{||}, -r_{\perp}) = -\Phi(r_{||}, r_{\perp}) ; \quad \Phi(-r_{||}, r_{\perp}) = -\Phi(r_{||}, r_{\perp}) - \pi. \quad (4.5)$$

Mit Hilfe der regulären Transformation

$$\begin{aligned} \psi &= \bar{\psi} e^{i(\Theta + \varphi_r)} ; & \bar{\psi} &= \bar{\psi} e^{-i\Theta} \\ \phi &= \bar{\phi} e^{i(\Theta + \varphi_r)} ; & \phi^+ &= \bar{\phi}^+ e^{-i(\Theta + \varphi_r)} \end{aligned} \quad (4.6)$$

werden die Gleichungen (2.1) in gewöhnliche Differentialgleichungen 1. Ordnung überführt

$$\left(\omega_e + \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r_{||}} \right) \bar{f}(\omega_e, \cos \vartheta, r_{||}, r_{\perp}) = \bar{\psi}(r_{||}, r_{\perp}) g \quad (4.7)$$

$$\left(\omega_e - \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r_{||}} \right) \bar{f}^+(\omega_e, \cos \vartheta, r_{||}, r_{\perp}) = \bar{\psi}^*(r_{||}, r_{\perp}) g$$

Aus (4.5) und (4.6) folgen die Relationen

$$\bar{\psi}(-r_{||}) = -\bar{\psi}^*(r_{||}) ; \quad \bar{\psi}(-r_{\perp}) = \bar{\psi}^*(r_{\perp}) . \quad (4.8)$$

Dies erlaubt nach (4.7) für die Greenschen Funktionen die Symmetrieverknüpfungen

$$\bar{f}^+(r_{||}) = -\bar{f}(-r_{||}) ; \quad g(r_{||}) = [1 + \bar{f}(r_{||})\bar{f}(-r_{||})]^{1/2} = g(-r_{||}) ;$$

$$\bar{f}(r_{\perp}) = \bar{f}^*(-r_{\perp}) ; \quad g(r_{\perp}) = g^*(-r_{\perp}) .$$

Somit hat man die Gl.(4.7) nur für $\bar{f}^+$ oder $\bar{f}$ zu betrachten (wir haben $\bar{f}^+$ bestimmt) und für Parameter $r_{\perp} \geq 0$. Um den isolierten Wirbel zu approximieren haben wir Gl.(4.7) im Inneren einer kreisförmigen Zelle mit Radius r_c gelöst, auf deren Rand die Bedingung

$$\bar{f}^+(r_{||}) = -[\bar{f}^+(-r_{||})]^* ; \quad r_{||} = \sqrt{r_c^2 - r_{\perp}^2}$$

gefordert wurde. Die Selbstkonsistenzgleichungen (2.2), (2.3) gehen nun über in

$$F(r) \ln x = -2x \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{F(r)}{\omega_{\ell}} - \int_0^{\pi/2} d\vartheta \cos \vartheta \int_0^{\pi} \frac{d\varphi}{\pi} \operatorname{Re}(\bar{f} e^{i\Theta}) \right]; \quad (4.11)$$

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \Phi \right) = \frac{2x}{\tilde{\kappa}^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_0^{\pi/2} d\vartheta \cos^2 \vartheta \int_0^{\pi} \frac{d\varphi}{\pi/2} \sin \varphi \operatorname{Im} g; \quad (4.12)$$

$$x = T/T_c; \quad \tilde{\kappa}^2 = (7 \zeta(3)/18) \kappa^2$$

Für die Rechnung werden sie umschrieben in

$$\begin{aligned} & -\beta \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) - \frac{\Phi^2}{r^2} \right] F \\ & + \left[\ln x + 2x \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\omega_{\ell}} - \frac{1}{(\omega_{\ell}^2 + F^2)^{1/2}} \right) \right] F = P(r); \\ & \tilde{\kappa}^2 r \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \Phi \right) - \beta F^2 \Phi = Q(r) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} P(r) &= 2xr \overline{P}_1(r) - P_2(r); \quad \overline{P}_1(r) = \int_0^{\pi} \frac{d\varphi}{\pi} P_1(r_{\parallel}, r_{\perp}); \\ P_1(r_{\parallel}, r_{\perp}) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_0^{\pi/2} d\vartheta \cos \vartheta \left[\operatorname{Re}(\bar{f} e^{i\Theta}) - F/(\omega_{\ell}^2 + F^2)^{1/2} \right]; \end{aligned}$$

$$P_2(r) = -\beta \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) - \frac{\Phi^2}{r^2} \right] F ;$$

$$Q(r) = 2\pi r \bar{Q}_1(r) - Q_2(r) ; \quad \bar{Q}_1(r) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\pi/2} Q_1(r_u, r_1) ;$$

$$Q_1(r_u, r_1) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^2 \varphi \operatorname{Im} g ; \quad Q_2(r) = -\beta F^2 \Phi ;$$

Für

$$\beta = \frac{2\pi}{3} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\omega_{\ell}^3} = 7.5(3)/12 \pi^2$$

sind die linken Seiten der Gleichungen (4.13) nichts anderes als die (dimensionslos und zylindersymmetrisch geschriebenen) GL Gleichungen (2.11), (2.12). Im Zuge des zur Erreichung der Selbstkonsistenz notwendigen Iterationsverfahren werden die Differentialgleichungen (4.23) jeweils zu gegebenen rechten Seiten mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}(0) &= -1 ; & \bar{\Phi}(r_c) &= 0 \\ F(0) &= 0 ; & \frac{dF}{dr}(r_c) &= 0 \end{aligned}$$

gelöst.

Für die Differenz **aus** freier Energie im Wirbelzustand und im Meissnerzustand haben wir

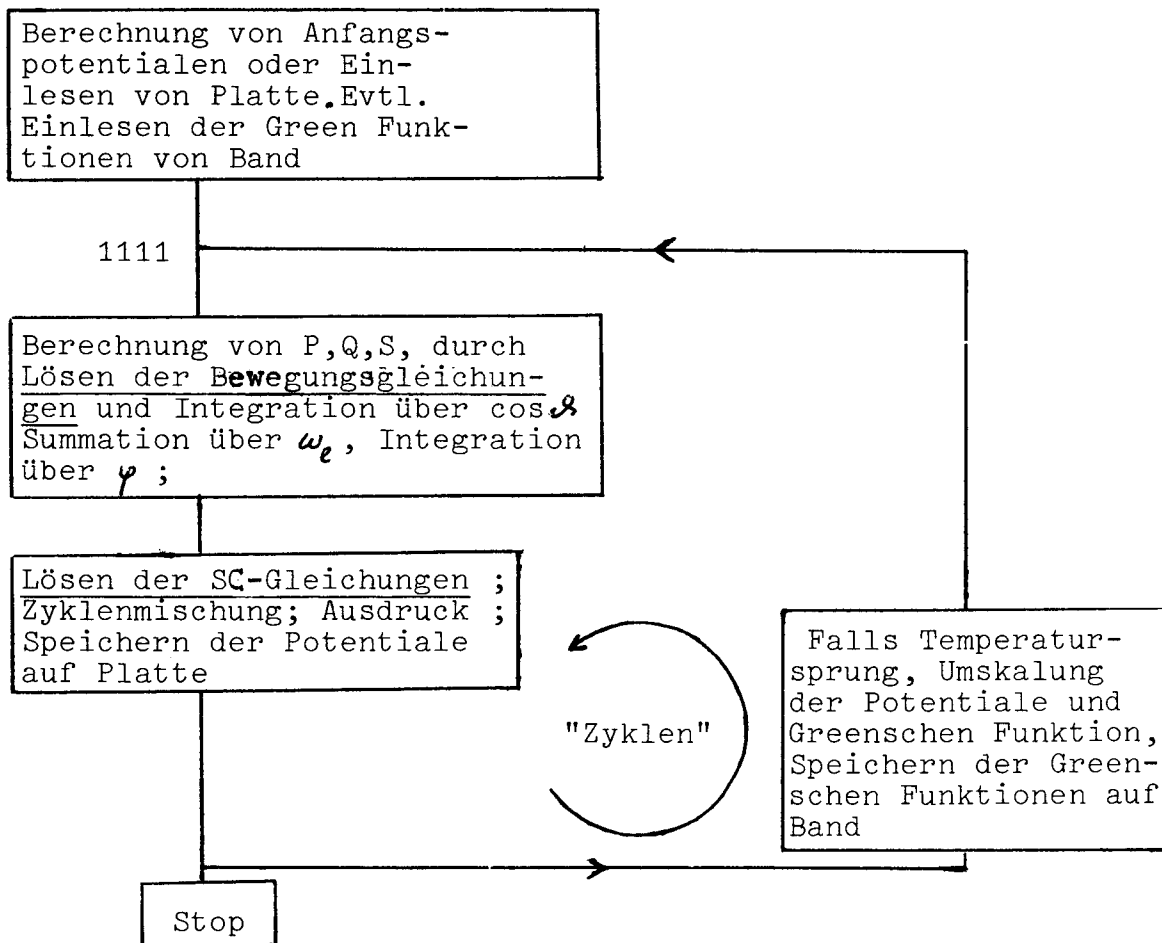
$$F_{\text{Wir}} - F_{\text{Me}} = 2\pi \int_0^{r_c} dr r \left\{ \tilde{x}^2 \tilde{h}^2(r) + \bar{S}(r) \right\}$$

$$\begin{aligned}
 \overline{S}(r) &= \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\pi/2} S(r_{||}, r_{\perp}) ; \\
 S(r_{||}, r_{\perp}) &= 2t \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ \frac{F^2(r) - F_{BCS}^2}{\sqrt{\omega_{\ell}^2 + F_{BCS}^2}} + 2\sqrt{\omega_{\ell}^2 + F_{BCS}^2} \right. \\
 &+ \int_0^1 d\sin\vartheta \operatorname{Re} \left[\overline{\psi}(r_{||}, r_{\perp}) \overline{f}^+(-r_{||}, r_{\perp}) + \overline{\psi}(-r_{||}, r_{\perp}) \overline{f}^+(r_{||}, r_{\perp}) \right. \\
 &\left. \left. - 2\omega_{\ell} g - \frac{\cos\vartheta}{1+g} \left(\overline{f}^+(r_{||}, r_{\perp}) \frac{\partial}{\partial r_{||}} \overline{f}^+(-r_{||}, r_{\perp}) \right. \right. \right. \\
 &\left. \left. \left. - \overline{f}^+(-r_{||}, r_{\perp}) \frac{\partial}{\partial r_{||}} \overline{f}^+(r_{||}, r_{\perp}) \right) \right] \right\} \quad (4.15)
 \end{aligned}$$

(F_{BCS} = BCS-Ordnungsparameter). Die in (4.14) und (4.15) vorkommenden ω_{ℓ} -Summen werden (ausser bei sehr tiefen Temperaturen) bis zu einem $l_{\max}(t)$ explizit ausgeführt und dann mit Hilfe der GL Entwicklung, welche auch eine asymptotische Entwicklung nach $1/\omega_{\ell}$ ist, ergänzt.

b) Allgemeine Programmbeschreibung

Der Programmaufbau ist schematisch wie folgt :



Zur Bestimmung der rechten Seiten der Selbstkonsistenzgleichungen (4.13) und der freien Energie (4.15) benötigt man die Greenschen Funktionen $\bar{f}^+$ zu gegebenen (Test-) Potentialen im Bereich $0 \leq r \leq r_c$, $0 \leq \psi \leq \pi$ für verschiedene Parameter ω_e und $\cos \alpha$. Dazu wird das halbkreisförmige Gebiet mit Hilfe eines quadratischen $r_{||}, r_{\perp}$ -Netztes digitalisiert, so daß der Rand des Kreises durch eine Treppenfunktion approximiert wird. Die Differentialgleichung (4.7) wird dann längs ihrer Trajektorien ($r_{\perp} = \text{const.}$) von $r_{||} = r_A$ bis $r_{||} = -r_A$ mit den Randbedingungen (4.10) integriert, wobei (bis auf Digitalisierungsfehler) gilt

$$r_A = \left[r_c^2 - r_{\perp}^2 \right]^{1/2}$$

Schließlich werden die für P,Q,S notwendigen Ausdrücke gebildet, wobei zunächst über $\cos \vartheta$ integriert, dann über 1 summiert wird. Ferner ist eine Integration über φ erforderlich, welche mit Hilfe einer Interpolation vom $\tau_{||}, \tau_{\perp}$ -Netz auf ein τ, φ -Netz bewerkstelligt wird (Subroutine KREIS und KREIS1).

Zunächst liegen die Potentiale F und Φ als Funktionen von $\tau = \sqrt{\tau_{||}^2 + \tau_{\perp}^2}$ auf äquidistanten Punkten vor. Zur Lösung der Bewegungsgleichung (4.7) benötigt man $\bar{\psi}^*$ aber äquidistant in $\tau_{||}$ ($\tau_{\perp}$ jeweils fest). Ein Splineprogramm (Subroutine SPLINR) interpoliert F und Φ für jedes $\tau_{\perp} (\neq 0)$ auf die gewünschten $\tau_{||}$ -Werte. Mit Hilfe der Splinekoeffizienten wird auch der Phasenfaktor

$$PHA(\tau_{||}, \tau_{\perp}) = e^{i\Theta(\tau_{||}, \tau_{\perp})}$$

berechnet, wobei stückweise durch die Splinepolynome 3.Grades approximiert wird und dann die Integration über $\tau_{||}'$ (siehe Gl.(4.4)) analytisch durchgeführt wird.

Nachdem $\bar{\psi}^*(\tau_{||}, \tau_{\perp})$ für ein bestimmtes $\tau_{\perp}$ auf einem Satz von äquidistanten Punkten bereitgestellt ist, werden zur Lösung der Bewegungsgleichung für die Greenschen Funktionen $\bar{f}^+$ zwei iterative Verfahren angeboten (hierfür werden die Startwerte für die Greenschen Funktionen benötigt) :

1. Für $\omega_k \geq 0.5$ wird die Differentialgleichung (4.7) in die folgende Integralgleichung transformiert

$$\bar{\varphi}^+(\tau_u) = \bar{\varphi}^+(\tau_A) e^{\omega_k(\tau_u - \tau_A)/\cos\vartheta} + \frac{1}{\cos\vartheta} \int_{\tau_u}^{\tau_A} d\tau'_u e^{\omega_k(\tau_u - \tau'_u)/\cos\vartheta} \bar{\psi}^*(\tau'_u) g(\tau'_u).$$

Diese Gleichung wird jetzt iterativ gelöst, indem man von $\tau_u = \tau_A$ nach $\tau_u = -\tau_A$ fortschreitet. Für die Integration wird eine modifizierte Simpsonformel

$$\int_x^{x+2\Delta} e^{\sigma(x-x')} \varphi(x') dx' = B_1(\sigma) \varphi(x) + B_2(\sigma) \varphi(x+\Delta) + B_3(\sigma) \varphi(x+2\Delta)$$

verwendet. Vor jedem Durchlauf der Trajektorie wird

$$\bar{\varphi}^+(\tau_A) = - [\bar{\varphi}^+(-\tau_A)]^*$$

gesetzt. Ferner werden Greensche Funktion zweier aufeinanderfolgender Iterationen unter Berücksichtigung des lokalen Konvergenzverhaltens gemischt.

2. Für kleine Frequenzen ω_k erwies es sich als günstiger die Bewegungsgleichung unmodifiziert zu integrieren. Dazu wurde der Differentialquotient durch eine 5-Punkte Formel dargestellt und das entstehende nichtlineare Gleichungssystem mit einem SOR-Newton Verfahren gelöst.

Nach Abarbeitung der $\cos\vartheta$ -, ω_k - und $\tau_\perp$ -Schleifen ist zur Berechnung der freien Energie noch eine r-Integration not-

wendig, welche mit Hilfe von Subroutine SPLINR durchgeführt wird. Danach werden mit der Subroutine SC1 neue Potentiale konstruiert und nach einem geeigneten Verfahren mit den alten Potentialen gemischt ("Zyklenmischung"). Damit kann dann die Iteration neu beginnen. Unterschreitet der Abstand zweier aufeinanderfolgender Iterationen eine vorgeschriebene Schranke ($EP1FAK = EPS1 * F_{BCS}$), so wird die Iteration abgebrochen. Die Potentiale, ebenso wie die Greenschen Funktionen, werden dann umgeecho, um als Startwerte für die nächst niedrigere Temperatur zu Verfügung zu stehen. Die Rechnung wird abgebrochen, wenn zu Beginn eines Zyklus weniger als 30sec oder am Ende der ω_2 -Schleife weniger als 10sec Rechenzeit zur Verfügung stehen.

Die Potentiale werden nach jedem Zyklus auf eine private Platte (Unit 11) geschrieben, werden aber bei der folgenden Iteration einfach überschrieben (ausser bei Temperatursprung). Die Greenschen Funktionen, die nicht für alle Parameter gleichzeitig im Kernspeicher Platz haben, werden am Ende der ω_2 -Schleife zunächst auf eine temporäre Platte (Unit 12) gespeichert. Bei jedem Temperatursprung oder Zeitausstieg wird der Inhalt der temporären Platten auf Band übertragen (Unit 15).

c) Operative Programmbeschreibung

Hauptprogramm

Der Zellenradius $r_c (\hat{=} RMAX)$ wird in INZA Teile aufgeteilt.

Die Potentiale $F(r)$, $\phi(r)$ sind auf den Arrays ORDPAR und VEKPOT gespeichert. Die Länge der Trajektorien hängt von ihrem Abstand r_1 ($\hat{=}$ RSENK) vom Zentrum ab; RSENK=0 entspricht also der Trajektorie durch den Kreismittelpunkt. Jede Trajektorie enthält $2 * IRPAR + 1$ ($IRPAR \leq INZA$) Stützstellen, auf denen $e^{i\theta(\tau_u, \tau_l)}$ (Array PHA) und $\overline{\psi}(\tau_u, \tau_l)$ (Array PHAD) berechnet werden. Für RSENK $\neq$ 0 benötigt man dabei $F(r)$ und $\phi(r)$ auf Stützstellen, die nicht der ursprünglichen äquidistanten Einteilung von r_c entsprechen ($r = \sqrt{\tau_u^2 + \tau_l^2}$!). Dazu werden die Potentiale einmal durch einen Spline (Subroutine SPLINR, IFA=1) approximiert und brauchen dann für alle RSENK $\neq$ 0 nur an der Zwischenstellen abgerufen zu werden (Subroutine SPLINR, IFA=2).

Die Greenschen Funktionen werden auf INZA äquidistanten Trajektorien bestimmt (RSENK-Schleife). Die RSENK-Schleife umfasst zwei weitere Schleifen, die der ω_l -Summation (OM-Schleife, siehe hierzu auch Subroutine OMSUM) und der $\cos \vartheta$ -Integration (COS-Schleife) entsprechen. Nach Lösung der Bewegungsgleichung (entweder in Integral- oder in Differentialform) steht $\bar{f}^+$ auf dem Array FPL. Die Größen $P_1(\tau_u, \tau_l)$, $Q_1(\tau_u, \tau_l)$ und $S(\tau_u, \tau_l)$ stehen auf den Doppelarrays RE, IM und FRE (während der ω_l -Summation und $\cos \vartheta$ -Integration wird auf Hilfsarrays FLPINT, GINT und FREINT gespeichert).

Nachdem die RSENK-Schleife abgearbeitet ist, wird die Integration von P_1, Q_1, S über den Azimuthwinkel im Unterprogramm KREIS (bzw., falls HC1CAL=.TRUE., in KREIS1) durchgeführt. Das Ergebnis ist auf den Arrays RER, IMR und FRER

gespeichert. Erst im Unterprogramm SC1 werden RER und IMR um den asymptotischen Anteil für grosse ω_2 ergänzt. Dort werden auch P_2 und Q_2 hinzuaddiert; so daß $P(r)$ und $Q(r)$ zu Verfügung stehen.

Subroutine SC1(RMAX,ID,ORDPAR,RER,VEKPOT,IMR,FELD)

Das Unterprogramm löst die gekoppelten inhomogenen Differentialgleichungen (4.13) auf dem Intervall $0 \leq r \leq RMAX$ auf $ID + 1$ Stützstellen. Dazu werden die Differentialoperatoren durch 5-Punkte Formeln digitalisiert und das entstehende nichtlineare Gleichungssystem iterativ mit Newton-SOR gelöst. RER und IMR sind oben erklärt. ORDPAR und VEKPOT enthalten zunächst die alten Potentiale $F(r)$ und $\phi(r)$ als Startnäherung für die Iteration, nach Durchlauf des Programms stehen dort die Lösungen. Auf dem Array FELD ist dann das Magnetfeld gespeichert.

Subroutine SPLINR(IFA,X,Z,N,T,SS,SS1,SS2,M,TEGER,SUMY,S2,S3,INTAB)

Gegeben seien N Abszissenwerte (Array X) und N Ordinaten (Array Z), wobei X in aufsteigender Reihenfolge geordnet sein soll :

$$X(1) \leq X(2) \leq \dots \leq X(N).$$

SPLINR liefert jetzt auf M Abszissenwerten (Array T; $X(1) \leq T(1); T(M) \leq X(N)$) Funktionswerte (Array SS), erste und zweite Abteilungen (SS1,SS2) eines Splinepolynoms, das durch die Eingabefunktion (Z) gelegt wurde.

Ist die logische Variable INTAB=.TRUE., so wird auf dem Array TEGER(K) jeweils das Integral von X(1) bis X(K) berechnet (TEGER(1)=0.). Die Arrays SUMY, S2 und S3 enthalten die Splinekoeffizienten. In dieser Anwendung ist stets IFA=1 zu setzen. Möchte man für die gleichen Arrays X,Z die Ausgangsgrössen SS,SS1,SS2 und/oder TEGER auf mehreren Arrays T berechnen, so kann man vom zweiten Mal an IFA > 1 (sonst beliebige ganze Zahl) setzen. Die Berechnung der Splinekoeffizienten wird dann nicht mehr durchgeführt.

Subroutine OMSUM(OM,GF)

Die ω_ℓ -Summation wird bei der Rechnung explizit durchgeführt bis zu $l_{\max} = \text{IMC} - 1 = \text{INT}(0.5 * (1. + 5/t))$, ausser wenn $\text{IMC} > 10$ ist (Temperatur $t \leq 5/17$). Für $\text{IMC} > 10$ wird zwar immer noch die Summe bis $l_{\max}$ ausgerechnet (und dann asymptotisch entwickelt), aber die endliche Summe wird nun durch eine 10-Stützpunkt **Formel** approximiert. Die hierfür zu verwenden ω -Stützpunkte OM(10) und Gewichtungsfaktoren GF(10) werden in Subroutine OMSUM ausgerechnet und zu Beginn der Rechnung zur Verfügung gestellt. Für $\text{IMC} \leq 10$ gilt $\text{OM}(\ell) = \omega_\ell$ und $\text{GF}(\ell) = 1$, so daß das Programm in der Tat für alle IMC verwendet werden kann (und wird).

Dateneingabe

Beim Start des Programms ist festzulegen, ob schon vorhandene Potentiale und Greensche Funktionen als Startwerte für die Iteration verwendet werden sollen, andernfalls berechnet das Programm selber seine Startgrössen.

LSPOT=.TRUE./FALSE. : Es sind/sind keine Potentiale vorhanden. Bei der Option .TRUE. ist der zu lesende Plattenlabel für Unit 10 als LSTART einzugeben.

LS=.TRUE./FALSE. : Es sind/sind keine Greensche Funktionen auf Band vorhanden.

SBAND=.TRUE./FALSE. : Es sollen/sollen nicht Bänder (mit Greenschen Funktionen) beschrieben werden.

LTEMP=.TRUE./FALSE. : Es soll/soll nicht gleich nach Beschaffung der Startgrössen ein Temperatursprung gemacht werden.

GILAT=.TRUE./FALSE. : Es wird/wird nicht nur die Ginzburg-Landau Gleichung gelöst.

HC1CAL=.TRUE./FALSE. : Die freie Energie wird/wird nicht berechnet.

TEMDF= Abstand der Temperaturen

LNUM= Zahl der verschiedenen Temperaturen

LSR(LNUM) : Dies Array enthält die Plattenlabel, auf die nacheinander geschrieben werden soll, LSR wird als reguläre Daten eingegeben.

Bei einem Start ohne vorgegebene Potentiale sind folgende Daten im Teil "Einlesen analytischer Potentiale" anzugeben: KAPPA ($=\kappa$); KABOTE ($=t$), DX=Schrittweite; INZA= Zahl der Unterteilungen des Radius (d.h. $INZA * DX \approx r_c$); ALPH und BET sind Grössen, die den asyptotischen Abfall der Startpotentiale bestimmen (DELTAS,ARABS).

Merke : Es soll INZA eine gerade Zahl ≤ 50 sein; andernfalls sind alle Dimensionierungen zu vergrössern und ebenfalls die Variable MITTE!

5. BERECHNUNG VON WIRBELSTRUKTUREN IM SCHMUTZIGEN GRENZFALL

a) Die allgemeinen Gleichungen in Wirbelsymmetrie

Bei der Auswertung der Gleichungen werden die folgenden reduzierten Variablen verwendet [5]

$$\tau = R_0 \tilde{\tau} ; \quad R_0 = 0.542 (\xi_0 \ell)^{1/2}$$

$$H(\tilde{r}) = \tilde{H}(\tilde{r}) ; \quad H_c = \pi k_B T_c [N(0)]^{1/2}$$

$$\gamma(\tilde{r}) = \Lambda(\tilde{r}) / \pi k_B T_c ; \quad \tilde{\omega}_e = \omega_e / \pi k_B T_c = \tau(2\ell+1)$$

(die Tilden werden weiterhin weggelassen). In der reellen Eichung können die Greenschen Funktionen geschrieben werden als

$$f = \sin \phi \quad g = \cos \phi \quad (5.1)$$

In einer zylindersymmetrischen Situation hängt ϕ nur von τ (und ω_e) ab und genügt der Bewegungsgleichung

$$\frac{1}{\tau} \frac{d}{d\tau} \left(\tau \frac{d\phi}{d\tau} \right) = \bar{\kappa}^{-2} \omega_e^2 \sin \phi \cos \phi - \gamma \cos \phi + \omega_e \sin \phi \quad (5.2)$$

Der Parameter $\bar{\kappa}$ ist mit dem GL Parameter κ des schmutzigen

Materials durch

$$\bar{\kappa} = \left[4 \pi^5 / 7 \zeta(3) \right]^{1/2} \kappa \quad (5.3)$$

verknüpft. Die Selbstkonsistenzgleichungen erhalten die Form

$$-\beta \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) - \bar{\kappa}^{-2} a^2 \right] \psi + \left\{ \ln t + 2t \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{1}{\omega_{\ell}} - \frac{1}{(\omega_{\ell}^2 + \psi^2)^{1/2}} \right] \right\} = P(r) = 2t P_1(r) + P_2(r) ; \quad (5.4)$$

$$\frac{\bar{\kappa}^2}{8\pi} \frac{d}{dr} \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} r a \right) - \beta \psi^2 a = a Q(r) = a (2t Q_1(r) + Q_2(r))$$

mit

$$P_1(r) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\sin^2 \Phi - \frac{\psi}{(\omega_{\ell}^2 + \psi^2)^{1/2}} \right] ;$$

$$P_2(r) = -\beta \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) - \bar{\kappa}^{-2} a^2 \right] \psi ;$$

$$Q_1(r) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sin^2 \Phi ; \quad Q_2(r) = -\beta \psi^2$$

Die freie Energie (2.9) (normiert auf $(\pi k_B T_c)^2 N_0 R_0^3$) redu-

ziert sich auf

$$F = 2\pi \int_0^{r_c} dr r \left\{ \bar{\kappa}^2 h^2(r) + \psi^2 \ln r + 2r \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\psi^2}{\omega_{\ell}} \right. \\ \left. - 2\psi \sin \Phi + a^2 \sin^2 \Phi - 2\omega_{\ell} (\cos \Phi - 1) + \left(\frac{d}{dr} \Phi \right)^2 \right\}. \quad (5.5)$$

Die folgenden Randbedingungen sind zu erfüllen

$$\begin{aligned} \Phi &= 0 \quad \text{für } r = 0; \quad d\Phi/dr = 0 \quad \text{für } r = r_c \\ \psi &= 0 \quad \text{für } r = 0; \quad d\psi/dr = 0 \quad \text{für } r = r_c \\ a &\rightarrow -\frac{\bar{\kappa}}{r} \quad \text{für } r \rightarrow 0; \quad a = 0 \quad \text{für } r = r_c \end{aligned}$$

Die unendlichen Summen in P_1, Q_1 und F werden bis

$l = l_{\max}(t)$ exakt ausgeführt. Dann werden die führenden Terme der asymptotischen Entwicklung von $\sin \Phi$ nach $1/\omega_{\ell}$ eingesetzt, welche durch Winkelmittelung und Bildung des schmutzigen Grenzfalles aus Gl.(2.10) folgt

$$\sin \Phi = \frac{\psi}{(\omega_{\ell}^2 + \psi^2)^{1/2}} + \frac{1}{\omega_{\ell}^2} \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) - \bar{\kappa}^{-2} a^2 \right] \psi. \quad (5.6)$$

Wie man sieht, führt die Korrektur der Summen einfach zu einer Korrektur der Vorfaktoren von P_2 und Q_2 . Das Magnetfeld ergibt sich aus a gemäß

$$h(r) = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r a(r)) \quad (5.7)$$

Für $\beta = \pi^2/2$ reduzieren sich die Selbstkonsistenz Gleichungen (5.4) nahe $t=1$ auf die GL Gleichungen.

b) Programmbeschreibung

Zunächst wollen wir auf die Funktion zweier Unterprogramme eingehen, die das eigentliche Kernstück der Rechnung bilden. Dann wird das Hauptprogramm behandelt.

Subroutine GREEN(A)(RMAX,ID,DEPAR,APOT,OMM,Y)

In diesem Unterprogramm wird die Bewegungsgleichung (5.2) für ϕ (Array Y) im Bereich $0 \leq r \leq RMAX$, unter Verwendung von $ID+1$ Stützstellen iterativ gelöst. Die Potentiale ψ und a werden durch die Arrays DEPAR und APOT übergeben. Bei Programmaufruf wird vom Hauptprogramm eine Startfunktion für Y geliefert; nach beendigter Iteration enthält Y die Lösung. Der Parameter ω_ℓ in (5.2) wird durch OMM übergeben.

In GREEN wird der Differentialoperator durch 3-Punkte Formeln digitalisiert und das entstehende nichtlineare Gleichungssystem durch systematische Newton Iteration gelöst. In GREENA wird 5-Punkte Digitalisierung verwendet und mit Newton-SOR gelöst. Das Verfahren in GREENA ist i.a. schneller und liefert eine grössere Genauigkeit, wird aber für sehr kleine ω_ℓ leicht instabil. In solchen Fällen kann GREEN zur Konstruktion besserer Anfangslösungen dienen.

Subroutine SC1(A)(RMAX,ID,ORD,RER,VEK,IMR,FELD)

Das Unterprogramm löst iterativ die gekoppelten Differential-

gleichungen (5.4) über dem Intervall $0 \leq r \leq RMAX$ auf $ID+1$ Stützstellen. Die Arrays RER und IMR enthalten den Anteil der endlichen Summen von $P_1(r)$ und $Q_1(r)$. Durch Addition der asymptotischen Anteile und von P_2 und Q_2 werden dann die "Inhomogenitäten" $P(r)$ und $Q(r)$ (Arrays PI,QI) konstruiert. ORD und VEK enthalten zunächst die alten Potentiale ψ und a als Startnäherung für die Iteration, nach Durchlauf des Programms stehen dort die Lösungen und das Magnetfeld findet sich auf dem Array FELD.

Zur Lösung werden die Differentialoperatoren mit Hilfe von 5-Punkte Formeln digitalisiert und mit Newton-SOR (SC1A) oder systematischem Newton (SC1) gelöst.

Hauptprogramm

Das Programm berechnet das Paarpotential ψ (Array ORDPAR) das Vektorpotential a (Array VEKPOT) und die freie Energie (ENERGY) und damit das untere kritische Feld H_{c1} (HC1). Als Daten werden eingelesen : die Zahl der Stützstellen $INZA+1$ ($INZA$ gerade und ≤ 118), der Zellenradius $RMAX$, der Abstand aufeinanderfolgender Temperaturen $TSTEP$, die Anzahl der zu berechnenden Temperaturen $ICABOT$, der GL Parameter $KAPPA$ und die Starttemperatur $CABOTE$ (i.a. nahe bei 1). Für $LS=.TRUE.$ liest das Programm auf Band gespeicherte Startpotentiale ein (Recordnumber = IBAND). Andernfalls werden mit Hilfe einer lokalen Näherung grobe Startpotentiale konstruiert.

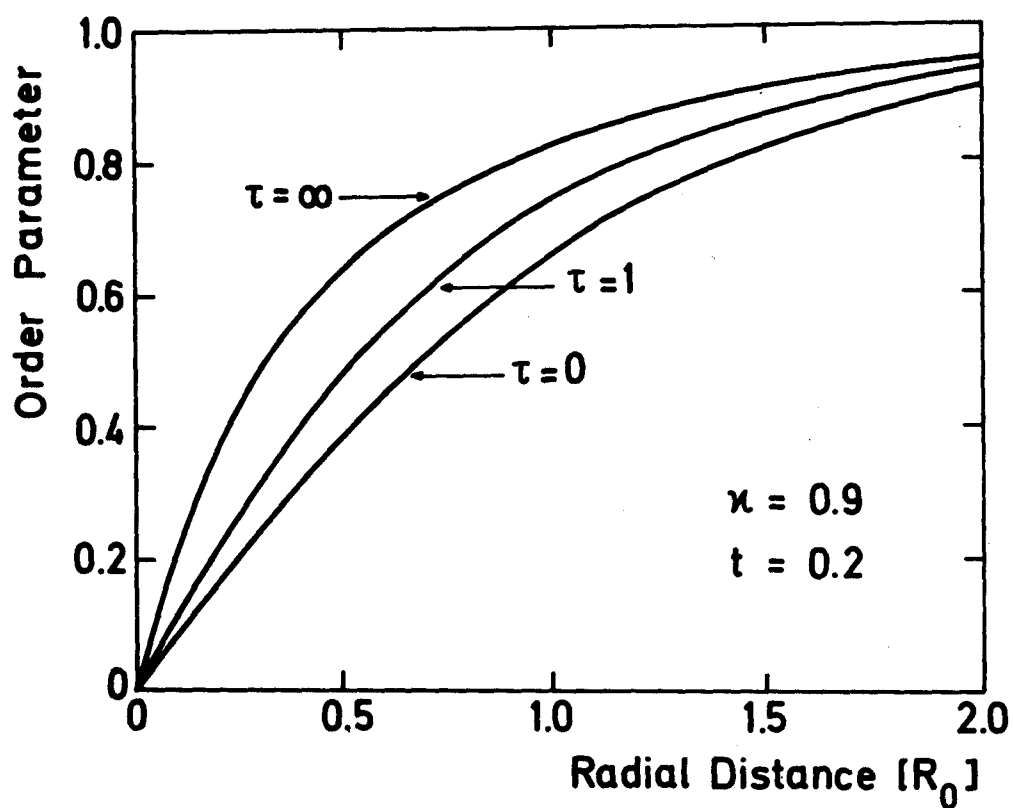
Zu den gegebenen Potentialen werden die Bewegungsgleichungen für alle ω_l mit $0 \leq l \leq \text{IOMCUT} - 1$ gelöst (OM-Schleife). Dazu dienen wahlweise die Unterprogramme GREEN (NEU=.TRUE.) oder GREENA (NEU=.FALSE.). Dann wird der Anteil der endlichen Summen von $P_1(\text{RER})$ und $Q_1(\text{IMR})$ gebildet und das Unterprogramm SC1 (NEU=.TRUE.) bzw. SC1A (NEU=.FALSE.) liefert neue Potentiale.

Damit wird ein neuer Zyklus gestartet bis die Potentiale aufeinanderfolgender Zyklen nur noch wenig voneinander abweichen (Abstand $\leq \text{EPZY}$). Jetzt wird die freie Energie berechnet und, falls LSB=.TRUE. gesetzt ist, die Potentiale auf Band gespeichert. Dann wird die Temperatur erniedrigt und die Rechnung wiederholt, wobei die vorher gewonnenen Potentiale und Greenschen Funktionen als Ausgangspunkt für die Iteration dienen.

Anstatt die Temperatur zu verringern, kann man durch kleine Abänderungen am Programm auch erreichen, daß bei konstanter Temperatur der Zellenradius verkleinert wird. Man gewinnt so die Potentiale und freie Energie des Wirbelgitters in der "Circular Cell Approximation" im Bereich $0 \leq B \leq H_{c2}$ (B=mittleres Magnetfeld).

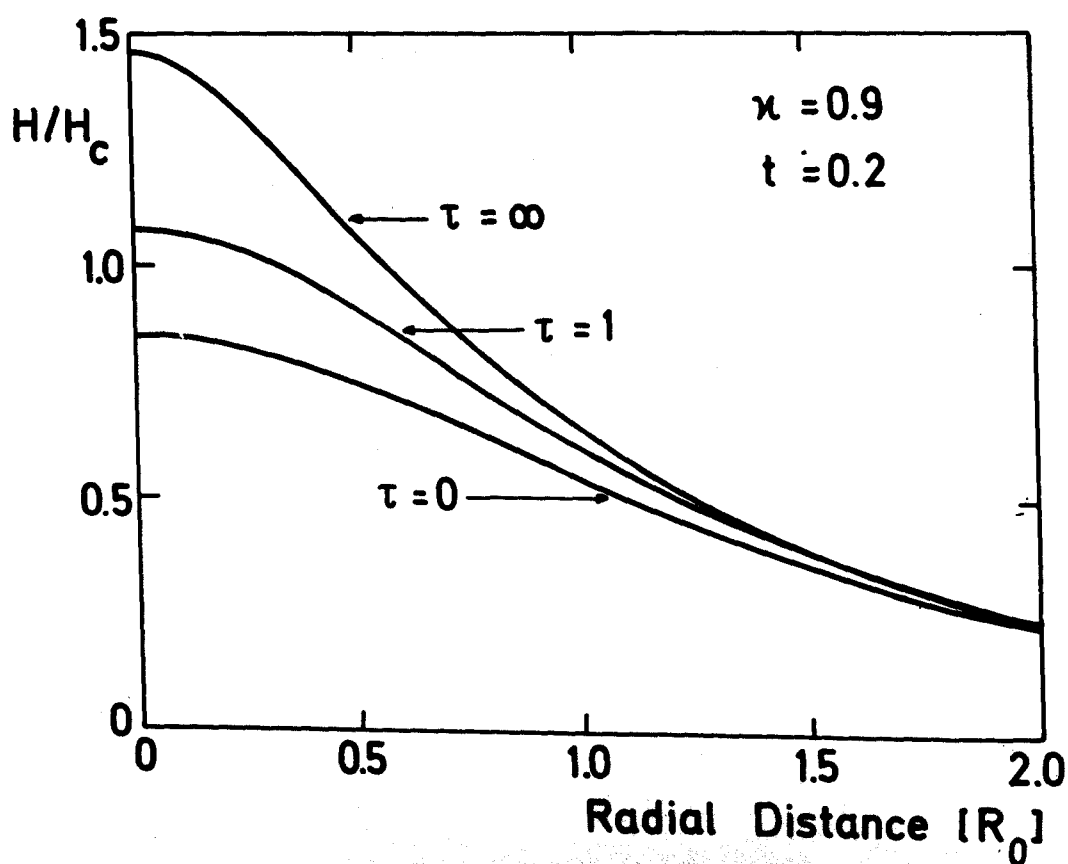
Literaturhinweise

1. G.Eilenberger, Z.Phys. 214, 195 (1968)
2. L.Kramer und W.Pesch, Solid State Comm. 12, 549 (1973)
3. W.Pesch und L.Kramer, J.Low Temp.Phys. 15, 367 (1974)
4. L.Kramer und W.Pesch, Z.Phys. 269, 59 (1974)
5. L.Kramer, W.Pesch und R.J.Watts-Tobin, J.Low Temp.Phys.
14, 29 (1974)
6. W.Pesch, R.J.Watts-Tobin und L.Kramer, Z.Phys.
269, 253 (1974); J.Low Temp.Phys. (im Druck)
7. K.Usadel, Phys.Rev.Letters 25, 507 (1970)
Phys. Rev. B4, 99 (1971)
8. L.Neumann und L.Tewordt, Z.Phys. 189, 55 (1966)



↑ Fig.1: Radialer Verlauf des Ordnungsparameter von isolierten Wirbeln bei $\kappa=0.9$ und reduzierter Temperatur $t=0.2$.

Fig.2: Radialer Verlauf des Magnetfeldes von isolierten Wirbeln bei $\kappa=0.9$ und reduzierter Temperatur $t=0.2$.
↓



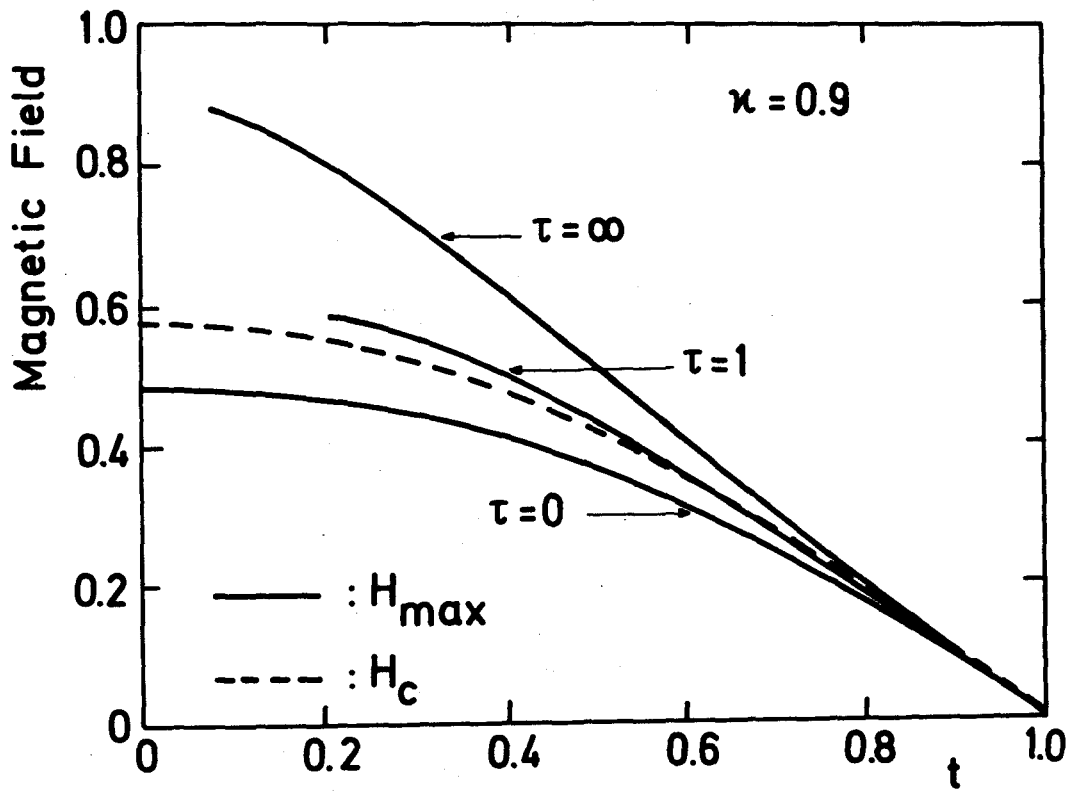
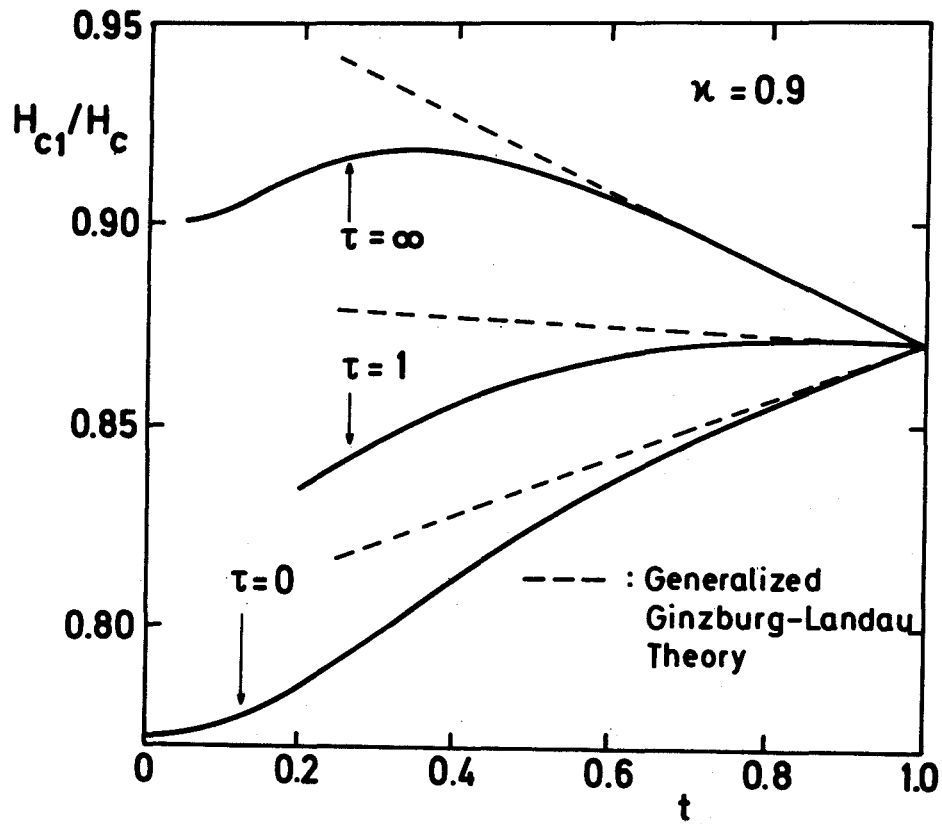
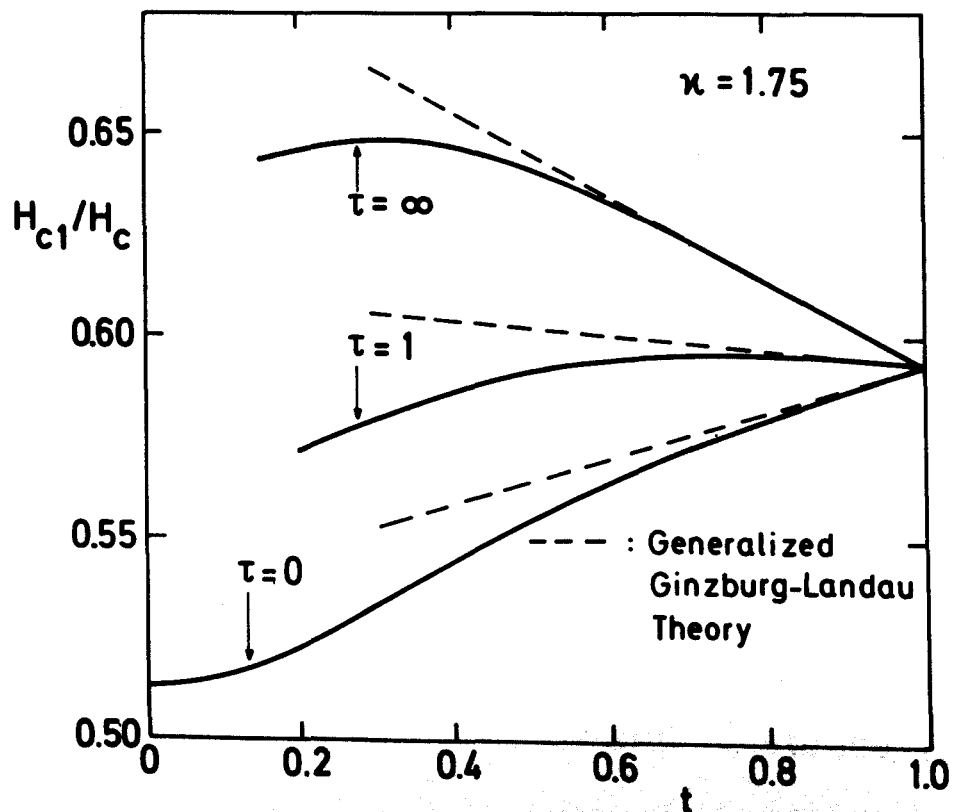


Fig.3: Temperaturverlauf des Magnetfeldes in der Wirbelmitte
 $H_{\max}$ für $\kappa=0.9$.



↑ Fig.4 Das untere kritische Feld H_{c1} dividiert durch das thermodynamische kritische Feld als Funktion der Temperatur für zwei Werte von κ . Die Resultate der verallgemeinerten Ginzburg-Landau Theorie nach Ref.8 sind zum Ver-
↓ Fig.5 gleich mit angegeben.



```

CC00000 //V4IFFC54 JOB (612,023600,6,30,9),KRAMER,CLASS=C
0000010 /*TAPE 2
CCCC020 // EXEC COM,PARM='TP3075,9M'
0000030 // EXEC COM,PARM='TP2831,9M'
0000040 // EXEC CLGFORTE,PARM.C='NDMAP,NOXREF',PARM.G=
CC00050 //C.SYSIN DD *
0000060 LOGICAL LS,HH,LH,AUS,LSPCT,LTEMP,SBAND,GILAT
0000070 GENERIC
0000080 COMPLEX*8 UB,UBB,UF1,HMIT,UHMIT,UAA,ABG,ABU,F3
0000090 LOGICAL LOG1,LOGSEN,LPLAT1,HCICAL
0000100 COMPLEX C,D,FC1,PHAS1,FCO,PHASO,ABF2,ABF1,ABF3,F0,ABF0
0000110 COMPLEX*8 PHA(120),Z1,Z2,PHAD(120),A,B,AA
0000120 COMPLEX*8 BE,ZZCOS(120),FPL(120)
0000130 REAL IM,IMR,RER,RE
0000140 REAL*4 RFPL1(120),AIFPL1(120),AIG(120),REG(120)
0000150 REAL*4 RFPL(120),AIFPL(120),RFPL2(120),AIFPL2(120)
0000160 REAL*4 GAM(120),FA0(40),FA1(40),FA2(40),EFF(40)
0000170 REAL*4 COS1(10),COS2(10),GINT(120)
0000180 REAL TEGER(150),TEG1(60),TEG2(60)
0000190 REAL ARS0(60),ARS1(60),ARS2(60),FELD(60),FELDVE(60)
0000200 REAL*8 CAD,DXD,DSSENK,DSSENK2,SUM,S1,S2,SS1,SS2,DQ,DQ1,UG,OG
0000210 REAL*8 LGH,DGH,A1,A2,A3,A4,AC,BLCG
0000220 REAL*8 SA1(150),SA2(150)
0000230 REAL*4 WURZEL(120),RSUM1,AISUM1,RB,REB,FREINT(120),
0000240 1 AIB,AIBB,RA,AIA,FAYC,FAY1,FAY2,AH1,AH2,GAMS,RSUM2,
0000250 2 AISUM2,RSUM3,AISUM3,RFPL1,AIFPL1,GAM1,CINV,
0000260 3 WURZ,DELTA1,FAKT1,EFFAK,EP,EPA,EP2,
0000270 4 DXGAM,DXGAM2,GMINV,GR,VEKINT,EINS,PEINS
0000280 REAL*4 CRDPAR(150),STEP(150),VEKPOT(150)
0000290 REAL SWUR(60),CMAR(10),GF(10)
0000300 REAL GAMP(60),GAMQ(60),PDD(60),QDD(60)
0000310 REAL DELTA(120),KABOTE,KAB2,KAPPA
0000320 REAL DELVER(120),VEKPC1(120),STEP1(120)
0000330 COMPLEX FFLEIN(120,5)
0000340 COMPLEX CCMEGA,CCM,DXD1,DXD2,DXD3,C2,C3,C6,C9,C12,C19,C5
0000350 COMPLEX*8 GC,F1,F2,HSUM,FPLINT(120),YY,PHAM,HG1,HG2
0000360 COMPLEX YYO
0000370 DIMENSION MARZA(5,10,50),CEFA(3),LES(10),LSR(10)
0000380 COMMON/PARAM/KAPPA,KABOTE,IMC
0000390 COMMON/CCMKRE/RE(60,60),IM(60,60),RER(60),IMR(60),
0000400 FFRE(60,60),FRER(60)
0000410 COMMON/LOC/GILAT
0000420 CALL MASKE
0000430 DEFINE FILE 10(40,120,U,LG),12(500,960,U,IBASA)
0000440 DEFINE FILE 11(40,120,U,LU)
CCCC450 C
0000460 C SUBMIT.VORFREE
0000470 C
0000480 C (Reiner Fall)
0000490 C
0000500 C STEUERUNG DER PLATTEN UND BAENDER; VARIABLEN
0000510 C BANDLESEN(LS=.TRUE.),BANDSCHREIBEN(SBAND=.TRUE.)
0000520 C LESEN DER POT.VON PLATTE(LSPOT=.TRUE.),TEMP.SPRUNG(LTEMP=.TRUE.)
0000530 C

```

```

0000540      LS=.TRUE.
0000550      SEAND=.FALSE.
0000560      LSPOT=.TRUE.
0000570      LTEMP=.FALSE.
0000580      GILAT=.FALSE.
0000590      TEMDIF=0.03
0000600      LSTART=1
0000610      EPS1=0.2E-4
0000620      EPSTA=0.9E-5
0000630      HCICAL=.TRUE.
0000640      LNUM=1
0000650 C
0000660 C      KONSTANTEN (UND SELTEN VERÄNDERLICHE)
0000670 C
0000680      READ(5,190) (LSR(I),I=1,LNUM)
0000690      MITTE=55
0000700      IOMALT=12
0000710      ICMODIF=ICMALT-1
0000720      GAM2=1.
0000730      EINS=1.
0000740      PEINS=0.1
0000750      GAMAX=1.8
0000760      YY=CMPLX(0.0,1.0)
0000770      YY0=CMPLX(0.0,0.0)
0000780      YY1=CMPLX(1.0,0.0)
0000790      ALS=.FALSE.
0000800      COS1(1)=-C.00060271426
0000810      COS1(2)=0.08708247359
0000820      COS1(3)=0.0774279107
0000830      COS1(4)=0.4420149614
0000840      COS1(5)=0.39317736864
0000850      COS2(1)=-C.00234077595
0000860      COS2(2)=0.02667717028
0000870      COS2(3)=0.02545777226
0000880      COS2(4)=0.3533420354
0000890      COS2(5)=0.38226196146
0000900      R16=1./16.
0000910      C2=CMPLX(C.5,0.0)
0000920      C3=CMPLX(1./3.,0.0)
0000930      C6=CMPLX(1./6.,0.0)
0000940      C12=CMPLX(1./12.,0.0)
0000950      C9=CMPLX(9.,0.0)
0000960      C19=CMPLX(19.,0.0)
0000970      C5=CMPLX(5.,0.0)
0000980      CCNSTA=0.46746687
0000990      RE1=57./26.
0001000      RE2=-21./13.
0001010      RE3=11./26.
0001020      RE4=36./13
0001030      RE5=-32./13
0001040      RE6=9./13.
0001050      AIMR1=3./2.
0001060      AIMR2=-1.
0001070      AIMR3=0.25

```

```

0001080      COSTEP=0.25
0001090      FAKT=1.
0001100      LSTEP=0
0001110 C
0001120 C      EINLESEN ANALYTISCHER POTENTIALE
0001130 C
0001140      IF(LSPOT) GOTO 11
0001150      KAPPA=1.751205
0001160      KABOTE=0.96
0001170      DX=0.6
0001180      INZA=50
0001190      ALPH=0.193
0001200      BET=0.42
0001210      IMC=INT(0.5*(1.+5./KABOTE))
0001220      BCSP=SQRT(CELSQU(KABOTE))
0001230      OGG=INZA*DX
0001240      INPL2=INZA+2
0001250      DAN=0.
0001260      DO 1 IP=2,INPL2
0001270      CAN=DAN+DX
0001280      ORDPAR(IP)=DELTAS(DAN,CGG,ALPH,BCSP)
0001290      VEKPC(T(IP)=ARAB(DAN,OGG,BET)
0001300 1      CCNTINUE
0001310      GOTO 22
0001320 C
0001330 C      EINLESEN DER POTENTIALE VON PERMANENTER PLATTE( UNIT 10 )
0001340 C      EINLESEN DER GREEN FUNKTIONEN VON BAND
0001350 C
0001360 11      LG=LSTART
0001370      READ(10,LG) KZZ,LB,INZA,DX,KAPPA,KABOTE,EP59,
0001380      F(ORDPAR(1K),VEKPC(T(1K),1K=1,MITTE)
0001390      WRITE(6,10) KZZ,LB,INZA,DX,KAPPA,KABOTE,EP59
0001400      IF(.NCT.LS) GOTO 22
0001410      READ(14) INPL,ICMALT,APPA,ABOTE,INTANF,INTEND,IBASA,DXA
0001420      WRITE(6,180) ICMALT,INPL,DXA,APPA,ABOTE
0001430      BACKSPACE 14
0001440      DIFER=ABS(INPL-1-INZA+KAPPA-APPA+KABOTE-ABOTE)
0001450      IF(DIFER.GT.1.E-4) WRITE(6,170) DIFER
0001460      IF((DIFER.GT.1.E-4).AND. (.NCT.LTEMP)) GOTO 5555
0001470      INZA=INPL-1
0001480      ICMDF=ICMALT-1
0001490      DO 2 K=1,INZA
0001500      DO 2 KP=1,ICMALT
0001510      READ(14) INPL,ICMALT,APPA,ABOTE,INTANF,INTEND,IBASA,DXA,
0001520      F((FPLEIN(KK,LL),KK=INTANF,INTEND),LL=2,5)
0001530 C      IBASA=IBASA-1
0001540      WRITE(12,IBASA) INTANF,INTEND,
0001550      F((FPLEIN(KK,LL),KK=INTANF,INTEND),LL=2,5)
0001560 2      CCNTINUE
0001570 39      CCNTINUE
0001580      READ(14,END=22)
0001590      GOTO 39
0001600 22      CCNTINUE
0001610 C

```

```

0001620 C      BEGINN DER RECHNUNG (BEI SCFCRTIGEM TEMPERATUR-
0001630 C                      SPRUNG: GOTO 3333 )
0001640 C
0001650      IF(LTEMP) GOTO 3333
0001660 1111 CONTINUE
0001670      AKAP2=KAPFA*KAPFA
0001680      CALL OMSUM(OMAR,GF)
0001690      ANCRM=EPSTA
0001700      IMC=INT(0.5*(1.+5./KABOTE))
0001710 C      IMC=4
0001720      IF(GILAT) IMC=5
0001730      IOMCUT=MINQ(IMC,10)
0001740      CGG=INZA*DX
0001750      KAB2=2.*KABOTE
0001760      DXD=DBLE(DX)
0001770      LH=.TRUE.
0001780      LOG1=.FALSE.
0001790      IF(LS.AND.((IOMALT.EQ.IOMCUT)) LOG1=.TRUE.
0001800      BCSPN=DELSQU(KABOTE)
0001810      BCSP=SQRT(BCSPN)
0001820      EPIFAK=EPS1*BCSP
0001830      MM=0
0001840      LSTEP=LSTEP+1
0001850      INA=2*INZA+1
0001860      INPL=INZA+1
0001870      INPL2=INZA+2
0001880      INPL4=INZA+4
0001890      IN7=INPL+7
0001900      IM1=INZA-1
0001910      IM2=INZA-2
0001920      IM3=INZA-3
0001930      INEND=MITTE+INZA
0001940      DO 3 I=1,INPL
0001950      GAMP(I)=1.
0001960      GAMP(I)=1.
0001970 3      CONTINUE
0001980      CAN=0.
0001990      DO 4 I=1,INA
0002000      STEP(I)=DAN
0002010 4      CAN=CAN+DX
0002020      WRITE(6,20) (STEP(IK),CRDPAR(IK),VEKPOT(IK),IK=1,INPL)
0002030 C
0002040 C      BEGINN DER ZYKLEN
0002050 C
0002060 2222 CONTINUE
0002070      LOGSEN=.FALSE.
0002080      CALL FRIST(ENDE)
0002090 C      IF(MM.GE.1) AUS=.TRUE.
0002100      IF(ENDE.LE.3000.) AUS=.TRUE.
0002110      WRITE(6,140) ENDE,MM
0002120      IF(AUS) GOTO 4444
0002130      NNSUP=0
0002140      MM=MM+1
0002150      ANCRM=AMIN1(ANCRM,EPSTA)

```

```

0002160      EPS=ANORM/4.
0002170      DO 5 I=1,INZA
0002180      ORDPAR(INPL+I)=ORDPAR(INPL-I)
0002190 5      VEKPOT(INPL+I)=-VEKPOT(INPL-I)
0002200      VEKPCT(1)=-1.
0002210      VEKPOT(INPL)=0.
0002220      CRDPAR(1)=0.
0002230      DO 6 IS=1,5
0002240      IL=6-IS
0002250      VEKPC1(IS)=VEKPOT(IL)
0002260      STEP1(IS)=-STEP(IL)
0002270 6      CONTINUE
0002280      DO 7 IS=2,INFL4
0002290      IL=4+IS
0002300      VEKPC1(IL)=VEKPOT(IS)
0002310      STEP1(IL)=STEP(IS)
0002320 7      CONTINUE
0002330      CALL SPLINR(1,STEP1,VEKPC1,IN7,STEP,ARSC,ARS1,ARS2,INPL2,
0002340      FTEGER,SUMPY,SA1,SA2,.,FALSE.)
0002350      DO 41 I=2,INPL
0002360 41      FELD(I)=ARS1(I)/STEP(I)
0002370      IRPAR=INZA
0002380      REST=(2.*IMC+3.)/(KABOTE*KABOTE*8.*IMC)
0002390      REST=REST/((2.*IMC+1.)*(IMC+1.))
0002400      IF(GILAT) REST=7.*1.2020569/(4.*KABOTE*KABCTE)
0002410      CALL SPLINR(1,STEP,ORDPAR,INA,STEP,VEKPC1,ARS1,TEG2,
0002420      FINPL2,TEGER,SUMPY,SA1,SA2,.,FALSE.)
0002430      IRPAR=INZA
0002440      RSENK=0.
0002450      IBAZ=-10
0002460 C
0002470 C      BEGINN DER RSENK SCHLEIFE
0002480 C
0002490      DO 1000 IRSENK=1,INZA
0002500      KF=0
0002510      IBAZ=IBAZ+10
0002520      IBA=ICMCUT
0002530      IF(LCGSEN) GOTO 55
0002540 C
0002550 C      BESETZUNG DER POTENTIALE FUER RSENK=0
0002560 C
0002570      DO 8 IN=MITTE,INEND
0002580      IJ=IN+1-MITTE
0002590      DELT1=ORDPAR(IJ)
0002600      PFA(IN)=1.
0002610      DELTA(IN)=DELT1
0002620      FELDVE(IJ)=VEKPOT(IJ)
0002630      DELVER(IJ)=DELT1
0002640      PHAD(IN)=DELT1
0002650 8      CONTINUE
0002660      IRPAR=INZA
0002670      ITA=IRPAR+1
0002680      INTANF=MITTE-IRPAR
0002690      INTEND=MITTE+IRPAR

```



```

0002700      GOTO 33
0002710 C
0002720 C   BESETZUNG DER POTENTIALE FUER RSENK#0
0002730 C
0002740 55   RSENK=RSENK+DX
0002750      RX=SQRT(OGG*OGG-RSENK*RSENK)
0002760      RX=RX/DX+0.5
0002770      IRPAR=INT(RX)
0002780      ITA=IRPAR+1
0002790      INTANF=MITTE-IRPAR
0002800      INTEND=MITTE+IRPAR
0002810      DSENK=DBLE(RSENK)
0002820      RSENK2=RSENK*RSENK
0002830      DSENK2=DSENK*DSENK
0002840      CAD=DXD
0002850      SUM=0.00
0002860      IRH=IRSENK
0002870      IRPL=IRH+1
0002880      S1=DBLE(ARSO(IRSENK))
0002890      S2=DBLE(ARSO(IRPL))
0002900      SS1=DBLE(ARS2(IRH))
0002910      SS2=DBLE(ARS2(IRPL))
0002920      DQ=(S2-S1)/DXD
0002930      DQ1=(SS2-SS1)/DXD
0002940      UG=DSENK
0002950      CG=UG+DXD
0002960      UGW=0.00
0002970      A1=S1-UG*DQ+0.5D0*UG*CG*SS1+DQ1*UG*CG*(CG-2.00*UG)/6.00
0002980      A2=DQ-0.5D0*(UG+CG)*SS1+(UG*CG-0.5D0*(CG*CG-2.00*UG*UG))*DQ1/3.00
0002990      A3=0.5D0*(SS1-UG*DQ1)
0003000      A4=DQ1/6.00
0003010      DAN1=0.
0003020      DO 9 I=1, ITA
0003030      SWUR(I)=SQRT(RSENK2+CAN1*CAN1)
0003040 9      DAN1=DAN1+DX
0003050      DO 12 IST=1, IRPAR
0003060      IK=MITTE +IST
0003070      WUR=DSQRT(DSENK2+DAD*DAD)
0003080      IF(WUR.LT.CG) GOTO 44
0003090      OGW=DSQRT(CG*CG-DSENK2)
0003100      BLOG=DLOG((OGW+CG)/(UGW+UG))
0003110      AC=A4*0.5D0*((OGW*CG-UGW*UG)+DSENK2*BLOG)
0003120      AC=DSENK*(A2*BLOG+A3*(OGW-UGW)+AC)
0003130      SUM=SUM+AC+A1*(DATAN(OGW/DSENK)-DATAN(UGW/DSENK))
0003140      UG=CG
0003150      OG=UG+DXD
0003160      UGW=OGW
0003170      IRPL=IRPL+1
0003180      S1=S2
0003190      SS1=SS2
0003200      S2=DBLE(ARSO(IRPL))
0003210      SS2=DBLE(ARS2(IRPL))
0003220      DQ=(S2-S1)/DXD
0003230      DQ1=(SS2-SS1)/DXD

```

```

0003240      A1=S1-UG*DC+0.5DC*UG*OG*SS1+DQ1*UG*OG*(OG-2*UG)/6.DO
0003250      A2=DQ-0.5DC*(LG+OG)*SS1+(LG*OG-0.5DO*(CG*CG-2.DO*UG*UG))*DQ1/3.DO
0003260      A3=0.5DO*(SS1-UG*DQ1)
0003270      A4=DQ1/6.CO
0003280  44      CCNTINUE
0003290      BLOG=DLOG((CAD+DSQRT(DAD*DAD+DSENK2))/(UGW+UG))
0003300      AC=A4*0.5DO*((CAD+DSQRT(CAC*CAC+DSENK2)-UGW*UG)+DSENK2*BLOG)
0003310      AC=DSENK*(A2*BLCG+A3*(DAD-LGW)+AC)
0003320      VEKINT=SUM+AC+A1*(CATAN(CAC/DSENK)-DATAN(LGW/DSENK))
0003330  C      IF(MM.EQ.1) WRITE(6,603) VEKINT, RSENK, DAC, WUR, SUM, A1, A2, A3, A4
0003340      PHAM=-CEXP(-YY*VEKINT)*YY
0003350      PHA(1K)=PHAM
0003360      DAD=DAD+D*DO
0003370  12      CCNTINUE
0003380      PHA(MITTE)=-YY
0003390      CALL SPLINR(2,STEP,CROPAR,INA,SWUR,VEKPC1,TEG1,TEG2,
0003400      FITA,TEGER,SUMY,SA1,SA2,.FALSE.)
0003410      VEKPO1(1)=CROPAR(IRSENK)
0003420      DO 13 I=1,ITA
0003430      MITS=MITTE+I-1
0003440      DELTA(MITS)=VEKPO1(I)
0003450      PHAC(MITS)=PHA(MITS)*DELTA(MITS)
0003460  13      CCNTINUE
0003470  33      CCNTINUE
0003480      DO 14 I=1,IRPAR,1
0003490      IA=I+MITTE
0003500      IB=MITTE-I
0003510      PHA(IB)=-CCNJG(PHA(IA))
0003520      PHAD(IB)=-CCNJG(PHAD(IA))
0003530  14      CCNTINUE
0003540  C
0003550  C      ENDE DER POTENTIALBERECHNUNG
0003560  C
0003570      ITA2=ITA+1
0003580      INTPLU=INTEND+1
0003590      INTA2=INTEND-1
0003600      INTA3=INTEND-2
0003610      INT1=2*IRPAR
0003620      DINT1=INT1
0003630      INT2=2*IRPAR-2
0003640      INTA4=INTEND-4
0003650      INTA6=INTEND-6
0003660      INTO=INT1+1
0003670      INSEND=IRPAR+MITTE
0003680      INSANF=MITTE-IRPAR
0003690      IRPAR=IRPAR
0003700      DO 15 IC=INTANF,INTEND
0003710      GINT(IC)=C.
0003720      FREINT(IC)=C.
0003730  15      FPLINT(IC)=YYO
0003740      IF(GILAT) GOTO 8889
0003750  C
0003760  C      ANFANG DER CM-SCHLEIFE
0003770  C

```

```

0003780      DO 2000 ICM=1,ICMCLT
0003790      NZ=IOMCUT-IOM
0003800      LPLAT1=.FALSE.
0003810      IF(.NOT.LTEMP) GOTC 66
0003820      ANZ2=(2.*NZ+1.)*(2.*NZ+1.)
0003830      FAKT=TD*SCRT((ANZ2+TCSPA2)/(ANZ2+TCSPN2))
0003840 66      CM=OMAR(ICMCUT+1-IOM)
0003850      GFCM=GF(ICMCUT+1-IOM)
0003860      DCM=CM
0003870      WURH=SQRT(DCM*DCM+BCSPN)
0003880      WURH2=BCSPN/(DCM+WURH)
0003890      CCM=CM
0003900      DO 16 II=1,IRPAR
0003910      IA=MITTE+II
0003920      IB=MITTE-II
0003930      DELTA1=DELTA(IA)
0003940      RA=(DELTA1-BCSP)*(DELTA1+BCSP)
0003950      ABC=RA/WURH+2.DO*WURH2
0003960      WURZ=SQRT(DCM*CCM+DELTA1*DELTA1)
0003970      WURZEL(IA)=ABC
0003980      RB=RA*RA/(WURH*(WURH+WURZ)*(WURH+WURZ))
0003990      FREINT(IA)=FREINT(IA)+COS1(1)*RB*GFOM
0004000      Z1=PHAD(IA)/SQRT(CM*CM+DELTA1*DELTA1)
0004010      ZZCOS(IA)=Z1
0004020      ZZCOS(IB)=-CCNJG(Z1)
0004030 16      CONTINUE
0004040      FAKT1=CABS(ZZCOS(INTEND))
0004050      EPFAK=EPS*FAKT1
0004060      DELTA1=DELTA(MITTE)
0004070      WURZ=SQRT(DCM*CCM+DELTA1*DELTA1)
0004080      RA=(DELTA1+BCSP)*(DELTA1-BCSP)
0004090      ABC=RA/WURH+2.DO*WURH2
0004100      WURZEL(MITTE)=ABC
0004110      RB=RA*RA/(WURH*(WURH+WURZ)*(WURH+WURZ))
0004120      FREINT(MITTE)=FREINT(MITTE)+COS1(1)*RB*GFOM
0004130      ZZCOS(MITTE)=PHAD(MITTE)/SQRT(CM*CM+DELTA1*DELTA1)
0004140      IF(LOG1) GOTO 77
0004150      IF(LS.AND.(NZ.LE.IOMDIF)) GOTC 77
0004160      IF(.NOT.LCGSEN) GOTC 88
0004170      IEAZ=IBAZ-10
0004180      IBASA=IBA+IEAZ
0004190      READ(12,IBASA) IN1,IN2,
0004200      F((FPLEIN(K,L),K=INTANF,INSEND),L=2,5)
0004210      IBAZ=IBAZ+10
0004220      LPLAT1=.TRUE.
0004230      GOTC 88
0004240 77      IBASA=IBA+IBAZ
0004250      READ(12,IBASA) IN1,IN2,
0004260      F((FPLEIN(K,L),K=INTANF,INSEND),L=2,5)
0004270 C      WRITE(6,1010) CM,APPA,RSENK,FPLEIN(55,2),FPLEIN(INTANF,2)
0004280      LPLAT1=.TRUE.
0004290      IF(.NOT.LTEMP) GOTC 88
0004300      DO 32 L=2,5
0004310      DO 32 K=INTANF,INTEND

```

```

0004320 32  FPLEIN(K,L)=FAKT*FPLEIN(K,L)
0004330 C
0004340 C  ANFANG DER CCS-SCHLEIFE
0004350 C
0004360 88  CCST=0.
0004370      DO 3C0C ICCS=2,5
0004380      COST1=CCS1(ICC5)
0004390      CCST2=CCS2(ICC5)
0004400      NN=0
0004410      LL=1
0004420      COST=COST+CCST2
0004430      CMEGA=1.
0004440      IF(CM.LT.0.3) CMEGA=0.2
0004450      K1=5
0004460      IF(OM.LT.C.8) GOTO 99
0004470 C
0004480 C  GREEN FUNKTIONEN MIT INTEGRALGLEICHUNG
0004490 C
0004500      KF=KF+1
0004510      DXGAM=COST/(CM*DX)
0004520      IF(LCGSEN) GOTO 111
0004530      EP=EXP(-1./DXGAM)
0004540      EP2=EP*EP
0004550      EPF(KF)=EP2
0004560      DXGAM2=DXGAM*DXGAM
0004570      OMINV=1./OM
0004580      FAYO=1.-1.5*DXGAM+DXGAM2
0004590      FAO(KF)=(FAYO-EP2*(0.5*DXGAM+DXGAM2))*CMINV
0004600      FA1(KF)=(2.*(DXGAM-DXGAM2)+EP2*2.*(DXGAM+DXGAM2))*CMINV
0004610      FA2(KF)=(DXGAM2-C.5*DXGAM-EP2*(1.5*DXGAM+DXGAM2+1.))*OMINV
0004620 111  CONTINUE
0004630      HH=.TRUE.
0004640      IF(LPLAT1) GOTO 122
0004650      DO 17 IS=INTANF,INTEND
0004660      A=ZCCOS(IS)
0004670      RFPL(IS)=REAL(A)
0004680      AIFPL(IS)=AIMAG(A)
0004690      FPL(IS)=A
0004700      GAM(IS)=GAM2
0004710 17  CCNTINUE
0004720      GOTO 133
0004730 122  DO 18 I=INTANF,INTEND
0004740      GAM(I)=GAM2
0004750      A=FPLEIN(I,ICCS)
0004760      AIFPL(I)=AIMAG(A)
0004770      RFPL(I)=REAL(A)
0004780 18  FPL(I)=A
0004790 133  EP2=EPF(KF)
0004800      EPA=EXP(-DINT1/DXGAM)
0004810      FAYO=FAO(KF)
0004820      FAY1=FA1(KF)
0004830      FAY2=FA2(KF)
0004840      FPL(INTANF)=-CCNJG(FPL(INTEND))
0004850 144  CCNTINUE

```

```

0004860      NN=NN+1
0004870      DO 19 I=1,IRPAR
0004880      J1=INTANF+I-1
0004890      J2=INTEND+I-1
0004900      A=CSQRT(VY1+FPL(J1)*FPL(J2))
0004910      E=A*PHAC(J1)
0004920      REG(J1)=REAL(E)
0004930      AIG(J1)=AIMAG(B)
0004940      B=A*PHAC(J2)
0004950      REG(J2)=REAL(B)
0004960      AIG(J2)=AIMAG(B)
0004970 19  CONTINUE
0004980      A=FPL(MITTE)
0004990      A=CSQRT(VY1+A*A)
0005000      B=A*PHAC(MITTE)
0005010      REG(MITTE)=REAL(B)
0005020      AIG(MITTE)=AIMAG(B)
0005030      RFPL2(INTEND)=0.
0005040      AIFPL2(INTEND)=C.
0005050      RSUM1=0.
0005060      AISUM1=C.
0005070      RB=REG(INTEND)
0005080      AIB=AIG(INTEND)
0005090      DO 21 IL=2,INT1,2
0005100      IRG=INTENC-IL
0005110      IRG1=IRG+1
0005120      REB=RB
0005130      AIBB=AIB
0005140      RA=REG(IRG1)
0005150      AIA=AIG(IRG1)
0005160      RB=REG(IRG)
0005170      AIB=AIG(IRG)
0005180      RSUM1=RSUM1*EP2+REB*FAY2+RA*FAY1+RB*FAY0
0005190      AISUM1=AISUM1*EF2+AIBB*FAY2+FAY1*AIA+AIB*FAY0
0005200      RFPL2(IRG)=RSUM1
0005210      AIFPL2(IRG)=AISUM1
0005220 21  CONTINUE
0005230      AH1=-RFPL2(INTANF)/(1.+EPA)
0005240      AH2=AIFPL2(INTANF)/(1.-EPA)
0005250      ANORM=0.
0005260      DO 23 IS=1,INTC,2
0005270      IRG=INTPLU-IS
0005280      RSUM1=RFPL2(IRG)+AH1
0005290      AISUM1=AIFPL2(IRG)+A+2
0005300      AH1=AH1*EP2
0005310      A+2=A+2*EP2
0005320      GAMS=GAM(IRG)
0005330      RSLM2=RSUM1-RFPL(IRG)
0005340      AISUM2=AISUM1-AIFPL(IRG)
0005350      RSUM3=GAMS*RSUM2
0005360      AISUM3=GAMS*AISUM2
0005370      IF(HH) GOTC 155
0005380      RFP1=RFPL1(IRG)
0005390      AIFP1=AIFPL1(IRG)

```

```

000540C      GAM1=SQRT((RFPL1-RSUM3)**2+(AIFPL1-AISUM3)**2)+1.E-10
0005410      GAM1=GAMS*SQRT(RFPL1*RFPL1+AIFPL1*AIFPL1)/GAM1
000542C      GAM1=AMIN1(EINS,GAM1)
0005430      GAM1=AMAX1(PEINS,GAM1)
0005440      RSUM3=GAM1*RSUM2
000545C      AISUM3=GAM1*AISUM2
0005460      GAM(IRC)=GAM1
0005470 155    RFPL1(IRC)=RSUM3
0005480      AIFPL1(IRC)=AISUM3
0005490      RFPL(IRC)=RFPL(IRC)+RSUM3
000550C      AIFPL(IRC)=AIFPL(IRC)+AISUM3
0005510      ANCRM=ANORM+SQRT(RSLM3*RSUM3+AISUM3*AISUM3)
0005520 23     CCNTINUE
000553C      GAM(INTANF)=GAM(INTEND)
0005540      RFPL1(INTANF)=-RFPL1(INTEND)
0005550      AIFPL1(INTANF)=AIFPL1(INTEND)
0005560      RFPL(INTANF)=-RFPL(INTEND)
0005570      AIFPL(INTANF)=AIFPL(INTEND)
0005580      RSUM1=5.*(RFPL(INTEND)-RFPL(INTA4))
000559C      AISUM1=5.*(AIFPL(INTEND)-AIFPL(INTA4))
0005600      RSUM1=(RSUM1+15.*RFPL(INTA3)+RFPL(INTA6))*R16
000561C      AISUM1=(AISUM1+15.*AIFPL(INTA3)+AIFPL(INTA6))*R16
0005620      RB=REG(INTA2)
0005630      AIB=AIG(INTA2)
000564C      RFPL(INTA2)=RSLM1
0005650      AIFPL(INTA2)=AISUM1
0005660      CC 24 IS=2,INT2,2
000567C      IRC=INTA2-IS
0005680      IRG1=IRC+1
000569C      RBB=RB
000570C      AIBB=AIB
0005710      RA=REG(IRG1)
000572C      AIA=AIG(IRG1)
0005730      RH=REG(IRC)
0005740      AIB=AIG(IRC)
0005750      RSUM1=RSUM1*EF2+RBB*FAY2+RA*FAY1+RB*FAY0
0005760      AISUM1=AISUM1*EP2+AIBB*FAY2+FAY1*AIA+AIB*FAY0
000577C      GAMS=GAM(IRC)
000578C      RSLM2=RSLM1-RFPL(IRC)
0005790      AISUM2=AISUM1-AIFPL(IRC)
000580C      RSUM3=GAMS*RSUM2
000581C      AISUM3=GAMS*AISUM2
0005820      IF(HT) GOTO 166
000583C      RFPL1=RFPL1(IRC)
000584C      AIFPL1=AIFPL1(IRC)
0005850      GAM1=SQRT((RFPL1-RSUM3)**2+(AIFPL1-AISUM3)**2)+1.E-10
0005860      GAM1=GAMS*SQRT(RFPL1*RFPL1+AIFPL1*AIFPL1)/GAM1
0005870      GAM1=AMIN1(EINS,GAM1)
0005880      GAM1=AMAX1(PEINS,GAM1)
000589C      RSLM3=GAM1*RSLM2
0005900      AISUM3=GAM1*AISUM2
000591C      GAM(IRC)=GAM1
0005920 166    RFPL1(IRC)=RSUM3
0005930      AIFPL1(IRC)=AISUM3

```

```

0005940      RFPL(IRC)=RFPL(IRC)+RSUM3
0005950      AIFPL(IRC)=AIFPL(IRC)+AISUM3
0005960      ANCRM=ANORM+SQRT(RSLM3*RSLM3+AISUM3*AISUM3)
0005970  24  CONTINUE
0005980      HT=.FALSE.
0005990      ANCRM=ANCRM/INT1
0006000      DO 25 I=INTANF,INTEND
0006010  25  FPL(I)=CMFLX(RFPL(I),AIFPL(I))
0006020      IF(ANORM.GT.1.) GOTO 177
0006030      IF(NN.GT.80) GOTO 177
0006040      IF(ANCRM.GT.EPFAK) GOTO 144
0006050      GOTO 188
0006060 C
0006070 C  GREEN FUNKTIONEN MIT DIFFERENTIALGLEICHUNG
0006080 C
0006090 C199  LL=LL+1
0006100  199  IF(LL.GT.1) K1=1C
0006110      K1=K1+NN
0006120      IF(LL.GT.1) CMEGA=CMEGA/3.
0006130      IF(LL.GT.2) CMEGA=CMEGA/2.
0006140      IF(LL.GT.1) WRITE(6,30) OM,COST,RSENK,NN
0006150      LL=LL+1
0006160      IF(LL.GT.3) GOTO 177
0006170  99  DXD1=DX/CCST
0006180      DXD2=C2*DXD1
0006190      DXD3=C12*DXD2
0006200      IF(LPLAT1) GOTO 244
0006210      DO 34 IS=INTANF,INTEND
0006220  34  FPL(IS)=ZCCS(IS)
0006230      GOTO 37
0006240  244  DO 35 I=INTANF,INTEND
0006250  35  FPL(I)=FPLEIN(I,ICOS)
0006260  37  EPSOM=1.E-3
0006270      FPL(INTANF)=-CONJG(FPL(INTEND))
0006280      QLT=1.E2
0006290  211  CCNTINLE
0006300      NN=NN+1
0006310      CCMEGA=CMEGA
0006320      ANCRM=C.
0006330      A=-CONJG(FPL(INTANF))
0006340      B=FPL(INTEND-1)
0006350      C=FPL(INTEND-2)
0006360      D=FPL(INTEND-3)
0006370      FC1=FPL(INTANF+1)
0006380      PHAS1=PHAD(INTEND-1)
0006390      FCO=FPL(INTANF+2)
0006400      PHAS0=PHAD(INTEND-2)
0006410      F3=CSQRT(Y1+B*FC1)
0006420      ABF2=DXD2*(CCM*A-CSQRT(Y1-A*CONJG(A))*PHAD(INTEND))
0006430      ABF1=DXD2*(COM*B-F3*PHAS1)
0006440      BB=B-COMEGA*(E-A+ABF2+ABF1)/(Y1+DXD2*(COM-FC1*PHAS1+C2/F3))
0006450      ANORM=ANORM+CABS(BB-B)
0006460      FPL(INTEND-1)=BB
0006470      ABF1=DXD1*(CCM*C-CSQRT(Y1+C*FCO)*PHAS0)

```

```

0006480      AA=C-COMEGA*(D*C3+C2*C-BB+A*C6+ABF1)
0006490      ABF1=DXD3*(BB*CCP-CSQRT(YY1+BB*FC1)*PHAS1)
0006500      ANORM=ANORM+CABS(AA-C)
0006510      ABF2=ABF2*C12
0006520      FPL(INTEND-2)=AA
0006530      DO 26 J=3,INT1
0006540      I=INTEND-J
0006550      ABF3=ABF2
0006560      ABF2=ABF1
0006570      FC1=FC0
0006580      FC0=FPL(INTANF+J)
0006590      PHAS1=PHAS0
0006600      PHAS0=PHAD(I)
0006610      FC=FPL(I)
0006620      F1=AA
0006630      F3=CSQRT(YY1+FC*FC0)
0006640      ABFO=DXD3*(COM*FO-F3*PHAS0)
0006650      AA=YY1+C9*DXD3*(COM-FC0*PHAS0*C2/F3)
0006660      ABF1=DXD3*(COM*F1-CSQRT(YY1+F1*FC1)*PHAS1)
0006670      AA=FO-COMEGA*(FO-F1+C9*ABFC+C19*ABF1-C5*ABF2+ABF3)/AA
0006680      ANCRM=ANCRM+CABS(AA-FO)
0006690      FPL(I)=AA
0006700 26    CCNTINUE
0006710      ANCRM=ANCRM/INT1
0006720 C    IF(LL.LE.1) GOTO 222
0006730      CMS=SQRT(ANCRM/CUT)
0006740      QLT=ANORM
0006750      CMS=(QMS+OMEGA-1.)/(COMEGA*SQRT(CMS))
0006760      CMS=1.-CMS*CMS
0006770      IF(QMS.LT.C.) GOTO 222
0006780      QMS=2./(1.+SQRT(CMS))
0006790      CMS=AMIN1(CMS,1.)
0006800      IF(NN.LE.K1) GOTO 233
0006810      IF(ABS(CMS-CM1).GE.EPSOM) GOTO 233
0006820      COMEGA=CMS
0006830      EPSOM=EPSOM*1.E-1
0006840 233   CM1=CMS
0006850 222   CCNTINUE
0006860      IF(ANORM.GT.1.) GOTO 199
0006870      IF(NN.GT.150) GOTO 177
0006880      IF(ANCRM.GT.EPFAK) GOTO 211
0006890      FPL(INTEND)=-CONJG(FPL(INTANF))
0006900 C
0006910 C      ENDE DER ITERATIVEN LÖSUNG DER BEWEGUNGSGLEICHUNG
0006920 C
0006930 188   NARZA(ICCS,ICP,IFSENK)=NA
0006940      NNSUM=NNSUM+NN
0006950      DO 27 I=INTANF,INTEND
0006960 27    FPLEIN(I,ICCS)=FPL(I)
0006970      DO 28 IP=1,IRPAR
0006980      IA=MITTE+IP
0006990      IB=MITTE-IP
0007000      F1=FPL(IA)
0007010      F2=FPL(IB)

```



```

0007020      GINT(IA)=GINT(IA)+GFOM*AIMAG(CSQRT(YY1+F1*F2))*COST2
0007030      FPLINT(IA)=FPLINT(IA)+GFCM*(F1-ZZCOS(IA))*COST1
0007040      FPLINT(IB)=FPLINT(IB)+GFOM*COST1*(F2-ZZCOS(IB))
0007050  28      CCNTINUE
0007060      F1=FPL(MITTE)
0007070      GINT(MITTE)=GINT(MITTE)+GFCM*COST2*AIMAG(CSQRT(YY1+F1*F1))
0007080      FPLINT(MITTE)=FPLINT(MITTE)+GFCM*COST1*(F1-ZZCOS(MITTE))
0007090      IF(.NOT.HCICAL) GOTO 200
0007100      F1=FPL(INTEND)
0007110      F2=FPL(INTANF)
0007120      GC=SQRT(1.DO+F1*F2)
0007130      IB=INTANF
0007140      IA=INTEND
0007150      REAT=REAL((PHAD(IA)*F2+PHAD(IB)*F1)/(1.DO+GC))
0007160      FREINT(IA)=FREINT(IA)+COS1(ICOS)*(WURZEL(IA)+REAT)*GFOM
0007170      F1=FPL(INTEND)
0007180      UF1=FPL(INTANF)
0007190      B=FPL(INTEND-1)
0007200      UB=FPL(INTANF+1)
0007210      HMIT=FPL(INTEND-2)
0007220      UHMIT=FPL(INTANF+2)
0007230      AA=FPL(INTEND-3)
0007240      UAA=FPL(INTANF+3)
0007250      BB=FPL(INTEND-4)
0007260      UBB=FPL(INTANF+4)
0007270      IA=INTEND-2
0007280      IB=INTANF+2
0007290      ABC=(0.25DC*(BB-F1)+2.DO*(B-AA))/(3.DO*DxD)
0007300      ABU=(0.25DC*(UF1-UBB)+2.DO*(UAA-UB))/(3.DO*DxD)
0007310      GC=SQRT(1.DO+HMIT*UHMIT)
0007320  C      ABC1=CINV*(CCM*HMIT-PHAD(IA)*GC)
0007330      HSUM=(HMIT*ABU+ABO*UHMIT)/(1.DO+GC)
0007340  C      IF(MM.EQ.1) WRITE(6,604) ABC1,ABO,DOM,COST,RSENK,IA
0007350      HSUM=CCS2(ICCS)*HSUM+CCS1(ICOS)*(PHAD(IA)*UHMIT
0007360      *+PHAD(IB)*HMIT-2.DO*CCM*HMIT*UHMIT/(1.DO+GC)+WURZEL(IA))
0007370      FREINT(IA)=REAL(HSUM)+FREINT(IA)
0007380      ABC=0.5DO/DxD*(F1-HMIT)
0007390      ABU=0.5DO/DxD*(UHMIT-UF1)
0007400      GC=SQRT(1.DO+B*UB)
0007410  C      ABC1=CINV*(CCM*B-PHAD(IA+1)*GC)
0007420      HSUM=COS2(ICOS)*(ABU*B+ABO*UB)/(1.DO+GC)
0007430  C      IF(MM.EQ.1) WRITE(6,604) ABC1,ABO,DOM,COST,RSENK,IA
0007440      HSUM=HSUM+COS1(ICOS)*(PHAD(IA+1)*UB+PHAD(IB-1)*B
0007450      * -2.DO*CCM*UB*B/(1.DO+GC)+WURZEL(IA+1))
0007460      FREINT(IA+1)=REAL(HSUM)*GFCM+FREINT(IA+1)
0007470      DO 589 I=3,IRPAR
0007480      IA=INTEND-1
0007490      IB=INTANF+I
0007500      F1=B
0007510      B=HMIT
0007520      HMIT=AA
0007530      AA=BB
0007540      BB=FPL(IA-2)
0007550      UF1=UB

```

```

0007560      UB=LHMIT
0007570      UHMIT=UAA
0007580      UAA=UBB
0007590      UBB=FPL(IB+2)
0007600      ABO=(0.25DC*(BB-F1)+2.DO*(B-AA))/(3.DO*DXD)
0007610      ABU=(0.25DO*(UF1-UBB)+2.DO*(UAA-UB))/(3.DO*DXD)
0007620      GC=SQRT(1.DO+HMIT*UHMIT)
0007630 C      ABO1=CINV*(DOM*HMIT-PHAD(IA)*GC)
0007640      HSUM=(HMIT*ABU+ABO*UHMIT)/(1.DO+GC)
0007650 C      IF(MM.EQ.1) WRITE(6,604) ABC1,ABC,DCM,CCST,RSENK,IA
0007660      HSUM=DCOS(ICOS)*HSUM+DCOS(ICOS)*(PHAD(IA)*UHMIT
0007670      * +PHAD(IB)*HMIT-2.DO*DCM*HMIT*UHMIT/(1.DO+GC)+WURZEL(IA))
0007680      FREINT(IA)=REAL(HSUM)*GFOR+FREINT(IA)
0007690      589 CCNTINUE
0007700      200 CCNTINUE
0007710      3000 CONTINUE
0007720      IEASA=IEA+IEAZ
0007730      WRITE(12,IBASA) INTANF,INTEND,
0007740      F((FPLEIN(K,L),K=INTANF,INTEND),L=2,5)
0007750      IBA=IBA-1
0007760      CALL FRIST(ENDE)
0007770      IF(ENDE.LE.1000) AUS=.TRUE.
0007780      IF(AUS) GOTO 4444
0007790      2000 CONTINUE
0007800 C
0007810 C      ENDE DER CCS-SCHLEIFE(3000); ENDE DER CM-SCHLEIFE(2000)
0007820 C
0007830      DC 29 ISUM=2,ITA
0007840      IA=MITTE+ISUM-1
0007850      IB=MITTE-ISUM+1
0007860      IM(ISUM,IRSENK)=GINT(IA)
0007870      IF(HC1CAL) FRE(ISUM,IRSENK)=FREINT(IA)
0007880      HG1=PHA(IB)*FPLINT(IA)
0007890      HG2=PHA(IA)*FPLINT(IB)
0007900      RE(ISUM,IRSENK)=-REAL(HG1+HG2)
0007910      IF(HC1CAL) FRE(1,IRSENK)=FREINT(MITTE)
0007920      29 CCNTINUE
0007930      IM(1,IRSENK)=GINT(MITTE)
0007940      RE(1,IRSENK)=REAL(FPLINT(MITTE)*(CONJG(PHA(MITTE))-PHA(MITTE)))
0007950      IF(HC1CAL) FRE(ITA2,IRSENK)=FRE(IRPAR,IRSENK)
0007960      RE(ITA2,IRSENK)=RE(IRPAR,IRSENK)
0007970      IM(ITA2,IRSENK)=-IM(IRPAR,IRSENK)
0007980      LOGSEN=.TRUE.
0007990      1000 CCNTINUE
0008000 C
0008010 C      ENDE DER RSENK-SCHLEIFE;KREISINTEGRATION;SC-GLEICHUNG
0008020 C
0008030      WRITE(6,40) (((NARZA(I,J,K),I=2,5),J=1,ICMCUT),K=1,INZA)
0008040      WRITE(6,50) ANSUM
0008050      RE(1,INPL)=(4.*RE(1,INZA)-RE(1,IM1))/3.
0008060      IM(1,INPL)=C.
0008070      RE(2,INPL)=RE(1,INPL)
0008080      IM(2,INPL)=C.
0008090      IF(HC1CAL) GOTO 592

```

```

0008100      CALL KREIS(INZA)
0008110      GOTO 300
0008120      552  CCNTINUE
0008130      FRE(1,INPL)=(4.*FRE(1,INZA)-FRE(1,INZA-1))/3.
0008140      FRE(2,INPL)=FRE(1,INPL)
0008150      CALL KREIS1(INZA)
0008160      657  FORMAT(6(E14.6,3X))
0008170      FRER(INZA)=RE1*FRER(IM1)+RE2*FRER(IM2)+RE3*FRER(IM3)
0008180      FRER(INPL)=RE4*FRER(IM1)+RE5*FRER(IM2)+RE6*FRER(IM3)
0008190      WRITE(6,657) (FRER(I),I=1,INPL)
0008200      8889  CCNTINUE
0008210      DO 734 I=2,INPL
0008220      IF(GILAT) FRER(I)=0.
0008230      DEL=CRDPAR(I)
0008240      DEL2=DEL*DEL
0008250      FR=FELD(I)*FELD(I)*AKAP2*CONSTA
0008260      FR=FR+REST*(0.25*((DEL2-BCSFN)**2)+ARS1(I)*ARS1(I)/3.)
0008270      FR=FR*STEP(I)+REST*DEL2*VEKPOT(I)*VEKPCT(I)/(3.*STEP(I))
0008280      734  FRER(I)=FRER(I)*STEP(I)*KABCTE*2.+FR
0008290      FRER(1)=C.
0008300      WRITE(6,657) (FRER(I),I=1,INPL)
0008310      CALL SPLINR(1,STEP,FRER,INPL,STEP,ARSO,ARS1,ARS2,
0008320      FINPL,TEGER,SLMY,SA1,SA2,.TRUE.)
0008330      FC1=TEGER(INPL)/(2.*AKAP2*CONSTA)
0008340      IF(GILAT) GCTC 8899
0008350      300  CONTINUE
0008360      RER(INZA)=RE1*RER(IM1)+RE2*RER(IM2)+RE3*RER(IM3)
0008370      RER(INPL)=RE4*RER(IM1)+RE5*RER(IM2)+RE6*RER(IM3)
0008380      IMR(INPL)=C.
0008390      IMR(INZA)=AIMR1*IMR(IM1)+AIMR2*IMR(IM2)+AIMR3*IMR(IM3)
0008400      8899  CALL SC1(OGG,INZA,CRDPAR,RER,VEKPOT,IMR,FELD)
0008410      IF(GILAT) GCTC 8999
0008420      C
0008430      C      ZYKLENMISCHUNG
0008440      C
0008450      ANORM=0.
0008460      DO 31 I=1,INPL
0008470      PS=DELVER(I)
0008480      QS=FELDV(I)
0008490      GAP=GAMP(I)
0008500      GAG=GAMQ(I)
0008510      P3=ORDPAR(I)-PS
0008520      Q3=VEKPCT(I)-QS
0008530      P4=GAP*P3
0008540      Q4=GAG*Q3
0008550      IF(LH) GCTC 255
0008560      PD1=PDD(I)
0008570      QD1=QDD(I)
0008580      PD2=ABS(FC1-P4)+1.E-10
0008590      QD2=ABS(QD1-Q4)+1.E-10
0008600      GAP1=ABS(FC1)*GAP/PD2
0008610      GAG1=ABS(QD1)*GAG/QD2
0008620      GAP1=AMIN1(GAMAX,GAP1)
0008630      GAG1=AMIN1(GAMAX,GAG1)

```

```

0008640      GAP1=AMAX1(0.2,GAP1)
0008650      GAQ1=AMAX1(0.2,GAQ1)
0008660      P4=GAP1*P3
0008670      Q4=GAQ1*Q3
0008680      GAMP(I)=GAP1
0008690      GAMQ(I)=GAQ1
0008700 255    PCC(I)=P4
0008710      QDD(I)=Q4
0008720      ORCPAR(I)=PS+P4
0008730      VEKPC(I)=QS+Q4
0008740      ANCRM=ANCRM+ABS(P4)+ABS(Q4)
0008750 31    CONTINUE
0008760      LF=.FALSE.
0008770      ANCRM=ANCRM/INZA
0008780 C
0008790 C  AUSDRUCKEN DER POTENTIALE,REF,IMR
0008800 C  SCHREIBEN DER POTENTIALE AUF PLATTE (UNIT 11 )
0008810 C
0008820 8599 WRITE(6,60)
0008830      WRITE(6,70) (STEP(IK),ORCPAR(IK),DELVER(IK),VEKPC(IK),FELCVE(IK)
0008840      FFELD(IK),RER(IK),IMR(IK),IK=1,INPL)
0008850      IF(.NOT.GILAT) WRITE(6,80) ANCRM,GAMP(2),GAMQ(2),
0008860      IGAMP(INPL),GAMQ(INPL)
0008870      LTEMP=.FALSE.
0008880      LOGI=.TRUE.
0008890      LU=LSR(LSTEP)
0008900      WRITE(6,10) ICMCLT,LU,INZA,DX,KAPPA,KABCTE,EPS1,FC1
0008910      IF(.NOT.GILAT) WRITE(11'LU) ICMCLT,LU,INZA,DX,KAPPA,
0008920      FKABOTE,EPS1,(ORCPAR(IK),VEKPC(IK),IK=1,INPL)
0008930      IF(MM.EQ.1) GOTO 2222
0008940 C      IF(MM.EQ.2) GOTO 5555
0008950      IF(GILAT) GOTO 5555
0008960      IF (ANORM.GT.EP1FAK) GOTO 2222
0008970 C
0008980 C  ENDE DES ZYKLLS
0008990 C
0009000      WRITE(6,90) MM,BCSP,DX,DGC
0009010 C
0009020 C  EANDSCHREIBETEIL
0009030 C
0009040 4444 IF(.NOT.SBAND) GOTO 266
0009050      DO 36 I=1,INZA
0009060      DO 36 J=1,ICMCLT
0009070      IEASA=IC*(I-1)+ICMCLT+1-J
0009080      INA=IPASA
0009090      READ(12'IBASA) INTANF,INTEND,
0009100      F((FPLEIN(KK,LL),KK=INTANF,INTEND),LL=2,5)
0009110      WRITE(15) INPL,ICMCUT,KAPPA,KABCTE,INTANF,INTEND,INA,DX,
0009120      F((FPLEIN(KK,LL),KK=INTANF,INTEND),LL=2,5)
0009130 36    CONTINUE
0009140      END FILE 15
0009150 266    CONTINUE
0009160      IF(AUS) GOTO 5555
0009170      ICMCIF=ICMCLT-1

```

```

0009180      GCTC 3333
0009190 C
0009200 C      ANORMALER AUSSTIEG AUS DER BEWEGUNGSGLEICHUNG
0009210 C
0009220 177      CCNTINUE
0009230      NARZA(1CCS,1CM,IRSENK)=90
0009240      WRITE(6,1CC) NN,ANCRM,EPS
0009250      WRITE(6,11C) (IS,FPL(IS),IS=INTANF,INTEND)
0009260      WRITE(6,120) CM,COST,RSENK,NN,LL,OMEGA,ANORM
0009270      IF(ANORM.LE.C.5E-2) GCTC 188
0009280      WRITE(6,40) ((( NARZA(I,J,K),I=2,5),J=1,ICMCLT),K=1,INZA)
0009290      GOTO 5555
0009300 C
0009310 C      TEMPERATURKLETTERTeil
0009320 C
0009330 3333 CCNTINUE
0009340      IF(LSTEP.EQ.LNUM) GOTO 5555
0009350      ANCRM=EPSTA
0009360      LWRITE=LWRITE+1
0009370      IF(LSTEP.EQ.0) LWRITE=LWRITE-1
0009380      IF(LTEMP) IMC=INT(0.5*(1.+5./KABCTE))
0009390      WUR1=SQRT(1.-KABOTE)
0009400      BCSPA=DELSQU(KABCTE)
0009410      TCSPA=SQRT(BCSPA)/KABOTE
0009420      TCSPA2=TCSPA*TCSPA
0009430      KABOTE=KABCTE-TENDIF
0009440      WUR2=SQRT(1.-KABOTE)
0009450      BCSPN=DELSQU(KABCTE)
0009460      TCSPN=SQRT(BCSPN)/KABCTE
0009470      TCSPN2=TCSPN*TCSPN
0009480      TD=TCSPN/TCSPA
0009490      DX=DX*WUR1/WUR2
0009500      LTEMP=.TRUE.
0009510      BCS1=SQRT(BCSPN/BCSPA)
0009520      DO 38 K=1,INPL
0009530      ORCPAR(K)=CRCPAR(K)*BCS1
0009540 38      CCNTINUE
0009550      GOTO 1111
0009560 C
0009570 C      SPRUNG ZUM BEGINN DER RECHNUNG
0009580 C
0009590 5555 CCNTINUE
0009600      WRITE(6,13C) ENDE,CM,COST,RSENK
0009610      STCP
0009620 10      FORMAT(2X,'ICMCUT= ',I4,2X,'LB= ',I4,2X,'INZA= ',I4,2X,'DX= ',
0009630      FF8.6,2X,'KAPPA= ',F9.6,2X,'KABCTE= ',F6.4,2X,'EPS1= ',E8.2,
0009640      F2X,'FC1= ',E12.6)
0009650 20      FORMAT(3(3(2X,F11.6),3X))
0009660 1010 FORMAT(2X,'PARAM',3(F10.6),2X,/,4(E14.6,E14.6,2X))
0009670 30      FORMAT(/,'SCHALTER',3F14.6,I5)
0009680 40      FORMAT(4C(1X,I2))
0009690 50      FORMAT('GESAMTZAHL DER ITERATIONEN DER INTGL=',I6)
0009700 60      FORMAT(7X,'RAD',13X,'DELTNEU',9X,'DELTALT',7X,'VEKPOTALT',
0009710      F7X,'VEKPOTNEU',12X,'FELD',13X,'RER',13X,'IMR')

```

```

CCC972C 7C  FORMAT(5F16.8,3E16.7)
0009730 80  FORMAT(1X,'ZYKLUS: ANCRM= ',E10.3,'GAMP(2)= ',F10.6,'GAMC(2)= ',
0009740 FF10.6,'GAMP(INPL)= ',F10.6,'GAMC(INPL)= ',F10.6)
CCC975C 9C  FORMAT(/2X,'VERFAHREN KONVERGIERT NACH',I3,2X,'ITERATIONEN ',
0009760 F'(DELTABCS=',F12.8,2X,'DX=',F8.6,2X,
CCC977C F'INTERVALLAENGE=',F9.6,''))
0009780 100  FCRMAT(5X,'DIE ITERATION DER GREEN FUNKTION WURDE NACH
0009790 F',I6,'ITERATIONEN ABGEBROCHEN MIT ETA=',E12.4,'(EPS=',E12.4,'))')
CCC980C 120  FCRMAT(3X,'CM=',F5.2,2X,'CCST=',2X,F5.2,'RSENK=',F7.4,2I8,2F12.8)
0009810 110  FORMAT(/4X,3(I5,E14.6,2X,E14.6))
000982C 130  FCRMAT(1X,'AUSSTIEG BEI ZEIT (1/100 SEC) = ',F12.4,2X,'OM= ',
0009830 FF10.6,2X,'CCST= ',F10.6,2X,'RSENK= ',F10.6)
000984C 140  FCRMAT(3X,'ZEIT= ',F10.4,2X,'ZYKLENZAHL= ',I6)
CCC985C 17C  FCRMAT(2X,'BANDFEHLER|||',CIFER=',E14.7)
000986C 180  FORMAT(/,'BANDTEST',2X,'IGMCUT=',I6,2X,'INPL=',I6,2X,
0009870 F'DX=',F8.6,2X,'KAPPA=',F9.6,2X,'KABOTE=',F6.4)
CCC988C 19C  FCRMAT(2CI3)
0009890  END
0009900 C
CCC991C C
0009920 C
0009930 C  ENDE DES HAUPTPROGRAMMS
CCC994C C
0009950 C
0009960 C
CCC997C  SUBROUTINE KREIS1(IE)
0009980 C
0009990 C  DIENT ZUR BERECHNUNG DER PHI-INTEGRATION, WENN HCICAL=.TRUE.
CC1000C C
001001C  COMMON/CONMKRE/RE(60,60),AIM(60,60),RER(60),AIMR(60)
CC1002C  *,FRE(60,60),FRER(60)
CC1003C  FI=1.
001004C  IEM=IE-1
CC1005C  DO 10 I=2,IEM
001006C  S1=RE(I,1)+RE(1,I)
001007C  S2=AIM(1,I)
CC1008C  S3=FRE(I,1)+FRE(1,I)
001009C  M=INT(1.6*FI)
CC1010C  FMI=1./(M+1)
CC1011C  PM=1.57079633*FMI
001012C  FN=1.
CC1013C  DO 20 N=1,M
001014C  PHI=FN*PM
001015C  C=COS(PHI)
CC1016C  X=FI*C
001017C  S=SIN(PHI)
001018C  Y=FI*S
CC1019C  CX=X+C.66
001020C  CY=Y+0.66
CC1021C  NX=INT(CX)
001022C  NY=INT(CY)
001023C  P=X-NX
CC1024C  Q=Y-NY
001025C  NX=NX+1

```

```

0010260      NY=NY+1
0010270      NXP=NX+1
0010280      NXP=NX-1
0010290      NYF=NY+1
0010300      NYM=NY-1
0010310      NXP=NX+1
0010320      PP=P*P
0010330      QQ=Q*Q
0010340      PQ=P*Q
0010350      A1=2.*(1.+PQ-PP-QQ)
0010360      A2=2.*PQ
0010370      A3=QQ+Q
0010380      A4=QQ-A2-Q
0010390      A5=PP+P
0010400      A6=PP-A2-P
0010410      S1=S1+A1*RE(NX,NY)
0010420      S1=S1+A2*RE(NXM,NYM)
0010430      S1=S1+A3*RE(NX,NYP)+A4*RE(NX,NYM)
0010440      S1=S1+A5*RE(NXP,NY)+A6*RE(NXM,NY)
0010450      SS2=A1*AIM(NX,NY)+A2*AIM(NXM,NYM)
0010460      SS2=SS2+A3*AIM(NX,NYP)+A4*AIM(NX,NYM)
0010470      SS2=SS2+A5*AIM(NXP,NY)+A6*AIM(NXM,NY)
0010480      S2=S2+S*SS2
0010490      S3=S3+A1*FRE(NX,NY)
0010500      S3=S3+A2*FRE(NXM,NYM)
0010510      S3=S3+A3*FRE(NX,NYP)+A4*FRE(NX,NYM)
0010520      S3=S3+A5*FRE(NXP,NY)+A6*FRE(NXM,NY)
0010530  20  FN=FN+1.
0010540      RER(I)=0.25*FMI*S1
0010550      AIMR(I)=-0.5*FMI*S2
0010560      FRER(I)=0.5*FMI*S3
0010570  10  FI=FI+1.
0010580      RER(1)=RE(1,1)*0.5
0010590      AIMR(1)=-AIM(1,1)*0.6366198
0010600      FRER(1)=FRE(1,1)
0010610      RETURN
0010620      END
0010630 C
0010640 C ENDE DER SUBRCUTINE KREIS1
0010650 C
0010660      SUBRCUTINE KREIS(IE)
0010670      COMMON/CCPKRE/RE(60,60),AIM(60,60),RER(60),AIMR(60)
0010680 C
0010690 C DIENST ZUR BERECHNUNG DER PHI-INTEGRATION, WENN HCICAL=.FALSE.
0010700 C
0010710      FI=1.
0010720      IEM=IE-1
0010730      DO 10 I=2,IEM
0010740      S1=RE(I,1)+RE(1,I)
0010750      S2=AIM(1,I)
0010760      M=INT(1.6*FI)
0010770      FMI=1./(M+1)
0010780      FP=1.57079633*FMI
0010790      FN=1.

```

```

0010800      DC 20 N=1,M
0010810      PI=FN*PM
0010820      C=CCS(PI)
0010830      X=FI*C
0010840      S=SIN(PI)
0010850      Y=FI*S
0010860      CX=X+C.66
0010870      CY=Y+0.66
0010880      NX=INT(CX)
0010890      NY=INT(CY)
0010900      F=X-NX
0010910      Q=Y-NY
0010920      NX=NX+1
0010930      NY=NY+1
0010940      NXP=NX+1
0010950      NYM=NY-1
0010960      NYF=NY+1
0010970      NYM=NY-1
0010980      NXF=NX+1
0010990      PP=P*P
0011000      QQ=Q*Q
0011010      PC=P*Q
0011020      A1=2.*(1.+FQ-PP-QQ)
0011030      A2=2.*PQ
0011040      A3=CC+C
0011050      A4=QQ-A2-Q
0011060      A5=PP+P
0011070      A6=PP-A2-F
0011080      S1=S1+A1*RE(NX,NY)
0011090      S1=S1+A2*RE(NXM,NYM)
0011100      S1=S1+A3*RE(NX,NYP)+A4*RE(NX,NYM)
0011110      S1=S1+A5*RE(NXP,NY)+A6*RE(NXM,NY)
0011120      SS2=A1*AIM(NX,NY)+A2*AIM(NXP,NYM)
0011130      SS2=SS2+A3*AIM(NX,NYP)+A4*AIM(NX,NYM)
0011140      SS2=SS2+A5*AIM(NXP,NY)+A6*AIM(NXM,NY)
0011150      S2=S2+S*SS2
0011160 20    FN=FN+1.
0011170      RER(I)=0.25*FMI*S1
0011180      AIMR(I)=-C.5*FMI*S2
0011190 10    FI=FI+1.
0011200      RER(1)=RE(1,1)*0.5
0011210      AIMR(1)=-AIM(1,1)*C.6366198
0011220      RETURN
0011230 C
0011240 C ENDE SUBROUTINE KREIS
0011250 C
0011260      END
0011270      REAL FUNCTION ARABS(R,RMAX,BET)
0011280 C
0011290 C STARTLOESUNG FLER VEKPT
0011300 C
0011310      RR=R*R
0011320      R1=2.*RMAX-R
0011330      EX=EXP(-BET*RMAX)

```



```

0011340      EXX=EX*EX
0011350      H0=1./(3.*(1.-EX)/(BET*BET)-RMAX*EX*(RMAX+3./BET))
0011360      EX1=EXP(-BET*R)
0011370      EX2=EXP(-BET*R1)
0011380      QQ1=3.*(1.-EX1)/(BET*BET)-(R+3./BET)*R*EX1
0011390      QQ2=(2.*RMAX+3./BET)
0011400      QQ2=QQ2*((EXX-EX2)/BET+R*EX2-((EXX-EX)/BET+RMAX*EX)*RR/(RMAX**2))
0011410      C3=RR*(EX-EX2)
0011420      ARABS=-1.+H0*(CC1+CC2+C3)
0011430      RETURN
0011440      END
0011450 C
0011460 C ENDE ARABS
0011470 C
0011480      SUBROUTINE SC1(RMAX,ID,ORDPAR,RER,VEKPCT,IMR,FELD)
0011490 C      *****GL APPROXIMATION: APO=T*T *****
0011500      REAL P(62),RER(60),G(62),IMR(60),FELD(60),PI(62),CI(62)
0011510      DIMENSION ORDPAR(60),VEKPCT(60),PIS(60),PSC(65)
0011520 C
0011530 C AUFLÖSUNG DER SELBSTKONSISTENZGLEICHUNG
0011540 C
0011550      PEAL KAPPA,LT
0011560      LOGICAL ALS,GILAT
0011570      COMMON/PARAM/KAPPA,T,IMC
0011580      COMMON/LCC/GILAT
0011590      APO=1.
0011600      IF(GILAT) APC=T*T
0011610      IF(T.LT.0.6) APC=2.
0011620      IF(T.LT.0.4) APO=6.
0011630      CMEGA=C.5
0011640      K1=300
0011650      QUT=1.E2
0011660      EPSCM=1.E-1
0011670      EPS=2.E-6
0011680      DX=RMAX/ID
0011690      DXI1=1./(12.*DX*DX)
0011700      DXI2=30.*DXI1
0011710      ZETA3=1.2020569
0011720      AA=(1./(2.*IMC+1.))-C.25/(IMC+1.)/IMC
0011730      IE=ID+1
0011740      IE1=IE+1
0011750      IE2=IE1+1
0011760      IML=2*IMC-1
0011770      DIML=IML
0011780      LT=ALOG(T)
0011790      A1=12.*APC/(7.*ZETA3)
0011800      A2=2.*T*A1
0011810      A3=1.-A1*AA/(6.*T*T)
0011820      A4=1.5/((KAPPA**2)*APC)
0011830      A5=DX*36.*T/(7.*ZETA3*KAPPA*KAPPA)
0011840      A6=A4*A3
0011850      A7=AA/(6*T*T)
0011860      A8=AA/4.
0011870      DO 10 I=2,IE1

```

```

0011880      IF(GILAT) RER(I)=0.
0011890      IF(GILAT) IMR(I)=0.
0011900      P(I)=ORDPAR(I-1)
0011910 10      Q(I)=VEKPCT(I-1)
0011920      IF(GILAT) IMR(I)=0.
0011930      IF(GILAT) RER(I)=0.
0011940      P(I)=-P(I)
0011950      P(IE2)=P(IE)
0011960      Q(I)=Q(I)
0011970      C(IE2)=2.*C(IE1)-Q(IE)
0011980      WRITE(6,50) DIML,A1,A2,A3,A4,A5,A6,A7
0011990 C      IF(NN.EQ.0) GOTO 121
0012000 C
0012010 C      BESETZUNG DER INHOMOGENITAETEN
0012020 C
0012030      RI=0.
0012040      DO 11 I=3,IE
0012050      RI=RI+1.
0012060      H1=P(I)
0012070      H2=P(I+1)
0012080      H3=P(I-1)
0012090      H4=P(I+2)
0012100      H5=P(I-2)
0012110      H6=C(I)
0012120      H7=H6/(DX*RI)
0012130      H7=H7*H7
0012140      PS=DXI1*((-H4+H5+8.*(H2-H3))/RI-H4-H5+16.*(H2+H3)-30.*H1)-H7*H1
0012150      PI(I)=A2*RER(I-1)-A3*PS
0012160      IF(GILAT) FI(I)=0.
0012170      PIS(I-1)=2.*T*RER(I-1)+A7*PS
0012180      QI(I)=A5*RI*IMR(I-1)+A6*H1*H1*H6
0012190      IF(GILAT) CI(I)=0.
0012200 11      CONTINUE
0012210 121      K=0
0012220 C
0012230 C      BERECHNUNG DES FLUSSES Q(I)
0012240 C
0012250 44      K=K+1
0012260      QUS=0.
0012270      ANCR=0.
0012280      RI=0.
0012290      DO 12 I=3,IE
0012300      RI=RI+1.
0012310      H1=Q(I)
0012320      H2=Q(I+1)
0012330      H3=Q(I-1)
0012340      H4=Q(I+2)
0012350      H5=Q(I-2)
0012360      H6=P(I)*P(I)
0012370      QS=DXI1*((H4-H5-8.*(H2-H3))/RI-H4-H5+16.*(H2+H3)-30.*H1)
0012380      CS=QS-A4*H6*H1+QI(I)
0012390      Q(I)=H1+CEGA*CS/(CXI2+A4*H6)
0012400      H1=H1-Q(I)
0012410      CUS=QUS+H1*H1

```

```

0012420 12 ANOR=ANOR+Q(I)*Q(I)
0012430 Q(1)=C(3)
0012440 Q(IE2)=2.*Q(IE1)-Q(IE)
0012450 C
0012460 C BERECHNUNG DES CRDUNUNGSPARAMETERS P(I)
0012470 RI=0.
0012480 DC 13 I=3,IE
0012490 RI=RI+1.
0012500 H1=P(I)
0012510 H2=P(I+1)
0012520 H3=P(I-1)
0012530 H4=P(I+2)
0012540 H5=P(I-2)
0012550 H6=Q(I)
0012560 F7=H6/(CX*RI)
0012570 H7=H7*H7
0012580 P1=(H1/T)**2
0012590 BCS1=0.
0012600 BCS2=C.
0012610 AEA=DIML
0012620 DC 14 L=1,IML,2
0012630 B2=1./SQRT(ABA*ABA+B1)
0012640 B22=B2*B2
0012650 B3=B22*B2
0012660 BCS1=BCS1+B22/(ABA*(ABA*B2+1.))
0012670 AEA=AEA-2.
0012680 14 BCS2=BCS2+B3
0012690 BCS2=B1*(BCS1+2.*(BCS2+A8))
0012700 BCS1=B1*(BCS1*2.+A8)
0012710 PS=DXI1*((-H4+H5+8.*(H2-H3))/RI-H4-H5+16.*(H2+H3)-30.*H1)
0012720 PS=PS-H1*(F7+A1*(LT+BCS1))+P1(I)
0012730 PSS=DXI2+H7+A1*(LT+BCS2)
0012740 P(I)=F1+OMEGA*PS/PSS
0012750 H1=H1-P(I)
0012760 QLS=QLS+H1*H1
0012770 13 ANOR=ANOR+P(I)*P(I)
0012780 P(IE1)=0.1*(15.*P(IE)-6.*F(ID)+P(ID-1))
0012790 P(1)=-P(3)
0012800 P(IE2)=P(IE)
0012810 C
0012820 C OMEGA STRATEGIE UND ALSSTEIGELOGIK
0012830 C
0012840 CM=SQRT(QLS/QLT)
0012850 QUT=QUS
0012860 CP=(OM+OMEGA-1.)/(OMEGA*SCRT(CM))
0012870 CM=1.-OM*CM
0012880 IF(CM.LT.0.) GOTO 22
0012890 CP=2./(1.+SCRT(CM))
0012900 IF(K.LE.K1) GOTO 33
0012910 IF(ABS(CM-CM1).GE.EPSOM) GOTO 33
0012920 OMEGA=AMIN1(CM,0.5)
0012930 EPSOM=EPSOM*3.E-1
0012940 33 CM1=CP
0012950 22 ABST=SQRT(QLS/ANCR)

```

```

0012960      IF(K.GT.1500) GOTO 55
0012970      IF(ABST.GT.C.1) GOTO 66
0012980      IF(ABST.GT.EPS) GOTO 44
0012990 55    RI=0.
0013000        DO 15 I=3,IE
0013010        RI=RI+1.
0013020 15    FELC(I-1)=DXII*(C(I-2)-Q(I+2)+8.*(Q(I+1)-Q(I-1)))/RI
0013030        FELC(1)=0.1*(15.*FELD(2)-6.*FELD(3)+FELD(4))
0013040        FELC(IE)=0.1*(15.*FELD(ID)-6.*FELD(ID-1)+FELD(ID-2))
0013050 C      *****
0013060 C      BERECHNUNG DES SC-FEHLERS
0013070        H1=0.
0013080        H2=0.
0013090        DO 17 I=2, ID
0013100        B1=(P(I+1)/I)**2
0013110        BCS=0.
0013120        ABA=DI*ML
0013130        DO 18 L=1,IML,2
0013140        B2=1./SQRT(ABA*ABA+B1)
0013150        B22=B2*B2
0013160        BCS=BCS+B22/(ABA*(ABA*B2+1.))
0013170 18    ABA=ABA-2
0013180        BCS=B1*(BCS*2+ABA)
0013190        H2=P(I+1)*(LT+BCS)-PIS(I)
0013200        PSC(I)=H2
0013210 17    H1=H1+H2*H2
0013220        H1=SQRT(H1)/ID
0013230        WRITE (6,30) K,ABST,CMEGA,H1
0013240        WRITE(6,60) APC
0013250        WRITE(6,70) (PSC(I),I=2, ID)
0013260        GOTO 77
0013270 66    WRITE(6,30) K,ABST,CMEGA,H1
0013280        WRITE(6,40)
0013290        WRITE(6,50) (P(I+1),RER(I),C(I+1),IMR(I),I=1,IE)
0013300        STOP
0013310 77    CCNTINUE
0013320        DO 16 I=1,IE
0013330        ORDPAR(I)=P(I+1)
0013340 16    VEKPGT(I)=C(I+1)
0013350        RETURN
0013360 30    FORMAT(2X,'SC-GLEICH.(SOR):ZAHL DER ITERATIONEN=',I8,
0013370        F5X,'ABST= ',E12.4,' CMEGA= ',E12.4,' SC-FEHLER=',E12.4)
0013380 40    FORMAT(12X,'ORDPAR',14X,'RER',17X,'VEKPGT',14X,'IMR' /)
0013390 50    FORMAT(4F20.8)
0013400 60    FORMAT(2X,'APC= ',F14.6)
0013410 70    FORMAT(10(2X,F10.6))
0013420        END
0013430 C
0013440 C
0013450 C      ENDE SUBROUTINE SC1
0013460 C
0013470 C
0013480      REAL FUNCTION DELTAS(R,RMAX,ALPH,ABCS)
0013490 C

```

```

0013500 C BERECHNUNG DER STARTLOESUNG FUER ORDPAR
0013510 C
0013520      R1=2.*RMAX-R
0013530      EX1=EXP(2.*ALPH*R)
0013540      EX2=EXP(2.*ALPH*R1)
0013550      DELTAS=ABCS*(1.-2./(1.+EX1))*(1.-2./(1.+EX2))
0013560      RETURN
0013570      END
0013580 C
0013590 C ENDE DELTAS
0013600 C
0013610      REAL FUNCTION DELSQL(T)
0013620 C
0013630 C BERECHNET DAS QUADRAT DES PCS-LUECKENPARAMETERS
0013640 C
0013650      REAL LT,KAPPA
0013660      COMMON/PARAM/KAPPA,TT,IMC
0013670      IML=2*IMC-1
0013680      DIMC=FLCAT(IMC)
0013690      LT=ALOG(T)
0013700      A6=(2.*DIMC+3.)/((DIMC+1.)*(2.*DIMC+1.)*DIMC*16.)
0013710      PP=0.2
0013720      DO 13 I=1,200
0013730          BCS1=0.
0013740          BCS2=0.
0013750          ABA=IML
0013760          DO 14 L=1,IML,2
0013770              B2=1./SQRT(AEA*ABA+PP)
0013780              B22=B2*B2
0013790              B3=B22*B2
0013800              BCS1=BCS1+B22/(ABA*(ABA*B2+1.))
0013810              AEA=ABA-2.
0013820 14      BCS2=BCS2+B3
0013830              BCS1=PP*(BCS1*2.+A6)+LT
0013840              BCS2=BCS1/(2.+(BCS2+A6))
0013850              PP=PP-BCS2
0013860              BCS2=ABS(BCS2/PP)
0013870              IF(BCS2.LT.1.E-5) GOTO 33
0013880 13      CONTINUE
0013890 C          GOTO 22
0013900 33      DELSQU=PP*T*T
0013910 22      RETURN
0013920      END
0013930 C
0013940 C ENDE DELSQU
0013950 C
0013960      SUBROUTINE SPLINR (IFA,X,Z,A,T,SS,SS1,SS2,M,TEGER,SUMY,S2,S3,
0013970 C
0013980 C SPLINE INTERPOLATIONSPROGRAMM
0013990 C
0014000      FINTAB)
0014010      IMPLICIT REAL * 8 (A-H,C-Z)
0014020      REAL X,Z,T,TEGER,SS,SS1,SS2,SUMY
0014030      REAL ABS

```

```

0014040      LOGICAL INTAB
0014050C     DIMENSION S2(N),S3(N)
0014060C     DIMENSION DELY(150),B(150),DELSQY(150),H2(150),C(150),H(150)
0014070      DIMENSION Y(150)
0014080C     DIMENSION TEGER(N)
0014090C     DIMENSION X(N),Z(N),T(M),SS(M),SS1(M),SS2(M)
0014100CC
0014110C 600 FORMAT(/1X,65('+-')//10X,'SPLINE INTERPOLATION WAS TRUNCATED AFTE
0014120C 1',I6,' ITERATIONS WITH ETA =' ,D12.4,' (PRESET EPSILCN =' ,D12.4,
0014130C 2')'//1X,65('+-')/)
0014140CC
0014150CC
0014160C      LEND=100
0014170C      LCCUNT=C
0014180      EPSLN=0.1D-8
0014190C      SUMY=0.
0014200C      DO 1 I=1,N
0014210C 1 SUMY=SUMY+ABS(Z(I))
0014220C      DO 11 I=1,N
0014230C 11 Y(I)=Z(I)/SUMY
0014240C 2 N1=N-1
0014250C 3 DO 51 I=1,N1
0014260C      H(I)=X(I+1)-X(I)
0014270C 51 DELY(I)=(Y(I+1)-Y(I))/H(I)
0014280      IF(IFA.GT.1) GO TO 100
0014290C 4 DO 52 I=2,N1
0014300C      H2(I)=H(I-1)+H(I)
0014310C      B(I)=0.5DC*H(I-1)/H2(I)
0014320C      DELSQY(I)=(DELY(I)-DELY(I-1))/H2(I)
0014330C      S2(I)=2.0C*DELSQY(I)
0014340 52 C(I)=3.0C*DELSQY(I)
0014350C      S2(1)=0.00
0014360C      S2(N)=C.0C
0014370C      OMEGA=1.0717968DC
0014380C 5 LCCUNT=LCCUNT+1
0014390C      IF (LCCUNT .GT. LEND) GO TO 14
0014400C      ETA=0.00
0014410C 6 DO 10 I=2,N1
0014420C 7 W=(C(I)-B(I)*S2(I-1)-(0.5DC-B(I))*S2(I+1)-S2(I))*OMEGA
0014430C 8 IF (DABS(W) - ETA) 10,10,9
0014440C 9 ETA=DABS(W)
0014450C 10 S2(I)=S2(I)+W
0014460C 13 IF (ETA - EPSLN) 14,5,5
0014470C 14 DO 53 I=1,N1
0014480C 53 S3(I)=(S2(I+1)-S2(I))/H(I)
0014490 100 CCNTINUE
0014500C 15 DO 61 J=1,M
0014510C 16 I=1
0014520C 54 IF (T(J) - X(1)) 58,17,55
0014530C 55 IF (T(J) - X(N)) 57,59,58
0014540C 56 IF (T(J) - X(I)) 60,17,57
0014550C 57 I=I+1
0014560C      GO TO 56
0014570C 58 WRITE (6,6000) J

```

```

0014580C 6000 FORMAT(1X,I4,' THE ARGUMENT T(J) OUT OF RANGE')
0014590C GO TO 61
0014600C 59 I=N
0014610C 60 I=I-1
0014620C 17 HT1=T(J)-X(I)
0014630C HT2=T(J)-X(I+1)
0014640C PRCD=HT1*HT2
0014650C SS2(J)=S2(I)+HT1*S3(I)
0014660C DELSQS=(S2(I)+S2(I+1)+SS2(J))/6.00
0014670C SS(J)=Y(I)+HT1*DELY(I)+PRCD*DELSQS
0014680C SS1(J)=DELY(I)+(HT1+HT2)*DELSQS+PROD*S3(I)/6.00
0014690C 61 CONTINUE
0014700C IF(.NOT.INTAB) GOTO 64
0014710C 20 PROXIN=0.
0014720C DO 62 I=1,N1
0014730C IL=I+1
0014740C PRCXIN=PRCXIN+C.5*(I)*(Y(I)+Y(I+1))-H(I)**3*(S2(I)+S2(I+1))/24.
0014750C 62 TEGER(IL)=PRCXIN*SUMY
0014760C TEGER(I)=C.
0014770C 64 CONTINUE
0014780C DO 63 J=1,M
0014790C SS(J)=SS(J)*SUMY
0014800C SS1(J)=SS1(J)*SUMY
0014810C 63 SS2(J)=SS2(J)*SUMY
0014820C IF (LCCUNT .GT. LEND) WRITE (6,600) LEND,ETA,EPSLN
0014830C RETURN
0014840C END
0014850C
0014860C ENDE SPLINR
0014870C
0014880C SUBROUTINE CMSUM(CM,GF)
0014890C
0014900C INTERPOLIERT BEI GROSSEM IOMCUT DIE OM-SUMME
0014910C REAL CM(10),GF(10)
0014920C COMMON/PARAM/CAPPA,T,IMC
0014930C IMC=INT(0.5*(1.+5./T))
0014940C IMC1=IMC-1
0014950C IML=2*IMC-1
0014960C DO 1 I=1,10
0014970C GF(I)=1.
0014980C 1 CM(I)=T*(2.*I-1.)
0014990C IF(IMC.LE.10) GOTO 11
0015000C CM(10)=T*IML
0015010C LL=0
0015020C 22 LL=LL+1
0015030C H1=1./(10.-LL)
0015040C ALPH=(IML/(2.*LL-1.))**H1
0015050C BET=(2.*LL+1.)/(2.*LL-1.)
0015060C IF(BET.GT.ALPH) GOTO 22
0015070C IF(LL.LE.2) GOTO 33
0015080C LL1=LL+1
0015090C DO 2 I=LL1,9
0015100C GF(I)=C.
0015110C 2 CM(I)=ALPH*CM(I-1)

```

```

0015120      H=ALOG(ALPH)
0015130      SLL=2.*LL-1.
0015140      DO 3 I=LL1,IMC1
0015150      SI=2.*I-1.
0015160      FIL=ALOG(SI/SLL)/H+LL
0015170      IF(FIL.LE.LL1) GOTO 44
0015180      IF(FIL.GE.9) GOTO 55
0015190      L=INT(FIL)
0015200      P=FIL-L
0015210      H1=P*P-1.
0015220      H2=P-2.
0015230      GF(L-1)=GF(L-1)-P*(P-1.)*H2/6.
0015240      GF(L)=GF(L)+H1*H2/2.
0015250      GF(L+1)=GF(L+1)-P*(P+1.)*H2/2.
0015260      GF(L+2)=GF(L+2)+P*H1/6.
0015270      GOTO 66
0015280 44      P=FIL-LL1
0015290      GF(LL)=GF(LL)+P*(P-1.)/2.
0015300      CF(LL1)=GF(LL1)+1.-P*P
0015310      GF(LL+2)=GF(LL+2)+P*(P+1.)/2.
0015320      GOTO 66
0015330 55      P=FIL-9
0015340      GF(8)=GF(8)+P*(P-1.)/2.
0015350      CF(9)=GF(9)+1.-P*P
0015360      GF(10)=GF(10)+P*(P+1)/2.
0015370 66      CONTINUE
0015380 3       CONTINUE
0015390      GOTO 11
0015400 33      WRITE(6,10)
0015410 10      FORMAT(5X,'MEGA SUMMATION: IMC ZU GROSS')
0015420      STOP
0015430 11      RETURN
0015440      END
0015450 C
0015460 C
0015470 C IM FOLGENDEN SIND DIE INPUT-CUPUT SPEZIFIKATIONEN:
0015480 C FT10 PRIVATE PLATTE,VON DER GELESEN WIRD
0015490 C FT11 PRIVATE PLATTE, AUF DIE GESCHRIEBEN WIRD
0015500 C FT12 TEMPORARE PLATTE
0015510 C FT15 PRIVATES BAND,AUF DAS GESCHRIEBEN WIRD(LSB=.TRUE.)
0015520 C FT14 PRIVATES BAND,VON DEM GELESEN WIRD (LS=.TRUE.)
0015530 C
0015540 /*
0015550 //G.FT10F001 DD DSN=USER.IFF053A1,DISP=OLD
0015560 //G.FT11F001 DD DSN=USER.IFF053A4,DISP=OLD
0015570 //G.FT12F001 DD UNIT=TEMP,DCB=(RECFM=F,BLKSIZE=3840),SPACE=(CYL,(9,1))
0015580 //G.FT15F001 DD DSN=KD54,LABEL=(54,SL),UNIT=3400-3,
0015590 // VOL=SER=TP2831,DISP=(OLD,KEEP),
0015600 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015610 //G.FT15F002 DD DSN=K913,LABEL=(13,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015620 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),
0015630 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015640 //G.FT15F003 DD DSN=K915,LABEL=(15,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015650 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),

```



```

0015660 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015670 //G.FT15F004 DD DSN=K99,LABEL=(9,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015680 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),
0015690 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015700 //G.FT15F005 DD DSN=K910,LABEL=(10,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015710 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),
0015720 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015730 //G.FT15F006 DD DSN=K913,LABEL=(13,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015740 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),
0015750 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015760 //G.FT15F007 DD DSN=K915,LABEL=(15,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015770 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),
0015780 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015790 //G.FT15F008 DD DSN=K913,LABEL=(13,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015800 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),
0015810 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015820 //G.FT15F009 DD DSN=K915,LABEL=(15,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015830 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),
0015840 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015850 //G.FT15F010 DD DSN=K913,LABEL=(13,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015860 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),
0015870 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015880 //G.FT15F011 DD DSN=K915,LABEL=(15,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015890 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),
0015900 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015910 //G.FT15F012 DD DSN=K915,LABEL=(15,SL),UNIT=AFF=FT15F001,
0015920 // VOL=SER=TP2831,DISP=(NEW,KEEP),
0015930 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015940 //G.FT14F001 DD DSN=K94,LABEL=(4,SL),UNIT=3400-3,
0015950 // VOL=SER=TP3075,DISP=(CLD,KEEP),
0015960 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0015970 //G.FT14F002 DD DSN=HC14,LABEL=(14,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0015980 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),
0015990 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016000 //G.FT14F003 DD DSN=HC4,LABEL=(4,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0016010 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),
0016020 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016030 //G.FT14F004 DD DSN=HC5,LABEL=(5,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0016040 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),
0016050 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016060 //G.FT14F005 DD DSN=HC6,LABEL=(6,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0016070 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),
0016080 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016090 //G.FT14F006 DD DSN=HC7,LABEL=(7,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0016100 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),
0016110 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016120 //G.FT14F007 DD DSN=HC8,LABEL=(8,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0016130 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),
0016140 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016150 //G.FT14F008 DD DSN=HC10,LABEL=(10,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0016160 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),
0016170 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016180 //G.FT14F009 DD DSN=HC12,LABEL=(12,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0016190 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),

```

```
0016200 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016210 //G.FT14F010 DD DSN=K21,LABEL=(21,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0016220 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),
0016230 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016240 //G.FT14F011 DD DSN=K20,LABEL=(20,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0016250 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),
0016260 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016270 //G.FT14F012 DD DSN=K21,LABEL=(21,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0016280 // VOL=SER=TP3075,DISP=(NEW,KEEP),
0016290 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=3844,BLKSIZE=3848,DEN=3)
0016300 //G.SYSIN DD *
0016310 29 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23
0016320 /*
```

```

0000010 //VIIFC54 JOB (612,023600,6,5C,9),KRAMER,CLASS=C
0000020 /*TAPE 1
0000030 // EXEC CCM,PARM='TP2878,9P'
0000040 // EXEC CLGFORTE,PARM.C='NGMAP,NOXREF',PARM.G=
0000050 //C.SYSIN DD *
0000100 DIMENSION ORCPAR(120),VEKPCT(120),DELVER(120),RER(120)
0000150 C SBM. USADNEU,NEUES GREEN,FELD IN NEUEN EINHEITEN
0000200 LCGICAL LS,LSB,NEU (Schmutziger Fall)
0000250 REAL IMR
0000300 DIMENSION IMR(120),VEKVER(120),FELD(120),Y(120),STEP(120)
0000350 DIMENSION YY(120,80),FRER(120)
0000400 COMMON/PARAM/CAPPA,CABOTE,IOMCUT,EPS
0000450 DEFINE FILE 10(48,17C,U,LB)
0000452 C
0000454 C
0000470 C DATEN TEIL
0000471 C
0000472 READ(5,200) INZA,RMAX,TSTEP
0000474 READ(5,200) ICABOT,CAPPA,CABOTE
0000476 C ICABOT=ANZAHL DER BERECHNETEN TEMPERATUREN
0000490 IBAND=1
0000510 EPZY=0.2E-4
0000530 EPS=1.E-5
0000550 KK=0
0000560 KN=0
0000590 MM=0
0000592 LS=.FALSE.
0000594 LSB=.FALSE.
0000596 C
0000598 C ENDE DATENTEIL
0000600 C
0000630 C2=1.9196173
0000640 FAKT1=1.
0000650 ITEMP=1
0000730 IF(LS) GOTO 666
0000740 INZ1=INZA-1
0000750 INPL=INZA+1
0000770 DX=RMAX/INZA
0000790 ICMCLT=INT(5./CABOTE)
0000810 IOMCUT=MIN0(ICMCLT,80)
0000830 BCS1=SQRT(DELSQU(CABOTE))
0000850 TB2=2.345E6/(BCS1*BCS1)
0000870 AMDA=C2*CAPPA/SQRT(BCS1*TANH(1.570796*BCS1/CABOTE))
0000890 C ERSTE BESETZUNG DER POTENTIALE
0000910 C
0000930 777 RI=0.
0000950 CC 1 I=2,INPL
0000970 RI=RI+DX
0000990 CALL BESK(RI/AMDA,1,BK,IER)
0001010 IF(IER.NE.0) WRITE (6,300) RI
0001030 BT=-BK/AMDA
0001050 VEKFC(I)=BT
0001070 ORCPAR(I)=BCS1/SQRT(1.+TB2*BT*BT)
0001090 1 CONTINUE

```

```

0001110      GOTO 111
0001130 666   CCNTINUE
0001135      KN=KN+1
0001150      READ(14) IDEN, INPL, IOMCUT, RMAX, CAPPA, CABOTE,
0001170      F=C1, (ORDPAR(K), VEK POT(K), K=1, INPL)
0001172      IF (KN.NE.IBAND) GOTO 666
0001190      INZA=INPL-1
0001210      BCS1=SCRT (DELSQU (CABOTE))
0001230      WRITE(6,450) (K,ORDPAR(K), VEK POT(K), K=1, INZA)
0001250      WRITE(6,450) IDEN
0001270 450   FCRMAT(3(2X, I5, 2F14.6))
0001290
0001310 1111  INZ1=INZA-1
0001315 C      IF (LS) GOTO 111
0001330      CAP2=5.788239*CAPPA*CAPPA
0001350      CAB2=2.*CABOTE
0001360      REAB(14,END=1111)
0001370      GOTO 1111
0004200 C
0004300 C      ERSTE BESETZUNG DER GREEN FUNKTIONEN UND
0004400 C      ZIELPUNKT DES TEMPERATURSPRUNGES
0004500 C
0004600 111   ORDPAR(1)=C.
0004602      CAB2=2.*CABOTE
0004605      VEK POT(1)=0.
0004610      CAP2=5.788239*CAPPA*CAPPA
0004620      IOMCUT=INT(5./CABOTE)
0004640      IOMCUT=MINO(IOMCUT,80)
0004650 C      RMAX=3.2
0004700      DX=RMAX/INZA
0004780      NEU=.FALSE.
0004800      OM=CABOTE*(2*IOMCUT+1)
0004900      A1=(2./(2.*IOMCUT+1.))-0.5/(IOMCUT+1)/(16.*IOMCUT*CABOTE**2)
0005000      A2=(2./(2.*IOMCUT+0.5))-0.5/(IOMCUT+0.5)/CABOTE
0005100      DO 8 IOD=1, IOMCUT
0005200      CM=CM-CAB2
0005300      ROOT=SQRT(BCS1*BCS1+CM*CM)
0005400      SIO=BCS1/ROOT
0005500      CGO=CM/ROOT
0005600      YASY=ATAN2(SIO,CGO)
0005700      COP=SIO*CGO/(BCS1*YASY)
0005750      YY(1,IOD)=C.
0005800      DO 8 LM=2, INPL
0005850      ORDT=ORDPAR(LM)
0005900      VEK2=VEK POT(LM)**2
0005950      YY(LM, IOD)=YASY/((1.+COP*(BCS1-ORDT))*SQRT(1.+2.*SIO*COP*VEK2))
0006200 8      CONTINUE
0006300 C
0006400 C      ANFANG DER GROSSEN ZYKLENN
0006500 C
0006600 100   DO 26 I=2, INZA
0006700      ORD1=ORDPAR(I)
0006800      D=(ORD1+BCS1)**2*(CRD1-BCS1)**2*A1+A2*(CRD1*VEK POT(I))**2
0006900      C=C+(((ORDPAR(I-1)-ORDPAR(I+1))/(2.*DX))**2)*A2

```

```

0007000 26 FRER(I)=0
0007005 MM=MM+1
0007010 IF(MM.EQ.20) GOTO 222
0007020 IF(MM.GT.2) NEU=.FALSE.
0007100 ORD1=ORDPAR(INPL)
0007200 FRER(INPL)=(ORD1+BCS1)**2*(CRD1-PCS1)**2
0007300 FRER(I)=0.
0007400 FRER(INPL)=0.
0007500 DO 3 I=1,INPL
0007600 RER(I)=0.
0007700 3 IMR(I)=0.
0007900 DO 5 J=1,INFL
0008000 DELVER(J)=ORDPAR(J)
0008100 VEKVER(J)=VEKPOT(J)
0008200 5 CONTINUE
0008300 C
0008400 C ANFANG DER CM-SCHLEIFE
0008500 C
0008600 CM=CABCTE*(2.*IGMCUT+1.)
0008700 DO 4 I=1,IGMCUT
0008800 CM=CM-CAB2
0008900 CM2=CM*CM
0009000 WUR1=SQRT(CM2+BCS1*BCS1)
0009100 DO 9 KK=1,INPL
0009200 9 Y(KK)=YY(KK,M)
0009300 IF(NEU) CALL GREEN(RMAX,INZA,ORDPAR,VEKPCT,CM,Y)
0009310 IF(.NOT.NEU) CALL GREENA(RMAX,INZA,ORDPAR,VEKPOT,CM,Y)
0009400 DO 12 IS=1,INPL
0009500 12 YY(IS,M)=Y(IS)
0009600 YF3=Y(2)
0009700 Y1=SIN(YF3)
0009800 Y2=ORDPAR(2)
0009900 YF1=-Y(2)
0010000 YF2=0.
0010100 YF4=Y(3)
0010200 YF5=Y(4)
0010300 Y(INPL+1)=Y(INZA)
0010400 IF(MM.EQ.1) GOTO 66
0010500 YC1=COS(YF3)
0010600 YS2=Y1*Y1
0010700 ABL=((YF1-YF5)*0.25+2.*(YF4-YF2))/(3.*DX)
0010800 AB=(Y2-BCS1)*(Y2+BCS1)
0010900 AB=AB/WUR1+2.*BCS1*BCS1/(CM+WUR1)-2.*Y2*Y1
0011000 AE=AB+VEKPOT(2)*VEKPOT(2)*YS2+2.*CM*YS2/(YC1+1.)+ABL*ABL
0011100 FRER(2)=FRER(2)+AB*2.*CABCTE
0011200 66 WUR2=SQRT(CM2+Y2*Y2)
0011300 IMR(2)=IMR(2)+Y1*Y1
0011400 RER(2)=RER(2)+Y1-Y2/WUR2
0011500 DO 6 I=3,INZA
0011600 Y2=ORDPAR(I)
0011700 WUR2=SQRT(CM2+Y2*Y2)
0011800 YF1=YF2
0011900 YF2=YF3
0012000 YF3=YF4

```

```

0012100      YF4=YF5
0012200      YF5=Y(I+2)
0012300      Y1=SIN(YF3)
0012400      IF(MM.EQ.1) GOTO 333
0012500      YC1=CCS(YF3)
0012600      YS2=Y1*Y1
0012700      ABL=((YF1-YF5)*0.25+2.*(YF4-YF2))/(3.*DX)
0012800      AB=(Y2-BCS1)*(Y2+BCS1)
0012900      AB=AB/WUR1+2.*BCS1*BCS1/(CM+WUR1)-2.*Y2*Y1
0013000      AB=AB+VEKPOT(I)*VEKPOT(I)*YS2+2.*OM*YS2/(YC1+1.)+ABL*ABL
0013100      FRER(I)=FRER(I)+AB*2.*CABCTE
0013200 333  CONTINUE
0013300      IMR(I)=IMR(I)+Y1*Y1
0013400      RER(I)=RER(I)+Y1-Y2/WUR2
0013500 6  CONTINUE
0013600      Y1=SIN(Y(INPL))
0013700      Y2=ORDPAR(INPL)
0013800      IMR(INPL)=IMR(INPL)+Y1*Y1
0013900      RER(INPL)=RER(INPL)+Y1-Y2/(SQRT(OM2+Y2*Y2))
0014000      IF(MM.EQ.1) GOTO 4
0014100      AB=(Y2-BCS1)*(Y2+BCS1)
0014200      AB=AB/WUR1+2.*BCS1*BCS1/(CM+WUR1)-2.*Y2*Y1
0014300      AB=AB+2.*OM*Y1*Y1/(COS(Y(INPL))+1.)
0014400      FRER(INPL)=FRER(INPL)+AB*2.*CABOTE
0014500 4  CONTINUE
0014600 C
0014700 C      ENDE DER CMEGA SCHLEIFE
0014800 C
0014900      IF(MM.EQ.1) GOTO 444
0015000      SUM1=0
0015100      SUM2=0
0015200      DC 21 K=2, INZA, 2
0015300 21  SUM1=SUM1+(FRER(K)+3.9788763E-2*FELD(K)*FELD(K))*(K-1)
0015400      DO 23 J=3, INZ1, 2
0015500 23  SUM2=SUM2+(FRER(J)+3.9788763E-2*FELD(J)*FELD(J))*(J-1)
0015600      ENERGY=2.*SUM2+INZA*(FRER(INPL)+3.9788763E-2*FELD(INPL)**2)
0015700      HC1=(ENERGY+4.*SUM1)*DX*DX*0.347293/CAPPA
0015800 444  CCNTINUE
0015900      IF(NEU) CALL SC1(RMAX, INZA, ORDPAR, RER, VEKPOT, IMR, FELD)
0015910      IF(.NOT.NEU) CALL SC1A(RMAX, INZA, ORDPAR, RER,
0015920 1VEKPCT, IMR, FELD)
0016000      ANORM1=0.
0016100      DO 7 I=1, INPL
0016200      ANORM1=ANORM1+ABS(ORDPAR(I)-DELVER(I))+ABS(VEKPCT(I)-VEKVER(I))
0016300 7  CONTINUE
0016400      ANORM1=ANORM1/INZA
0016500      IF(ANORM1.GT.EPZY.GR.MM.LE.1) GOTO 100
0016505      DAN=0.
0016510      DC 27 K=2, INPL
0016515      DAN=DAN+DX
0016520      STEP(K)=DAN
0016525 27  VEKVER(K)=DAN*VEKPCT(K)
0016530      VEKVER(1)=-1.
0016535      STEP(1)=0.

```

```

0016540      VEKPOT(1)=0.
0016545      AMDA=C2*CAPPA/SQRT(BCS1*TANH(1.570796*BCS1/CABOTE))
0016550      WRITE(6,850) MM,CAPPA,CABOTE,IBAND,RMAX
0016560      WRITE(6,550)
0016561      CALL K1HC(AK1,HCK)
0016564      RHC2=4.129903/SQRT(AK1*HCK)
0016700      WRITE(6,500) (STEP(IK),ORDPAR(IK),VEKVER(IK),VEKPOT(IK),
0016710      FFELD(IK),RER(IK),IMR(IK),IK=1,INPL)
0016715      WRITE(6,350) HC1,BCS1,ANORM1,AMDA,HCK,AK1,RHC2
0016720      IF(LSB) WRITE(14) IBAND,INPL,ICMCUT,RMAX,CAPPA,CABOTE,
0016730      FHC1,(ORDPAR(K),VEKPOT(K),K=1,INPL)
0016735      ITEMP=ITEMP+1
0016738      IBAND=IBAND+1
0016740      IF(ITEMP.GT.ICABOT) GOTO 222
0016800      P1=1.-CABOTE
0016950      CABOTE=CABOTE-7*STEP
0016960      IOMCUT=INT(5./CABOTE)
0016970      ICMCUT=MINO(ICMCUT,80)
0017000      CAB2=2.*CABOTE
0017100      BCS2=SQRT(DELSQU(CABOTE))
0017200      FAKT=BCS2/BCS1
0017300      BCS1=BCS2
0017400      FAKT1=SQRT(P1/(1.-CABOTE))
0017500      RMAX=RMAX*FAKT1
0017600      DO 14 I=1,INPL
0017700      ORDPAR(I)=ORDPAR(I)*FAKT
0017800 14  VEKPOT(I)=VEKPOT(I)/FAKT1
0017900      PP=0
0017920      NEU=.TRUE.
0018000      GOTO 111
0018010 222  CONTINUE
0018050      IF(LSB) ENDFILE 14
0018100      STOP
0018200 200  FORMAT(I10,2F10.0)
0018300 300  FORMAT(2X,'DIE BESSELFUNCTION DIVERGIERT',F14.6)
0018400 700  FORMAT(10(F10.6))
0018410 850  FORMAT(/2X,'VERFAHREN KONVERGIERT NACH',I3,2X,'ITERATIONEN ',
0018420      F'(KAPPA=',F7.4,2X,'TEMPERATUR=',F5.2,2X,'IBAND=',I10,2X,
0018430      F'INTERVALLAENGE=',F9.6,')')
0018440 350  FORMAT(/1X,'HC1=',E12.5,2X,'BCS=',E12.5,2X,
0018445      F'EPZY=',E12.5,2X,'LAMDA=',E12.6,2X,
0018446      F'HC=',E12.5,2X,'AK1=',E12.6,2X,'RHC2=',E12.6)
0018500 600  FORMAT(2X,2I10,6E14.6)
0018550 500  FORMAT( 7(2X,F15.8))
0018560 550  FORMAT( 6X,'RADIUS',5X,'ORDPAR',5X,'FLUSS(PHI)',
0018570      F6X,'VEKPOT',6X,'RER',6X,'IMR')
0018600      END
0018602      FUNCTION PSI(Y)
0018604      Z=Y
0018606      D=0.
0018608      Z=Z+.5
0018610 1  IF(Z-8.)2,2,3
0018612 2  D=D-1./Z
0018614 2  Z=Z+1.

```

```

0018616      GCTC1
0018618      3      X=1./(Z-.5)
0018620      Z=X**2
0018622      PSI=D-ALOG(X)+((31./8064.*Z-7./960.)*Z+1./24.)*Z
0018624      RETURN
0018626      END
0018700      SUBROUTINE GREEN(RMAX,ID,DEPAR,APOT,OM,YY)
0018800      GENERIC
0018900      CCMGN/PARAM/CAPPA,CABOTE,IDC,EPS
0019000      INTEGER NARZA(100)
0019100      REAL DX,DX1,DX12,RI,YY(120)
0019200      REAL*8 H1,H2,H3,E(120),D(120),Y(120),Z,C(120),OMEGA
0019300      REAL*8 ORDPAR(120),VEKPOT(120),A(120),EINS,ZWEI,DX2
0019350      REAL*8 H4,H5,H6
0019400      REAL DEPAR(120),APCT(120)
0019450      LDIVER=0
0019460      IN=INT(0.5*(CM/CABOTE-1.))+1.1)
0019500      OMEGA=1.
0019520      IF(IN.EQ.1.AND.CABOTE.LT.0.1) OMEGA=0.5
0019550      1000      CONTINUE
0019600      EPD=1.E-6
0019700      KMAX=20
0019800      IN=INT(0.5*(CM/CABOTE-1.))+1.1)
0019900      DX=RMAX/ID
0020000      DX2=DX*DX
0020100      DX1=1.D0/DX
0020200      EINS=1.D0
0020300      ZWEI=2.D0
0020400      IE=ID+1
0020500      IE1=ID-1
0020600      DO 9 I=1,IE
0020700      ORDPAR(I)=DEPAR(I)
0020800      VEKPCT(I)=APOT(I)**2
0020900      9      Y(I)=YY(I)
0021000      C
0021100      C      ANFANGSBESETZUNG
0021200      C
0021300      K=0
0021400      44      K=K+1
0021500      ANORM=C.
0021700      DO 12 I=2,IE
0021720      H1=0.500/FLCAT(I-1)
0021750      H4=Y(I)
0021760      H5=ORDPAR(I)
0021770      H6=VEKPCT(I)
0021800      A(I)=H1-1.D0
0021900      C(I)=-H1-1.D0
0022000      H1=SIN(H4)
0022100      H2=COS(H4)
0022200      H3=H5*H1+CM*H2+H6*(EINS-ZWEI*H1*H1)
0022300      B(I)=ZWEI+H3*DX2
0022400      D(I)=(-H6*H1*H2+H5*H2-CM*H1+H4*H3)*DX2
0022600      12      CONTINUE
0022700      A(IE)=-ZWEI

```



```

0022800 C
0022900 C    UMSPEICHERUNG
0023000 C
0023050      H3=B(2)
0023100      DO 13 I=3, ID
0023200      E(I)=H3*B(I)-C(I-1)*A(I)
0023300      C(I)=H3*C(I)
0023400      D(I)=H3*D(I)-D(I-1)*A(I)
0023450      H3=E(I)
0023500 13    CCNTINUE
0023600 C
0023700 C    AUFLÖSUNG DER GLEICHUNG
0023800 C
0023900      A(IE)=(D(IE)*B(ID)-D(ID)*A(IE))/(B(IE)*B(ID)-C(ID)*A(IE))
0024000      DO 14 I=1, IE1
0024100      J=IE-I
0024200      A(J)=(C(J)-C(J)*A(J+1))/B(J)
0024300      ANCRM=ANORM+ABS(A(J)-Y(J))
0024400 14    CONTINUE
0024500      ANCRM=ANORM/ID
0024600      DO 15 I=2, IE
0024700 15    Y(I)=Y(I)+OMEGA*(A(I)-Y(I))
0024750      IF(K.EQ.10) CMEGA=1.
0024800      IF(K.EQ.KMAX) GOTO 555
0024900      IF(ANCRM.GT.EPD) GOTO 44
0024905      GOTO 55
0024910 555    CONTINUE
0024915      WRITE(6,80) ANCRM,OM
0024920 80    FORMAT(2X,'VERF. DIV. MIT ANCRM=',E12.4,'CM=',E12.4,'K=',I8)
0024930      LDIVER=LDIVER+1
0024940      CMEGA=CMEGA*0.5
0024950      IF(LDIVER.LE.1) GOTO 1000
0025000 55    CCNTINUE
0025100      NARZA(IN)=K
0025200      IF(IN.LE.1) WRITE(6,70) (NARZA(J),J=1,IDC)
0025300 C30    FORMAT(2X,'ZAHL DER ITERATIONEN=',I6,' NORM=',E15.8)
0025400 70    FORMAT(2X,2CI5)
0025500      DO 16 L=1, IE
0025600 16    YY(L)=Y(L)
0025700      RETURN
0025800      END
0025802      SUBROUTINE GREENA(RMAX,IC,DEPAR,APCT,CMF,Y)
0025804      REAL Y(130),VEKPOT(130),ORDPAR(130)
0025806      INTEGER NARZA(100)
0025808      REAL DEPAR(130),APCT(130)
0025810      REAL YIN(130)
0025812      COMMON/PARAM/CAPPA,CARCTE,IDC,EPS
0025814      TB2=1.5707963
0025816      DX=RMAX/IC
0025818      ALPH=1.
0025820      EPD=0.2*EPS
0025822      CMEGA=1.5
0025823      IF(CABOTE.LE.0.1) CMEGA=1.
0025824      K1=1

```

```

0025826      QLT=1.E2
0025828      EPSOM=1.E-1
0025830      DXI1=1./((12.*DX*DX)
0025832      DXI2=30.*DXI1
0025834      IE=ID+1
0025836      IE1=IE+1
0025838      IE2=IE1+1
0025840      RI=0.
0025842      DO 1 I=3,IE
0025844      ORCPAR(I)=DEPAR(I-1)
0025846      H1=APCT(I-1)
0025848      IN=INT(0.5*(CMM/CABCTE-1.))+1.1)
0025850  1    VEKPT(I)=I*I
0025852      DO 2 I=1,IE
0025854      J=IE2-I
0025856  2    Y(J)=Y(J-1)
0025858      Y(2)=0.
0025860      Y(1)=-Y(3)
0025862      Y(IE2)=Y(IE)
0025864  C
0025866  C      ITERATION BEGINS HERE
0025868  C
0025870      K=0
0025872  44   K=K+1
0025874      QUS=0.
0025876      RI=0.
0025878      DO 12 I=3,IE
0025880      RI=RI+1.
0025882      H1=Y(I)
0025884      H2=Y(I+1)
0025886      H3=Y(I-1)
0025888      H4=Y(I+2)
0025890      H5=Y(I-2)
0025892      H6=SIN(H1)
0025894      H7=CCS(H1)
0025896      H8=VEKPT(I)*H6*H7
0025898      H9=VEKPT(I)*(1.-2.*H6*H6)
0025900      H10=ORDPAR(I)
0025902      QS=DXI1*((H5-H4+8.*(H2-H3))/RI-H4-H5+16.*(H2+H3)-30.*H1)
0025904      QS=QS-I*8+I*10*I*I-OMM*I*I
0025906      PS=DXI2+H5+H10*H6+CMM*I*I
0025908      Y(I)=H1+OMEGA*QS/PS
0025910      H1=H1-Y(I)
0025912  12   QUS=QUS+H1*H1
0025914      Y(1)=-Y(3)
0025916      Y(IE1)=0.1*(15.*Y(IE)-6.*Y(ID)+Y(ID-1))
0025918      Y(IE2)=Y(IE)
0025920  C
0025922  C      OMEGA STRATEGIE
0025924  C
0025926      CM=SQRT(QUS/QLT)
0025928      QLT=QUS
0025930      OM=(OM+OMEGA-1.)/(OMEGA*SQRT(CM))
0025932      CM=1.-CM*CM

```

```

0025934      IF(OM.LT.0.) GOTO 22
0025936      CM=2./(1.+SQRT(CM))
0025938      OM=AMIN1(CM,2.)
0025940      IF(K.LE.K1) GOTO 33
0025942      IF(ABS(CM-CM1).GE.EPSCM) GOTO 33
0025944      OMEGA=OM
0025946      EPSCM=EPSCM*3.E-1
0025948 33    CM1=CM
0025950 22    ABST=SQRT(QLS)/ID
0025952      IF(K.GT.200) GOTO 55
0025954      IF(ABST.GT.EPD) GOTO 44
0025956 55    DO 13 I=2,IE
0025958 13    Y(I)=Y(I+1)
0025960      Y(1)=0.
0025962      NARZA(IN)=K
0025964      IF(IN.LE.1) WRITE(6,70) (NARZA(J),J=1,ICC)
0025966 C      WRITE(6,30) K,ABST,OMEGA,CM
0025968 C      WRITE(6,40) (Y(I),I=1,IE)
0025970      RETURN
0025972 20    FORMAT(110,4F10.0)
0025974 3C    FORMAT(2X,'ZAHL DER ITERATIONEN= ',I8,5X,'ABST= ',E12.4,5X,
0025976      F'OMEGA= ',E12.4,5X,'CM= ',E12.4)
0025978 40    FCRMAT(5F20.8)
0025980 7C    FCRMAT(2X,2CI5)
0025982      END
0027800      SUBROUTINE SC1(RMAX,ID,ORC,RER,VEK,IMR,FELD)
0027850      REAL*8 P(120),Q(120),AA(120),BB(120),CC(120),DD(120),EE(120)
0027900      REAL*8 FF(120),PI(120),QI(120),RI,H1,H2,H3,H4,H5,BCS1,BCS2
0027950      REAL*8 QUS,ANCR,LT,T,A1,A4,A8,CX
0028000      REAL ORD(120),VEK(120),REF(120),IMR(120),FELD(120)
0028050      REAL PIS(120),PSC(120),KAPPA
0028100      COMMON/PARAM/KAPPA,TT,IMC,EFS
0028150      T=TT
0028200      APC=1.
0028220      CABAR=12.061273*KAPPA
0028250      IF(TT.LT.0.5) APO=2.
0028300      DX=RMAX/ID
0028350      DXI1=1./(12.*DX*DX)
0028400      ZETA3=1.2020569
0028450      PI2=9.8696044
0028500      AB=(1./(2.*IMC+1.)-0.25/(IMC+1.))/IMC
0028550      AAA=1./(2.*IMC+0.5)-1./(4.*IMC+2.)
0028600      IE=ID+1
0028650      IE1=IE+1
0028700      ID1=ID-1
0028750      IML=2*IMC-1
0028800      LT=DLOG(T)
0028850      A1=4.*APC/PI2
0028900      A2=2.*T*A1
0028950      A3=1.-A2*AAA/(T*T)
0029000      A4=3.5*ZETA3/((KAPPA**2)*APC*PI2)
0029050      A5=28.*ZETA3*T/((KAPPA*PI2)**2)
0029100      A6=A4*A3
0029150      A7=2.*AAA/T

```

```

0029200      A8=AB/4.
0029250      RI=C.
0029300      DO 10 I=2, IE
0029350      RI=RI+DX
0029400      P(I)=ORD(I)
0029450 10    Q(I)=VEK(I)*RI
0029500      Q(1)=-1.00
0029550      P(1)=0.00
0029560      Q(IE)=0.
0029600 C
0029650 C      BESETZUNG DER INHOMOGENITAETEN
0029700 C
0029750      RI=1.
0029800      DO 11 I=3, ID1
0029850      RI=RI+1.
0029900      H1=P(I)
0029950      H2=P(I+1)
0030000      H3=P(I-1)
0030050      H4=P(I+2)
0030100      H5=P(I-2)
0030150      H6=Q(I)
0030200      H7=H6/(DX*RI)
0030250      H7=H7*H7
0030300      PS=DXI1*((-H4+H5+8.*(H2-H3))/RI-H4-H5+16.*(H2+H3)-30.*H1)-H7*H1
0030350      PI(I)=A2*RER(I)-A3*PS
0030400      PIS(I)=2.*T*RER(I)+A7*PS
0030450      QI(I)=-A5*IMR(I)+A6*H1*H1
0030500 11    CONTINUE
0030550      PS=DXI1*(-2.*P(4)+24.*P(3)-30.*P(2))-((Q(2)/DX)**2)*P(2)
0030600      PI(2)=A2*RER(2)-A3*PS
0030650      PIS(2)=2.*T*RER(2)+A7*PS
0030700      QI(2)=-A5*IMR(2)+A6*P(2)*P(2)
0030750      PS=(-P(ID)+P(ID-2)+8.*(P(IE)-P(ID1)))/ID1
0030800      PS=PS-P(ID-2)+16.*(P(IE)+P(ID1))-31.*P(ID)
0030850      PS=DXI1*PS-((Q(ID)/(ID1*DX))**2)*P(ID)
0030900      PI(ID)=A2*RER(ID)-A3*PS
0030950      PIS(ID)=2.*T*RER(ID)+A7*PS
0031000      QI(ID)=-A5*IMR(ID)+A6*P(ID)*P(ID)
0031050      K=0
0031100 C
0031150 C      BERECHNUNG DES FLUSSES Q(I)
0031200 C
0031250 44    K=K+1
0031300      QUS=0.00
0031350      ANGR=0.00
0031400      DO 12 I=2, ID
0031450      RI=1.00/DFLCAT(I-1)
0031500      AA(I)=-((1.00+RI)/30.00
0031550      BB(I)=(2.00+RI)/3.7500
0031600      CC(I)=-1.00+0.400*(CI(I)-A4*P(I)*P(I))*DX*DX
0031650      DD(I)=(2.00-RI)/3.7500
0031700      EE(I)=-((1.00-RI)/30.00
0031750      FF(I)=C.
0031800 12    CONTINUE

```

```

0031850      H5=CC(2)+AA(2)
0031900      CC(2)=DD(2)/H5
0031950      EE(2)=EE(2)/H5
0032000      FF(2)=0.8DC/H5
0032050      FF(3)=-0.0500
0032100      CC(10)=CC(10)-EE(10)
0032150      H5=CC(3)-DD(2)*BB(3)
0032200      DD(3)=(DD(3)-EE(2)*BB(3))/H5
0032250      EE(3)=EE(3)/H5
0032300      FF(3)=(FF(3)-FF(2)*BB(3))/H5
0032350      DO 13 I=4,10
0032400      H2=AA(I)
0032450      H3=BB(I)-DD(I-2)*H2
0032500      H5=CC(I)-EE(I-2)*H2-DD(I-1)*H3
0032550      DD(I)=(DD(I)-EE(I-1)*H3)/H5
0032600      EE(I)=EE(I)/H5
0032650      FF(I)=- (H2*FF(I-2)+FF(I-1)*H3)/H5
0032700 13    CONTINUE
0032750      Q(ID)=FF(ID)
0032800      Q(ID1)=FF(ID1)-DD(ID1)*C(IC)
0032850      DO 14 I=4,10
0032900      J=IE1-I
0032950      H1=-Q(J)+FF(J)-DD(J)*Q(J+1)-EE(J)*Q(J+2)
0033000      Q(J)=Q(J)+H1
0033050      CLS=CLS+H1*H1
0033100 14    ANOR=ANOR+Q(J)*Q(J)
0033150 C
0033200 C      BERECHNUNG DES CRDUNGSPARAMETERS P(I)
0033250 C
0033300      DO 15 I=2,10
0033350      RI=1.00/DFLOAT(I-1)
0033400      AA(I)=(-1.00+RI)/12.00
0033450      BB(I)=2.00*(2.00-RI)/3.00
0033500      H1=(P(I)/T)**2
0033550      BCS1=0.00
0033600      BCS2=0.00
0033650      H2=DFLOAT(IML)
0033700      DO 16 I=1,IML,2
0033750      H3=1.00/DSQRT(H2*H2+H1)
0033800      H4=H3*H3
0033850      H5=H3*H4
0033900      BCS1=BCS1+H4/(H2*(H2*H3+1.00))
0033950      BCS2=BCS2+H5
0034000 16    H2=H2-2.00
0034050      BCS1=H1*(2.00*BCS1+A8)
0034100      BCS2=2.00*H1*(BCS2+A8)
0034150      CC(I)=-2.5DC-(Q(I)*RI)**2-A1*DX*CX*(LT+BCS1+BCS2)
0034200      CC(I)=2.00*(2.00+RI)/3.00
0034250      EE(I)=- (1.00+RI)/12.00
0034300      FF(I)=- (A1*P(I)*BCS2+PI(I))*DX*DX
0034350 15    CCNTINUE
0034400      H5=CC(2)-AA(2)
0034450      DD(2)=DD(2)/H5
0034500      EE(2)=EE(2)/H5

```

```

0034550      FF(2)=FF(2)/H5
0034600      AA(ID)=AA(IC)+0.100*CC(IC)
0034650      BB(ID)=BB(ID)-0.600*DD(ID)
0034700      CC(ID)=CC(IC)+1.500*CC(ID)+EE(ID)
0034750      BB(ID1)=BB(IC1)+0.100*EE(ID1)
0034800      CC(ID1)=CC(ID1)-0.600*EE(ID1)
0034850      DD(ID1)=DD(ID1)+1.500*EE(ID1)
0034900      H5=CC(3)-DD(2)*BB(3)
0034950      DD(3)=(DD(3)-EE(2)*BB(3))/H5
0035000      EE(3)=EE(3)/H5
0035050      FF(3)=(FF(3)-FF(2)*BB(3))/H5
0035100      DO 17 I=4, IC
0035150      H2=AA(I)
0035200      H3=BB(I)-DD(I-2)*H2
0035250      H5=CC(I)-EE(I-2)*H2-DD(I-1)*H3
0035300      DD(I)=(DD(I)-EE(I-1)*H3)/H5
0035350      EE(I)=EE(I)/H5
0035400      FF(I)=(FF(I)-FF(I-2)*H2-FF(I-1)*H3)/H5
0035450 17    CONTINUE
0035500      P(ID)=FF(ID)
0035550      P(ID1)=FF(ID1)-CC(IC1)*P(IC)
0035600      DO 18 I=4, ID
0035650      J=IE1-I
0035700      H1=-P(J)+FF(J)-DD(J)*P(J+1)-EE(J)*P(J+2)
0035750      P(J)=P(J)+H1
0035800      QLS=QLS+H1*H1
0035850 18    ANOR=ANOR+P(J)*P(J)
0035900      ABST=DSQRT(QLS/ANOR)
0035950      IF(K.GT.100) GOTO 55
0036000      IF(ABST.GT.2.) GOTO 66
0036050      IF(ABST.GT.EPS) GOTO 44
0036100 55    P(IE)=0.100*(15.00*P(ID)-6.00*P(ID1)+P(IC-2))
0036150      SRI=1.
0036200      DO 19 I=3, ID1
0036250      SRI=SRI+1.
0036300 19    FELD(I)=CABAR*DXI1*(Q(I-2)-Q(I+2)+8.*(Q(I+1)-Q(I-1)))/SRI
0036350      FELD(2)=CABAR*DXI1*(Q(2)-Q(4)+8.*(Q(3)-Q(1)))
0036400      FELD(ID)=CABAR*DXI1*(Q(ID-2)+Q(ID)+8.*(Q(ID+1)-Q(ID-1)))/(ID-1)
0036450      FELD(1)=0.1*(15.*FELD(2)-6.*FELD(3)+FELD(4))
0036500      FELD(IE)=0.1*(15.*FELD(ID)-6.*FELD(ID-1)+FELD(IC-2))
0036550 C      *****
0036600 C      BERECHNUNG DES SC-FEHLERS
0036650      H1=0.
0036700      H2=0.
0036750      DO 21 I=2, ID
0036800      B1=(P(I)/I)**2
0036850      BCS=0.
0036900      ABA=IML
0036950      DO 22 L=1, IML, 2
0037000      B2=1./SQRT(AEA*AEA+B1)
0037050      B22=B2*B2
0037100      BCS=BCS+B22/(ABA*(AEA*B2+1.))
0037150 22    ABA=ABA-2
0037200      BCS=B1*(BCS*2+AB1)

```

```

0037250      H2=P(I)*(LT+BCS)-PIS(I)
0037300      PSC(I)=H2
0037350 21      H1=H1+H2*H2
0037400      H1=DSQRT(H1)/ID
0037450      WRITE (6,30) K,ABST,OMEGA,H1
0037500      WRITE(6,60) APC
0037550 C      WRITE(6,70) (PSC(I),I=2,ID)
0037600      GOTO 77
0037650 66      WRITE(6,30) K,ABST,OMEGA,H1
0037700      WRITE(6,40)
0037750      WRITE(6,50) (P(I),RER(I),Q(I),IMR(I),I=1,IE)
0037800      STOP
0037850 77      CONTINUE
0037900      RI=0.
0037950      DO 23 I=2,IE
0038000      RI=RI+DX
0038050      ORD(I)=P(I)
0038100 23      VEK(I)=Q(I)/RI
0038150      ORC(I)=0.
0038200      RETURN
0038250 30      FORMAT(2X,'SC-GLEICH.(NEWTN):Zahl der Iterationen=',I8,-
0038300      F5X,'ABST= ',E12.4,' OMEGA= ',E12.4,' SC-Fehler=',E12.4)
0038350 40      FORMAT(12X,'ORDPAR',14X,'RER',17X,'VEKPCT',14X,'IMR'/)
0038400 50      FORMAT(4F20.8)
0038450 60      FORMAT(2X,'APC= ',F14.6)
0038500 70      FORMAT(10(2X,F10.6))
0038550      END
0038552      SUBROUTINE SC1A(RMAX,IC,CFCPAR,RER,VEKPCT,IMR,FELD)
0038554 C      *****GL APPROXIMATION: APC=T *****
0038556      REAL P(100),RER(100),Q(100),IMR(100),FELD(100),PI(100)
0038558      REAL ORDPAR(100),VEKPCT(100),PIS(100),PSC(100),CI(100)
0038560      REAL KAPPA,LT
0038562      COMMON/FARAP/KAPPA,T,IMC,EFS
0038563      CABAR=12.061273*KAPPA
0038564      APC=1.
0038566      IF(T.LT.C.5) APC=2.
0038568      DX=RMAX/ID
0038570      DXI1=1./(12.*DX*CX)
0038572      DXI2=30.*DXI1
0038574      ZETA3=1.2020569
0038576      P12=9.8696044
0038578      AA=(1./(2.*IMC+1.)-0.25/(IMC+1.))/IMC
0038580      AAA=1./(2.*IMC+0.5)-1./(4.*IMC+2.)
0038582      IE=ID+1
0038584      IE1=IE+1
0038586      IE2=IE1+1
0038588      IML=2*IMC-1
0038590      CIML=IML
0038592      LT=ALOG(T)
0038594      OMEGA=C.5
0038596      K1=4
0038598      QLT=1.E2
0038600      EPSOM=1.E-1
0038602      A1=4.*APC/F12

```

```

0038604      A2=2.*T*A1
0038606      A3=1.-A2*AAA/(T*T)
0038608      A4=3.5*ZETA3/((KAPPA**2)*APO*PI2)
0038610      A5=28.*ZETA3*T/((KAPPA*PI2)**2)
0038612      A6=A4*A3
0038614      A7=2.*AAA/T
0038616      A8=AA/4.
0038618      RI=0.
0038620      DO 10 I=3,IE1
0038622      RI=RI+DX
0038624      P(I)=ORDPAR(I-1)
0038626 10    Q(I)=VEKPOT(I-1)*RI
0038628      P(1)=-P(3)
0038630      P(2)=0.
0038632      P(IE2)=P(IE)
0038634      Q(1)=Q(3)
0038636      Q(2)=-1.
0038638      Q(IE1)=0.
0038640      Q(IE2)=2.*Q(IE1)-Q(IE)
0038642 C
0038644 C      BESETZUNG DER INHOMOGENITAETEN
0038646 C
0038648      RI=0.
0038650      DC 11 I=3,IE
0038652      RI=RI+1.
0038654      H1=P(I)
0038656      H2=P(I+1)
0038658      H3=P(I-1)
0038660      H4=P(I+2)
0038662      H5=P(I-2)
0038664      H6=Q(I)
0038666      H7=H6/(DX*RI)
0038668      H7=H7*H7
0038670      PS=DX*I1*((-H4+H5+8.*(H2-H3))/RI-H4-H5+16.*(H2+H3)-30.*H1)-H7*H1
0038672      PI(I)=A2*RER(I-1)-A3*PS
0038674      PIS(I-1)=2.*T*RER(I-1)+A7*FS
0038676      QI(I)=-A5*IMR(I-1)+A6*H1*H1
0038678 11    CCNTINUE
0038680      K=0
0038682 C
0038684 C      BERECHNUNG DES FLUSSES Q(I)
0038686 C
0038688 44    K=K+1
0038690      QUS=0.
0038692      ANOR=0.
0038694      RI=0.
0038696      DO 12 I=3,IE
0038698      RI=RI+1.
0038700      H1=Q(I)
0038702      H2=Q(I+1)
0038704      H3=Q(I-1)
0038706      H4=Q(I+2)
0038708      H5=Q(I-2)
0038710      H6=P(I)*P(I)

```



```

0038712      F7=Q1(I)
0038714      QS=DXI1*((H4-H5-8.*(H2-H3))/R1-H4-H5+16.*(H2+H3)-30.*H1)
0038716      QS=QS-(A4*H6-H7)*H1
0038718      Q(I)=H1+CMEGA*QS/(DXI2+A4*t6-t7)
0038720      H1=H1-Q(I)
0038722      QUS=QUS+H1*t1
0038724      12  ANOR=ANOR+Q(I)*Q(I)
0038726      Q(1)=Q(3)
0038728      Q(IE2)=2.*Q(IE1)-Q(IE)
0038730      C
0038732      C      BERECHNUNG DES CRDUNGSPARAMETERS F(I)
0038734      RI=0.
0038736      DO 13 I=3,IE
0038738      RI=RI+1.
0038740      H1=P(I)
0038742      H2=P(I+1)
0038744      H3=P(I-1)
0038746      H4=P(I+2)
0038748      H5=P(I-2)
0038750      H6=Q(I)
0038752      H7=H6/(DX*RI)
0038754      H7=H7*H7
0038756      B1=(H1/T)**2
0038758      BCS1=0.
0038760      BCS2=0.
0038762      ABA=DI*ML
0038764      DO 14 L=1,IML,2
0038766      B2=1./SQRT(ABA*ABA+B1)
0038768      B22=B2*B2
0038770      B3=B22*B2
0038772      BCS1=BCS1+B22/(ABA*(ABA*B2+1.))
0038774      ABA=ABA-2.
0038776      14  BCS2=BCS2+B3
0038778      BCS2=B1*(BCS1+2.*(BCS2+A8))
0038780      BCS1=B1*(BCS1+2.*A8)
0038782      PS=DXI1*((-H4+H5+8.*(H2-t3))/R1-H4-H5+16.*(H2+H3)-30.*H1)
0038784      PS=PS-H1*(H7+A1*(LT+BCS1))+PI(I)
0038786      PSS=DXI2+H7+A1*(LT+BCS2)
0038788      P(I)=H1+CMEGA*PS/PSS
0038790      H1=H1-P(I)
0038792      QUS=QUS+H1*t1
0038794      13  ANCR=ANCR+P(I)*P(I)
0038796      P(IE1)=0.1*(15.*P(IE)-6.*P(ID)+P(ID-1))
0038798      P(1)=-P(3)
0038800      P(IE2)=P(IE)
0038802      C
0038804      C      OMEGA STRATEGIE UND AUSSTIEGLOGIK
0038806      C
0038808      OM=SQRT(QUS/QLT)
0038810      QUT=QUS
0038812      CM=(OM+OMEGA-1.)/(OMEGA*SQRT(CP))
0038814      OM=1.-OM*OM
0038816      IF(CP.LT.0.) GOTO 22
0038818      OM=2./(1.+SQRT(CP))

```

```

0038820      IF(K.LE.K1) GOTO 33
0038822      IF(ABS(QM-QM1).GE.EPSQM) GOTO 33
0038824      CMEGA=AMIN1(CM,1.0)
0038826      EPSCM=EPSCM*3.E-1
0038828  33    CM1=QM
0038830  22    ABST=SQRT(CUS/ANOR)
0038832      IF(K.GT.1500) GOTO 55
0038834      IF(ABST.GT.0.1) GOTO 66
0038836      IF((ABST.GT.EPS).OR.(K.LE.5)) GOTO 44
0038838  55    RI=0.
0038840          DO 15 I=3,IE
0038842          RI=RI+1.
0038844  15    FELD(I-1)=CABAR*DX11*(Q(I-2)-Q(I+2)+8.*(Q(I+1)-Q(I-1)))/RI
0038846          FELD(1)=0.1*(15.*FELD(2)-6.*FELD(3)+FELD(4))
0038848          FELD(IE)=0.1*(15.*FELD(IC)-6.*FELD(ID-1)+FELD(ID-2))
0038850  C      *****
0038852  C      BERECHNUNG DES SC-FEHLERS
0038854          H1=0.
0038856          H2=0.
0038858          DO 17 I=2,IC
0038860          B1=(P(I+1)/I)**2
0038862          BCS=0.
0038864          ABA=0IML
0038866          DO 18 L=1,IML,2
0038868          B2=1./SQRT(AEA*AEA+B1)
0038870          B22=B2*B2
0038872          BCS=BCS+B22/(ABA*(ABA*B2+1.))
0038874  18    AEA=ABA-2
0038876          BCS=B1*(BCS*2+AB)
0038878          H2=P(I+1)*(LT+BCS)-PIS(I)
0038880          PSC(I)=H2
0038882  17    H1=H1+H2*H2
0038884          H1=SQRT(H1)/ID
0038886          WRITE (6,30) K,ABST,CMEGA,H1
0038888          WRITE(6,60) APO
0038890  C      WRITE(6,70) (PSC(I),I=2,ID)
0038892          GOTO 77
0038894  66    WRITE(6,30) K,ABST,CMEGA,H1
0038896          WRITE(6,40)
0038898          WRITE(6,50) (P(I+1),RER(I),Q(I+1),IMR(I),I=1,IE)
0038900          STCP
0038902  77    CCNTINUE
0038904          RI=0.
0038906          DO 16 I=2,IE
0038908          RI=RI+DX
0038910          ORCPAR(I)=P(I+1)
0038912  16    VEKPCT(I)=Q(I+1)/RI
0038914          ORDPAR(I)=C.
0038916          RETURN
0038918  30    FORMAT(2X,'SC-GLEICH.(SCR):ZAHL DER ITERATIONEN=',I8,-
0038920          F5X,'ABST= ',E12.4,' CMEGA= ',E12.4,' SC-FEHLER=',E12.4)
0038922  40    FORMAT(12X,'ORDPAR',14X,'RER',17X,'VEKPOT',14X,'IMR'/)
0038924  50    FORMAT(4F20.8)
0038926  60    FORMAT(2X,'APO= ',F14.6)

```

```

0038928 7C  FORMAT(10(2X,F1C.6))
0038930      END
0046700      SUBROUTINE BESK(X,N,BK,IER)
0046800      DIMENSION T(12)
0046900      BK=.0
0047000      IF(N)10,11,11
0047100 10  IER=1
0047200      RETURN
0047300 11  IF(X)12,12,20
0047400 12  IER=2
0047500      RETURN
0047600 20  IF(X-170.C)22,22,21
0047700 21  IER=3
0047800      RETURN
0047900 22  IER=0
0048000      IF(X-1.)36,36,25
0048100 25  A=EXP(-X)
0048200      B=1./X
0048300      C=SQRT(B)
0048400      T(1)=B
0048500      DO 26 L=2,12
0048600 26  T(L)=T(L-1)*B
0048700      IF(N-1)27,29,27
0048800 C
0048900 C      COMPUTE KC USING POLYNOMIAL APPROXIMATION
0049000 C
0049100 27  G0=A*(1.2533141-.1566642*T(1)+.C8811128*T(2)-.C9139095*T(3)
0049200      2+.1344596*T(4)-.2299850*T(5)+.3792410*T(6)-.5247277*T(7)
0049300      3+.5575368*T(8)-.4262633*T(9)+.2184518*T(10)-.06680977*T(11)
0049400      4+.009189383*T(12))*C
0049500      IF(N)20,28,29
0049600 28  BK=G0
0049700      RETURN
0049800 C
0049900 C      COMPUTE K1 USING POLYNOMIAL APPROXIMATION
0050000 C
0050100 29  G1=A*(1.2533141+.4699927*T(1)-.1468583*T(2)+.1280427*T(3)
0050200      2-.1736432*T(4)+.2847618*T(5)-.4594342*T(6)+.6283381*T(7)
0050300      3-.6632295*T(8)+.5050239*T(9)-.2581304*T(10)+.07880001*T(11)
0050400      4-.01082418*T(12))*C
0050500      IF(N-1)20,30,31
0050600 30  BK=G1
0050700      RETURN
0050800 C
0050900 C      FROM K0,K1 COMPUTE KN USING RECURRENCE RELATION
0051000 C
0051100 31  DO 35 J=2,N
0051200      GJ=2.*(FLOAT(J)-1.)*G1/X+GC
0051300      IF(GJ-1.0E70)33,33,32
0051400 32  IER=4
0051500      GO TO 34
0051600 33  G0=G1
0051700 35  G1=GJ
0051800 34  BK=GJ

```

```

0051900      RETURN
0052000      36 B=X/2.
0052100      A=.5772157+ALOG(B)
0052200      C=B*B
0052300      IF(N-1)37,43,37
0052400 C
0052500 C      COMPUTE K0 USING SERIES EXPANSION
0052600 C
0052700      37 G0=-A
0052800      X2J=1.
0052900      FACT=1.
0053000      HJ=.0
0053100      DO 40 J=1,6
0053200      RJ=1./FLCAT(J)
0053300      X2J=X2J*C
0053400      FACT=FACT*RJ*RJ
0053500      HJ=HJ+RJ
0053600      40 G0=G0+X2J*FACT*(HJ-A)
0053700      IF(N)43,42,43
0053800      42 BK=G0
0053900      RETURN
0054000 C
0054100 C      COMPUTE K1 USING SERIES EXPANSION
0054200 C
0054300      43 X2J=B
0054400      FACT=1.
0054500      FJ=1.
0054600      G1=1./X+X2J*(.5+A-HJ)
0054700      DO 50 J=2,8
0054800      X2J=X2J*C
0054900      RJ=1./FLCAT(J)
0055000      FACT=FACT*RJ*RJ
0055100      HJ=HJ+RJ
0055200      50 G1=G1+X2J*FACT*(.5+(A-FJ)*FLCAT(J))
0055300      IF(N-1)31,52,31
0055400      52 BK=G1
0055500      RETURN
0055600      END
0055700      REAL FUNCTION DELSQU(T)
0055800      REAL LT,KAPPA
0055900      COMMON/PARAM/KAPPA,TT,IMC
0056000      IML=2*IMC-1
0056100      DIMC=FLOAT(IMC)
0056200      LT=ALOG(T)
0056300      A6=(2.*DIMC+3.)/((DIMC+1.)*(2.*DIMC+1.)*DIMC*16.)
0056400      PP=0.2
0056500      DO 13 I=1,200
0056600      BCS1=0.
0056700      BCS2=0.
0056800      ABA=IML
0056900      DO 14 L=1,IML,2
0057000      B2=1./SQRT(ABA*ABA+PP)
0057100      B22=B2*B2
0057200      B3=B22*B2

```

```

0057300      BCS1=BCS1+B22/(ABA*(ABA*B2+1.))
0057400      ABA=ABA-2.
0057500  14    BCS2=BCS2+B3
0057600      BCS1=PP*(BCS1*2.+A6)+LT
0057700      BCS2=BCS1/(2.*(BCS2+A6))
0057800      PP=PP-BCS2
0057900      BCS2=ABS(BCS2/PP)
0058000      IF(BCS2.LT.1.E-5) GOTO 33
0058100  13    CONTINUE
0058200  C     GOTO 22
0058300  22    DELSQL=PP*T*T
0058400  22    RETURN
0058500      END
0058510      SUBROUTINE KINC(AK1,HCK)
0058560  C     BERECHNUNG VON AK1=K1/CAPPA UND FC IM DIRTY LIMIT
0058610  C     EINHEITEN DES MAGNETFELDES S.PAPER(A4)
0058660  C
0058710      CCMPCN/PARAM/CAPPA,CABOTE,IMC
0058760      CABOT1=1./CABOTE
0058810      AB=ALOG(CABOT1)
0058860      ALPH=0.0001*CABOTE
0058910      ALST=0.5
0058960  777   CCNTINUE
0059010      SUM=1.56351+PSI(0.5*CABOT1*ALPH)-AB
0059060      IF(ABS(SUM).LE.1.E-6) GOTO 888
0059110      IF(SUM) 11,888,13
0059160  11    ALL=ALPH
0059210      ALPH=ALPH+ALST
0059260      GOTO 777
0059310  13    ALN=ALPH
0059360      ALPH=0.5*(ALN+ALPH)
0059410      ALST=0.5*(ALN-ALPH)
0059460      GOTO 777
0059510  888   CCNTINUE
0059560      IML=2*IMC-1
0059610      PP=DELSQU(CABOTE)
0059660      S=0.
0059710      ABA=IML
0059760      DO 14 I=1,IML,2
0059810      CMC=ABA*CABOTE
0059860      W=SQRT(CMO*CMO+PP)
0059910      S=S+((CMC-W)**2)/W
0059960  14    ABA=ABA-2.
0060010      HCK=PP*PP*(1./(2.*IMC+1.)-(C.25/(IMC+1.))/(8.*CABOTE**2*IMC)
0060060      HCK=SQRT((2.*CABOTE*S+HCK))*5.0132566
0060110      AK1=8.5266C79*ALPH/HCK
0060160  500   FCRMAT(F10.0)
0060210      RETURN
0060260      END
0061810 /*
0061820 //G.FT1CF001 DD DSN=USER.IFF053A6,DISP=CLD
0061830 //G.FT14F001 DD DSN=KP40,LABEL=(4C,SL),UNIT=3400-3,
0061840 // VCL=SER=TP2878,DISP=(NEW,KEEP),
0061850 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=1200,BLKSIZE=1204,DEN=3)

```

```

CC61860 //G.FT14F002 DD DSN=KP40,LABEL=(40,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0061870 // VOL=SER=TP2878,DISP=(NEW,KEEP),
0061880 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=1200,BLKSIZE=1204,DEN=3)
CC61890 //G.FT14F003 DD DSN=KP4,LABEL=(4,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0061900 // VOL=SER=TP2878,DISP=(NEW,KEEP),
CC61910 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=1200,BLKSIZE=1204,DEN=3)
0061920 //G.FT14F004 DD DSN=KP5,LABEL=(5,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0061930 // VCL=SER=TP2878,DISP=(NEW,KEEP),
CC61940 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=1200,BLKSIZE=1204,DEN=3)
0061950 //G.FT14F005 DD DSN=K19,LABEL=(9,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
0061960 // VCL=SER=TP2878,DISP=(NEW,KEEP),
CC61970 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=1200,BLKSIZE=1204,DEN=3)
0061980 //G.FT14F006 DD DSN=KT10,LABEL=(10,SL),UNIT=AFF=FT14F001,
CC61990 // VCL=SER=TP2878,DISP=(NEW,KEEP),
CC62000 // DCB=(RECFM=VS,LRECL=1200,BLKSIZE=1204,DEN=3)
0063710 //G.SYSIN DD *
CC63810          60 54.0      0.1
0063910          10 0.9       .9
0064010 /*

```