

增加THO方法

Calculation

Index的处理方法与调用逻辑

在Global里面增加控制变量method, method=1为bin, 其他情况调用tho

进行THO计算, 得到THO波函数与对应的本征值

根据Bin参数中的能量范围设置挑选THO波函数对Index赋值

跳过projectile波函数计算, 直接对波函数与对应能量赋值

读取Input

设置反应道, 对Index赋值

计算projectile波函数

计算Coupling Potential

解耦合方程

计算可观测量

Calculation

目前发现了一个bug，可能是内存上的问题，对应的subroutine是tho.f的tho_H

```
C-----
| | subroutine tho_H(mu,V,l,Hmat)
| | this subroutine is used to compute the <R^THO | H | R^THO >
| |-----
| | use mesh ,only : rrbx, rrbxw, nrbx
| | use precision
| | use interpolation
| | use constants
| | use systems, only : method
| | implicit none
| | real*8 :: mu
| | complex*16,dimension(1:nrbx) :: V
| | integer :: i,ip,l, ir
| | complex*16,dimension(1:nho,1:nho) :: Tmat, Vmat, Hmat
| | if (method==1) return
| | Tmat=0.0_dpreal; Vmat=0.0_dpreal; Hmat=0.0_dpreal
| | !if (method==1) return
| | do i=1, nho
| |   do ip=1, nho
| |     do ir=1, nrbx
| |       if (method==1) return
| |       Vmat(i,ip) = Vmat(i,ip) + thowf(ir,i,l) * V(ir) * thowf(ir,ip,l) * rrbxw(ir) * rrbx(ir)**2
| |       if (method==1) return
| |       Tmat(i,ip) = Tmat(i,ip) - (d2rthowf(ir,ip,l) * thowf(ir,i,l) - l*(l+1) * thowf(ir,ip,l) * thowf(ir,i,l)/ rrbx(ir)**2)
| |       +
| |         * rrbxw(ir) * rrbx(ir)**2 * hbarc**2 / (2.0_dpreal*mu)
| |     end do
| |   end do
| | end do
| |
| | Hmat = Tmat + Vmat
| |
| | end subroutine
C-----
| | subroutine thobc(mu)
```

Calculation

排除变量复用的可能性

目前发现是Hmat的赋值前后会导致结果发生变化。如果是前后有相同变量的名字，我们将变量名字改变之后结果结果还是不对的。这证明不是变量复用的问题。

怀疑可能是内存机制的问题。