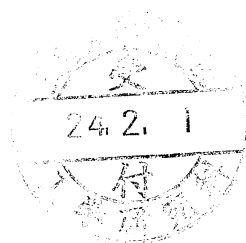


ダイヤモンド超伝導体の状態密度と 超伝導転移温度



平成 23 年度修士論文
三重大学大学院工学研究科
博士前期課程 物理工学専攻

伊奈 拓也

目次

1. 序論	2
2. 計算方法	
2.1 理論	6
2.2 パラメータの決定	7
3. 計算結果	11
4. 結論	16
参考文献	18
付録	
A. CPA について	19
B. フーリエ型二重指数関数公式	20
C. 並列計算	21
D. プログラム	28

1 序論

1911 年オネスは水銀を液体ヘリウム温度まで冷却させたところ4.2Kで電気抵抗が突然ゼロに変化する現象を発見し超伝導と名付けた。超伝導を説明する微視的理論として1957年にBCS 理論が提唱され超伝導の標準理論とみなされている。

BCS理論によって求められた転移温度の式は次のように表される。

$$T_c = 1.14\Theta \exp\left(-\frac{1}{\rho(0)V}\right)$$

Θ はデバイ温度、 $\rho(0)$ はフェルミ面での状態密度、 V は電子間相互作用。BCS理論では電子と格子の相互作用によって電子がペアを作り電気抵抗ゼロの状態が生じる。そのため、転移温度の式からもわかるように物質固有の値であるデバイ温度だけではなく、電子間相互作用や電気伝導を担うフェルミ面での電子数が転移温度において重要である。

超伝導の工業的な利用を考えるとできる限り高い転移温度を持つことが望まれる。しかし、温度が高くなると格子の熱振動が激しくなり電子のペアが壊されてしまい超伝導状態を示さなくなるためBCS理論では転移温度の上限が予測されたBCS の壁と呼ばれるものがあり、伝導転移温度は40Kを超えないとされていた。

しかし、1986 年にBCSの壁を打ち破る銅酸化物による超伝導が発見され大きな衝撃を与えた。発見当初は転移温度が順調に上がっていったが、超伝導転移温度が135Kで頭打ちとなり転移温度の上昇が止まってしまった。この事態から脱却するためにさまざまなアプローチが試された。

BCS 理論より転移温度がデバイ温度に比例するためデバイ温度の大きな物質を用いることで転移温度を高くすることが可能であると考えられ金属系物質よりも大きなデバイ温度をもつダイヤモンド(2230[K])に対しての研究が行われ、2004年にEkimovらによってダイヤモンドによる超伝導が発見された[1]。

純粋なダイヤモンドは絶縁体であるため通常は電気伝導性を示さないが、シリコンやゲルマニウムのように不純物をドーピングすることでキャリア（電子、正孔）が導入され電気伝導性が生じるようになる。さらにドーピングすることで絶縁体から金属的な特徴を持つようになり低温で超伝導へ相転移するようになる。

デバイ温度と超伝導転移温度の関係

物質名	Tc[K]	θ [K]
Cd	0.56	209
Hg	4.154	71.9
Sn	3.772	199
Pb	7.193	105
Nb	9.23	275
Al	1.196	428
Zn	0.852	327

一般に大型単結晶ダイヤモンドは温度差法によって作成される。温度差法は溶媒金属を黒鉛と種結晶(ダイヤモンド)ではさみ高温高压条件(5GPa、1500℃)に設定する。このとき、上部(黒鉛)よりも下部(種結晶)の温度が低くなるようにすると高温部で溶媒金属に炭素が溶け込み飽和状態になり、飽和状態になった溶媒金属は低温部で過飽和状態になり炭素が析出され種結晶を育成させていく。ホウ素をドーピングするには黒鉛や金属溶媒に混入させることで実現できるがホウ素の固溶限界が狭いため多量にドーピングすることが難しい。

Ekimov らは温度差法よりもさらに高温高压条件(10 万気圧弱、2500～2800k)による黒鉛からの直接変換によってホウ素の多量ドーピングに成功し超伝導を示すダイヤモンドを得ることに成功した。しかし、直接変換による方法では高温高压の条件を長時間維持することが難しく単結晶の試料を得ることはできなかった。

そのため現在ではメタンなどのガスを原料にしてダイヤモンドを合成する化学気相成長法によって単結晶のホウ素ドーピングダイヤモンドが作成されている[3]。化学気相成長は気相、基盤表面で化学反応させて薄膜を成長させるものであり、ホウ素ドーピングダイヤモンドの場合は原料として水素希釈したメタンガスとトリメチルボロンガスを使用する。トリメチルボロンガスを制御することでホウ素ドーピング量をコントロールすることができ大型の単結晶を得ることができる。Ekimov らが作成したダイヤモンドでは約 2[K]で超伝導状態となるが、化学気相成長によって作成されたものではホウ素を 5%以上ドーピングすることに成功し、約 8[K]で超伝導状態を示すダイヤモンドが作成された。

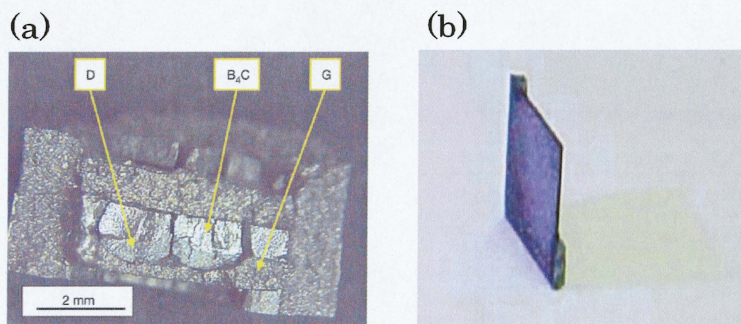


図 1. (a)高压合成法によって作成されたホウ素ドーピングダイヤモンド。(b)化学気相成長によって作成されたホウ素ドーピングダイヤモンド。

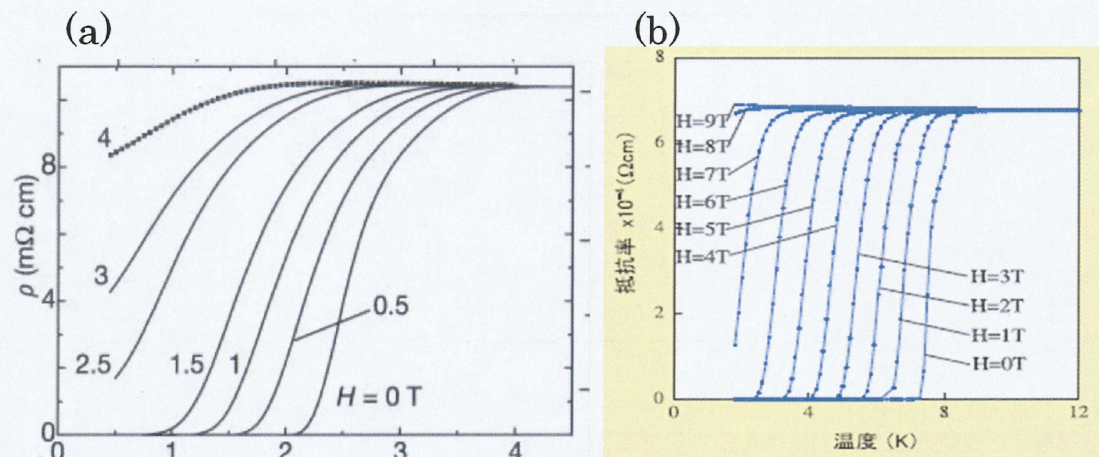


図2. (a)高圧合成法によって作成されたホウ素ドーピングダイヤモンドの超伝導転移温度。(b)化学気相成長によって作成されたホウ素ドーピングダイヤモンドの超伝導転移温度。

図2からわかるように高圧合成法によって作成されたダイヤモンドでは超伝導状態への転移が緩やかに行われているが、化学気相成長によって作成されたダイヤモンドでは転移の様子がはっきりとわかるため現在では化学気相成長によるダイヤモンドに対して研究が行われている。

ホウ素を多量にドーピングされたダイヤモンドに対しての電子構造については詳細にわかっておらず、ダイヤモンド超伝導に対しては二つの理論が提唱されている。

一つはホウ素をドーピングすることによって不純物準位が生じドーピング量が増加するに従い不純物バンドが幅を持つようになり超伝導を引き起こす不純物バンドによる超伝導。もう一方はホウ素をドーピングすることにより価電子バンドにキャリアが導入され超伝導が生じるようになる価電子バンドによる超伝導である。不純物バンドによる超伝導はコヒーレントポテンシャル近似(CPA)[4]によって、価電子バンドによる超伝導はバーチャルクリスタルやスーパーセル[5]などの方法によって得られたバンド計算から主張されている。

スーパーセルでは初めに基本となる結晶構造と原子を決めた格子が周期的に存在とした方法である。そのため小さな格子では不純物の分布が周期的になりランダム性を十分考慮することができない。

バーチャルクリスタルは母体原子 A に不純物原子 B を c だけドーピングした場合の結晶内のポテンシャル V を次のように置き換えている。

$$V = (1 - c)V_A + cV_B$$

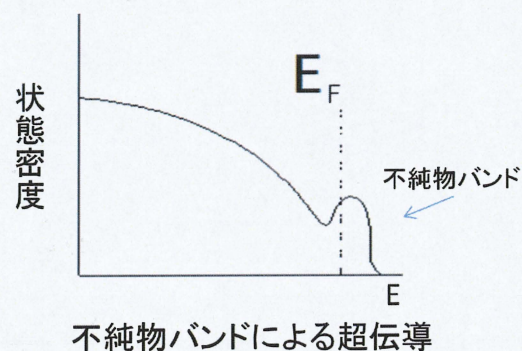
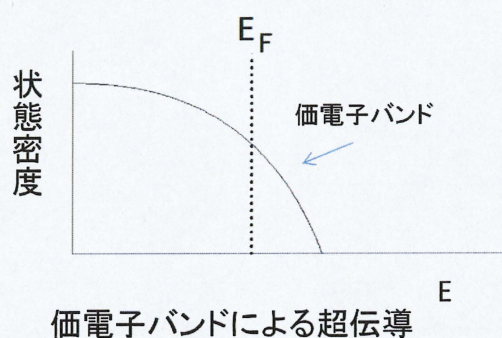
V_A, V_B はそれぞれの原子のポテンシャルを表している。したがってバーチャルクリスタルでは結晶内ポテンシャルをドーピング量にだけ依存する周期的なポテンシャルと置き換えてしまうため不純物の分布を考慮していない。

CPA もバーチャルクリスタルと同様に結晶内のポテンシャルを一様なポテンシャルにしてしまうため不純物の分布を考慮していない。また、不純物バンドによる超伝導の結果は

単純立方格子に対しての結果であり角度分解光電子分光の実験結果では明瞭な不純物バンドを得られていないため不純物バンドによる超伝導は否定されている。

しかし、角度分解光電子分光による結果[6]は不鮮明であるため不純物バンドが存在しないと結論づけることは簡単にはできない。また、どちらの結果もランダム性を考慮していない近似を用いているためどちらの主張が正しいかどうかはわからない。

そこで本研究ではタイトバインディング模型による有限格子の数値計算を行うことにより、ホウ素をドーピングしたダイヤモンドの電子状態を、有限系ではあるが出来るだけ近似によらない厳密な結果を得ることを目指した。



2. 計算方法

2-1. 理論

初めに次のような強束縛ハミルトニアンを考える。

$$H = \sum_{\phi, \phi'} \sum_{i \neq j} v_{\phi, \phi'} |i\phi\rangle \langle j\phi'| + \sum_{i, \phi} |i\phi\rangle \epsilon_{i\phi} \langle i\phi| \quad \dots \quad (1)$$

$v_{\phi, \phi'}$ は軌道 ϕ, ϕ' 間を飛び移るために必要なエネルギーを表し、 $\epsilon_{i\phi}$ は位置 i に存在する原子の軌道 ϕ でのエネルギーを表す。第 1 項の i, j 間の級数和は最近接のみで和をとる。

ここで遅延グリーン関数を次のように定義する

$$G_{ij\phi}(t) = -j \sum_{\phi'} \langle 0 | c_{i\phi}(t) c_{j\phi'}^\dagger | 0 \rangle \quad \dots \quad (2)$$

$c_{j\phi}^\dagger, c_{i\phi}$ は生成消滅演算子を表し $|0\rangle$ は真空状態を表す。定義した遅延グリーン関数に対してハイゼンベルグの運動方程式を立てる

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G_{ij\phi}(t) &= -j \sum_{\phi'} \langle 0 | \frac{\partial c_{i\phi}(t)}{\partial t} c_{j\phi'}^\dagger | 0 \rangle \\ &= \frac{-1}{\hbar} \sum_{\phi'} \langle 0 | [c_{i\phi}(t), H] c_{j\phi'}^\dagger | 0 \rangle \\ &= \frac{-1}{\hbar} \sum_{\phi'} \left(\langle 0 | c_{i\phi}(t) \left(\sum_{\theta, \theta'} \sum_{k \neq l} v_{\theta, \theta'} |k\theta\rangle \langle j l| + \sum_{k, \theta} |k\theta\rangle \epsilon_{k\theta} \langle k\theta| \right) c_{j\phi'}^\dagger | 0 \rangle \right. \\ &\quad \left. - \left\langle 0 \left| \left(\sum_{\theta, \theta'} \sum_{k \neq l} v_{\theta, \theta'} |k\theta\rangle \langle j l| + \sum_{k, \theta} |k\theta\rangle \epsilon_{k\theta} \langle k\theta| \right) c_{i\phi}(t) c_{j\phi'}^\dagger \right| 0 \right\rangle \right) \\ &= \frac{-1}{\hbar} \sum_{\phi'} \langle 0 | c_{i\phi}(t) \left(\sum_{\theta, \theta'} \sum_{k \neq l} \langle 0 | c_{i\phi}(t) v_{\theta, \theta'} |k\theta\rangle \langle l\theta' | c_{j\phi'}^\dagger | 0 \rangle + \sum_{k, \theta} |k\theta\rangle \epsilon_{k\theta} \langle k\theta| \right) c_{j\phi'}^\dagger | 0 \rangle \\ &= \frac{-1}{\hbar} \sum_{\phi'} \left(\sum_{\theta, \theta'} \sum_{k \neq l} \langle 0 | c_{i\phi}(t) v_{\theta, \theta'} |k\theta\rangle \langle l\theta' | c_{j\phi'}^\dagger | 0 \rangle + \sum_{k, \theta} \langle 0 | c_{i\phi}(t) |k\theta\rangle \epsilon_{k\theta} \langle k\theta | c_{j\phi'}^\dagger | 0 \rangle \right) \\ &= \frac{-1}{\hbar} \sum_{\phi'} \left(\sum_{\theta, \theta'} \sum_{k \neq l} v_{\theta, \theta'} \langle l\theta' | c_{j\phi'}^\dagger | 0 \rangle \delta_{i k, \phi \theta} + \sum_{k, \theta} \epsilon_{k\theta} \delta_{k i, \theta \phi} \langle k\theta | c_{j\phi'}^\dagger | 0 \rangle \right) \\ &= \frac{-1}{\hbar} \left(\sum_{\theta, \theta'} \sum_{k \neq l} j v_{\theta, \theta'} G_{lj\theta'} \delta_{i k, \phi \theta} + \sum_{\theta} j \epsilon_{i\theta} \delta_{\theta \phi} G_{ij\theta}(t) \right) \\ &= \frac{1}{j\hbar} \left(\sum_{\theta'} \sum_l v_{\phi, \theta'} G_{lj\theta'} + \sum_{\theta} \epsilon_{i\theta} \delta_{\theta \phi} G_{ij\theta}(t) \right) \\ j\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{ij\phi}(t) &= \sum_{\theta'} \sum_l v_{\phi, \theta'} G_{lj\theta'} + \epsilon_{i\phi} G_{ij\phi}(t) \quad \dots \quad (3) \end{aligned}$$

右辺第1項の l に関しての和は i の最近接のみをとる。遅延グリーン関数を位置 j に対してフーリエ変換を行い

$$G_{ik\phi}(t) = \frac{1}{N} \sum_m e^{-jk \cdot R_m} G_{im\phi}(t) \cdots (4)$$

運動方程式を書き換える

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{ik\phi}(t) = \sum_{\theta'} \sum_l v_{\phi, \theta'} G_{lk\theta'} + \varepsilon_{i\phi} G_{ik\phi}(t) \cdots (5)$$

次にスペクトル関数を定義する

$$A(k, E) = -\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\pi\hbar} \text{Im} \int_0^\infty \sum_i e^{-jk \cdot R_i} G_{ik}(t) e^{(i\frac{E}{\hbar} - \lambda)t} dt \cdots (6)$$

スペクトル関数と状態密度の関係は以下のように表せる。

$$\rho(E) = \frac{1}{N} \sum_k A(k, E) \cdots (7)$$

全ての k に対しての和をとることは数値計算上不可能であるため、それぞれの遅延グリーン関数に対して無作為に選んだ波数を与えて数値計算を行いできるだけ多くの波数の影響を取り入れる。

論文[7]では単純立方格子に対して遅延グリーン関数(5)の時間発展を中心差分法によって計算を行っている。スペクトル関数(6)を求めるための数値積分に対しての記述はされていなかったが、無限領域での数値積分が必要となるため収束性がよい台形公式が使用されていると考えられる。

本研究ではより高精度に計算を行うために遅延グリーン関数の時間発展を求めるためにルンゲクッタ法、スペクトル関数の数値積分はフーリエ型の二重指数関数型公式を用いた。

2-2. パラメータの決定

単純立方格子の場合、不純物原子のポテンシャルと母体原子のポテンシャルの差が大きければ不純物による状態密度がはっきり存在することがわかるが、ポテンシャルの差が小さい場合は不純物の状態密度と母体原子の状態密度を区別するのは難しくなる(図3)。そのため本研究では実験結果から得られた結果である価電子バンドのトップから0.37[eV]上に準位が生じるように決定した。

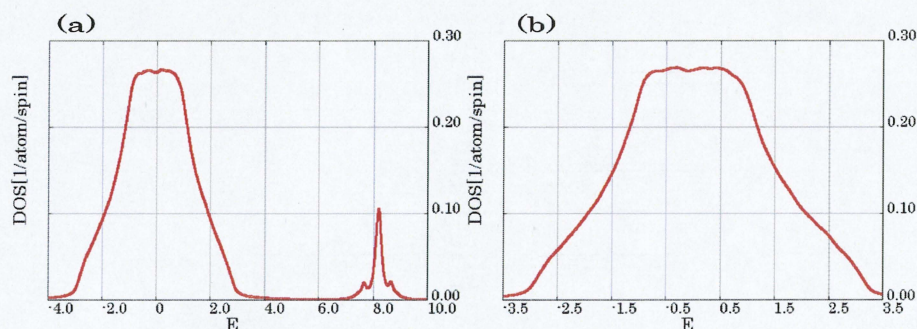


図3. 母体原子のポテンシャルを0にしたとき不純物原子(不純物濃度 $c=0.05$)のポテンシャルを(a) $E=8$ 、(b) $E=0.5$ の場合の状態密度

ダイヤモンド構造に対しては以下のように決める。

最近接への飛び移りを表すパラメータは強束縛近似によって用いられる原子間行列要素を素に決定する。周期的なダイヤモンド構造に対して強束縛近似によって得られるハミルトン行列は

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{1s} & V_{ss}g_0 & 0 & 0 & 0 & V_{sp}g_1 & V_{sp}g_2 & V_{sp}g_3 \\ V_{ss}g_0^* & \epsilon_{2s} & -V_{sp}g_1^* & -V_{sp}g_2^* & -V_{sp}g_3^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -V_{sp}g_1 & \epsilon_{1p} & 0 & 0 & V_{xx}g_0 & V_{xy}g_3 & V_{xy}g_1 \\ 0 & -V_{sp}g_2 & 0 & \epsilon_{1p} & 0 & V_{xy}g_3 & V_{xx}g_0 & V_{xy}g_1 \\ 0 & -V_{sp}g_3 & 0 & 0 & \epsilon_{1p} & V_{xy}g_1 & V_{xy}g_2 & V_{xx}g_0 \\ V_{sp}g_1^* & 0 & V_{xx}g_0^* & V_{xy}g_3^* & V_{xy}g_1^* & \epsilon_{2p} & 0 & 0 \\ V_{sp}g_2^* & 0 & V_{xy}g_3^* & V_{xx}g_0^* & V_{xy}g_2^* & 0 & \epsilon_{2p} & 0 \\ V_{sp}g_3^* & 0 & V_{xy}g_1^* & V_{xy}g_2^* & V_{xx}g_0^* & 0 & 0 & \epsilon_{2p} \end{pmatrix}$$

$$g_0 = \frac{1}{4}(e^{jd_1 \cdot k} + e^{jd_2 \cdot k} + e^{jd_3 \cdot k} + e^{jd_4 \cdot k})$$

$$g_1 = \frac{1}{4}(e^{jd_1 \cdot k} + e^{jd_2 \cdot k} - e^{jd_3 \cdot k} - e^{jd_4 \cdot k})$$

$$g_2 = \frac{1}{4}(e^{jd_1 \cdot k} - e^{jd_2 \cdot k} + e^{jd_3 \cdot k} - e^{jd_4 \cdot k})$$

$$g_3 = \frac{1}{4}(e^{jd_1 \cdot k} - e^{jd_2 \cdot k} - e^{jd_3 \cdot k} + e^{jd_4 \cdot k})$$

$$d_1 = \frac{d}{4}(1,1,1), \quad d_2 = \frac{d}{4}(1,-1,-1), \quad d_3 = \frac{d}{4}(-1,1,-1), \quad d_4 = \frac{d}{4}(-1,-1,1)$$

である。原子間行列要素は $V_{ss}, V_{sp}, V_{xx}, V_{xy}$ であり、それぞれ s 軌道と s 軌道、s 軌道と p 軌道、p 軌道と p 軌道で同一軌道 (px - px 等)、p 軌道と p 軌道で異なる軌道 (px - py 等)。このハミルトン行列の固有値を求めることでダイヤモンド構造のバンドが得られる。

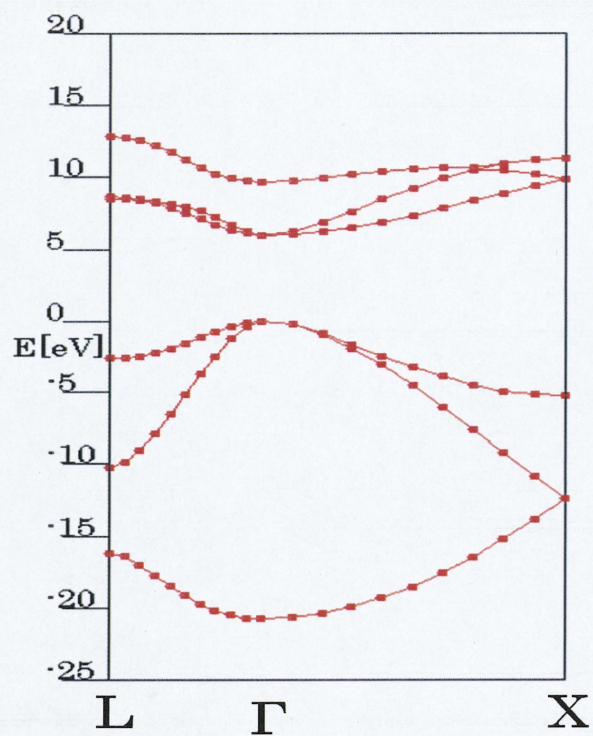
原子間行列要素は次のように定義されている。

$$V_{ss} = 4V_{ss\sigma}$$

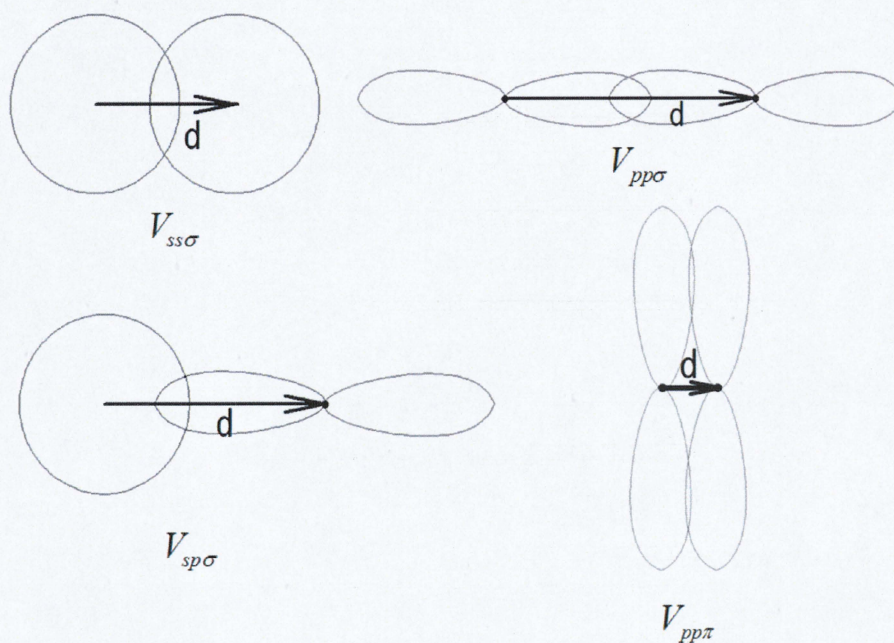
$$V_{sp} = -\frac{4}{\sqrt{3}}V_{sp\sigma}$$

$$V_{xx} = 4\left(\frac{V_{pp\sigma}}{3} + \frac{2V_{pp\pi}}{3}\right)$$

$$V_{xy} = 4\left(\frac{V_{pp\sigma}}{3} - \frac{V_{pp\pi}}{3}\right)$$



強束縛近似によって得られたハミルトン行列をQR法によって求めたダイヤモンドのバンド構造



それぞれの軌道と結合の仕方

添え字の σ, π は σ 結合、 π 結合を表す。自由電子の結果と比較して次のような関係があることが知られている。

$$V_{ll'm} = \eta_{ll'm} \frac{\hbar^2}{md^2}$$

m は電子の質量、 d は原子間距離。 $\eta_{ll'm}$ は結晶構造と結合方法にのみ依存するパラメータであり自由電子の結果と一致するように決めることができるが、実験結果とよりよく一致するように決められた修正値が主に使用される(理論値と修正値との違いはあまり大くない)。

飛び移りを表すパラメータが結晶構造にしか依存していないため置換型で不純物が混入しても原子間距離が変わらないとして本論文では炭素間、ホウ素間、炭素ホウ素間での飛び移りを一定にした。

原子軌道のエネルギー(ハミルトン行列の対角要素)は固体元素表[9]、飛び移りの値は[10]の値を用いた。

固体元素表

原子	Be	B	C	N	O	F	Ne
Es [eV]	-8.17	-12.54	-17.52	-23.04	-29.14	-35.80	-43.2
Ep [eV]	-4.14	-6.64	-8.97	-11.47	-14.13	-16.99	-20.0

飛び移り

V _{ss} [eV]	V _{sp} [eV]	V _{xx} [eV]	V _{xy} [eV]
-15.2	10.25	3.0	8.30

3. 計算結果

まず初めに単純立方格子に対しての結果を示す。周期的な単純立方格子の結果と有限系との比較を行うとゼロ付近で振動しているがほぼ一致している(図 4)。ゼロ付近で振動しているのは収束因子によるものである。

収束因子の影響を見るために $c=0.008$ での状態密度を計算した。収束因子が大きい場合スペクトル関数が広がり状態密度の端が緩やかになり新たに生じた不純物による状態密度も広がる。(図 5、図 6)。

不純物の分布は無秩序に配置していくが、不純物の分布がどれほど結果に影響が出るか調べた結果が図 7 である。この結果から無秩序に不純物を分布させた場合不純物の分布に影響されず一定の結果が得られることがわかる。

CPA の結果と比較するために不純物濃度 $c=0.002, 0.008$ について計算を行う。不純物濃度の上昇に伴い不純物による状態密度が大きくなり、どの不純物であってもフェルミ準位が不純物バンドに存在している。CPA と比較するとフェルミ準位が不純物バンドに存在する点は一致しているがフェルミ準位付近の状態密度は CPA よりも大きくなった[図 9]。

図 4.

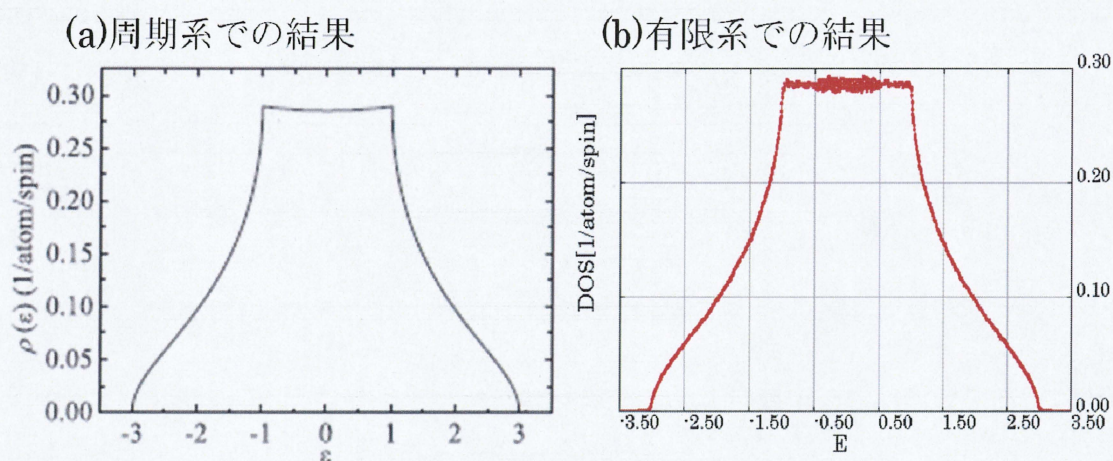


図 5.

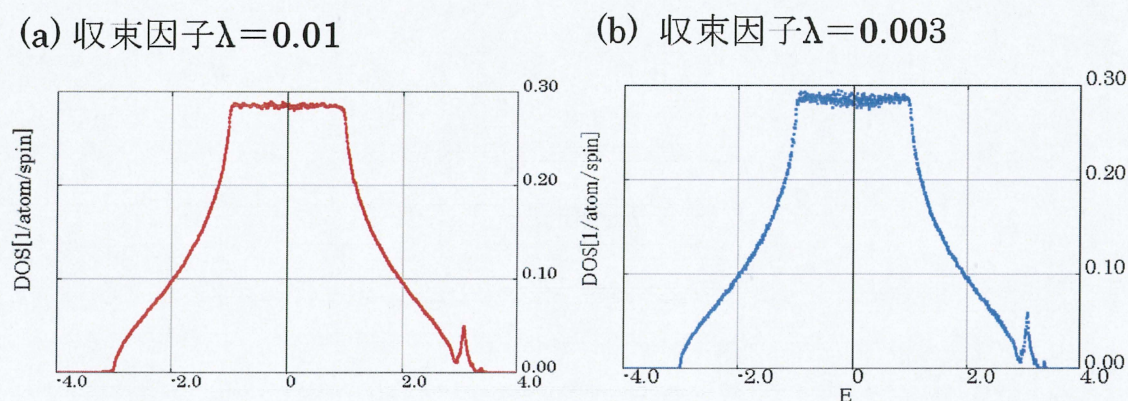


図 6. 収束因子の端での影響

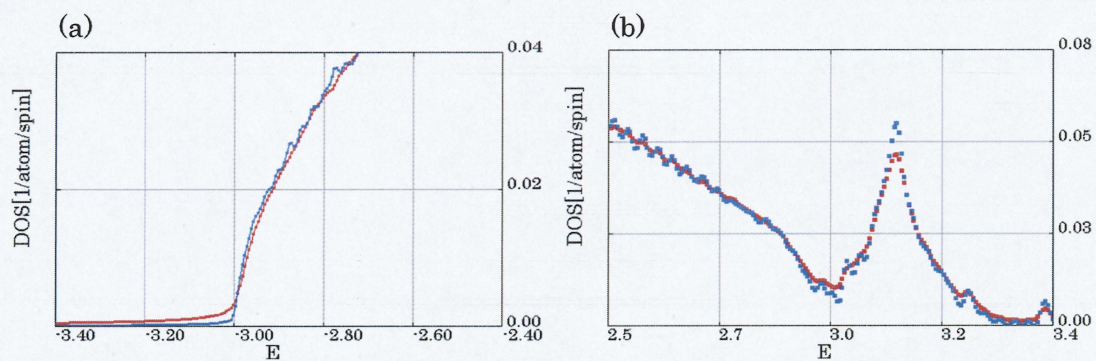


図 7. 異なる不純物分布に対応する状態密度

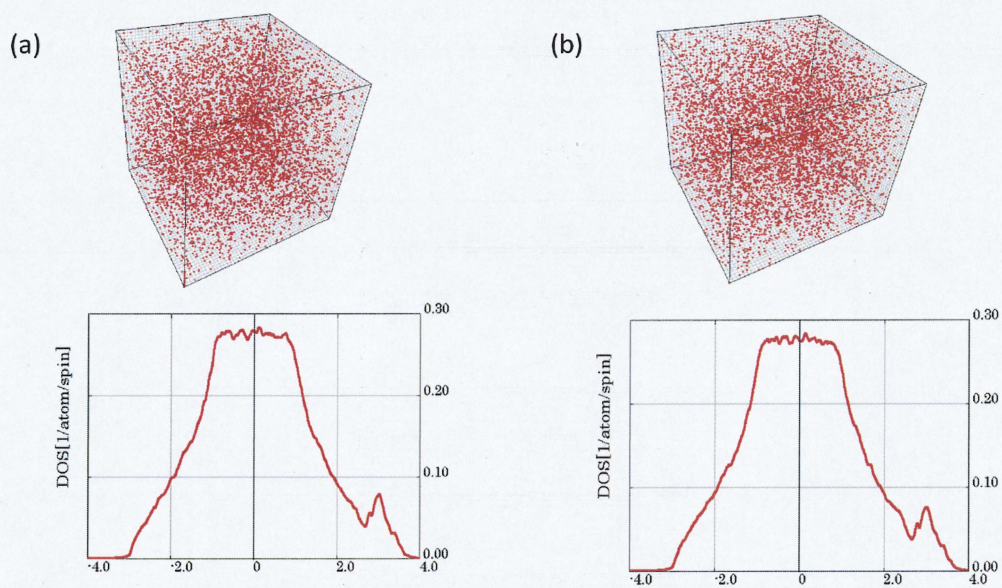


図 8. 不純物濃度 (a) $c=0.0$ (b) $c=0.002$ (c) $c=0.008$ の状態密度

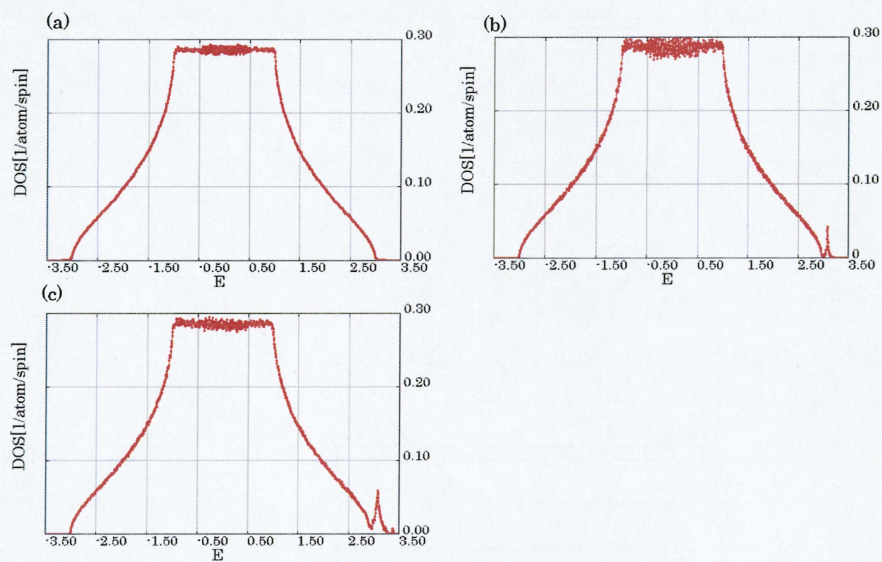
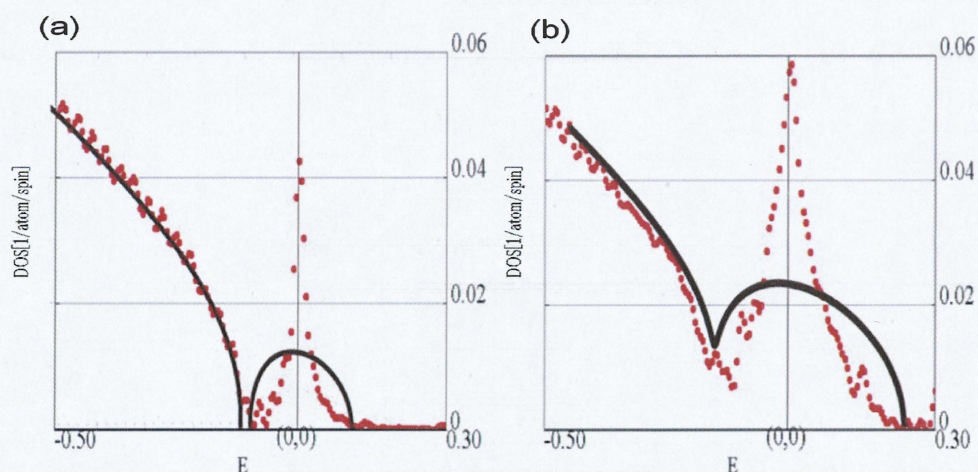


図 9. (a) $c=0.002$, (b) $c=0.008$ の状態密度を比較した図。赤点は有限系、黒線は CPA を表す



次にダイヤモンド構造に対しての結果を示す。計算結果は $c=0, 0.1$ の結果である。不純物がドーピングされてもバンド構造は大きく変化していない(図 11)。 Γ 点においてもスペクトル関数は不純物をドーピングしてもほとんど変化せず不純物バンドは生じていない(図 12)。角度分解光電子分光の実験結果(図 14)は不鮮明であるがダイヤモンドのバンド計算結果と比較しても大きく形は崩れていないためホウ素ドーピングによるバンドの変化は小さく有限系での結果と同じである。

求めた状態密度から転移温度を求める。

図 10. 有限系の結果($c=0.0$)に周期系の結果(赤線)を書いた図

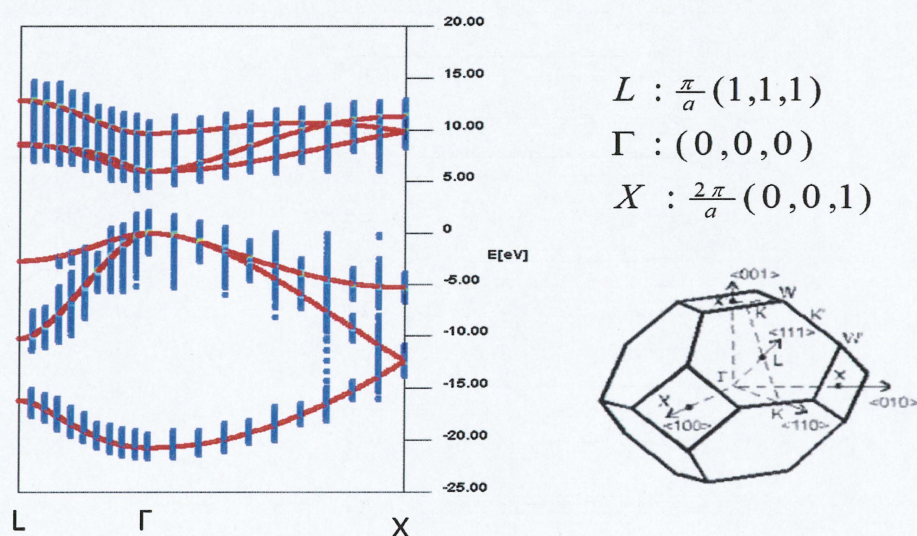


図 11. 有限系によって求めたダイヤモンドのバンド構造

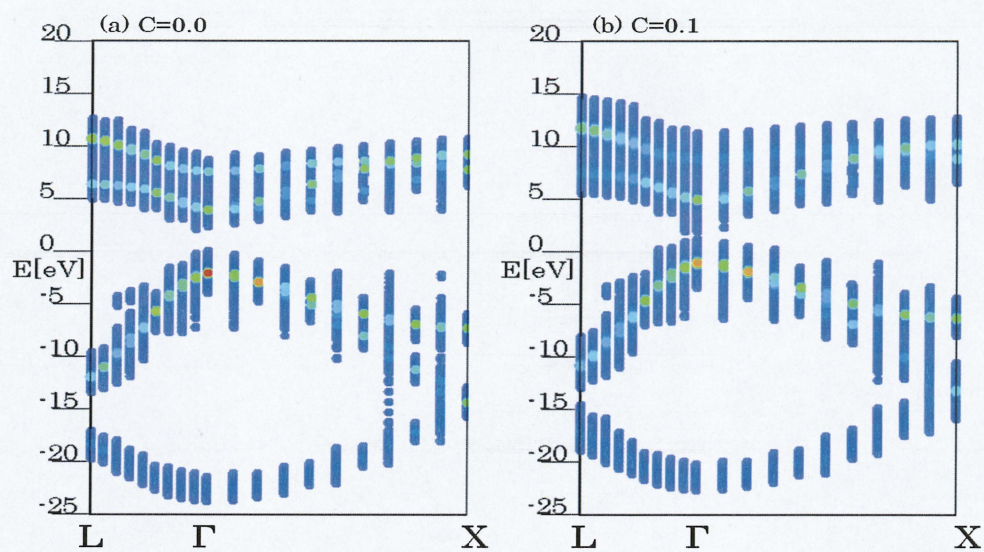


図 12. Γ 点でのスペクトル関数

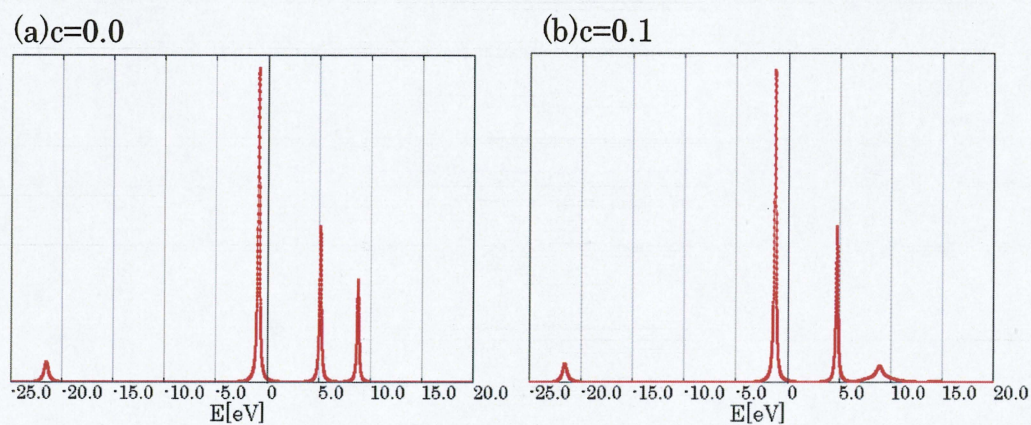


図 13. 状態密度

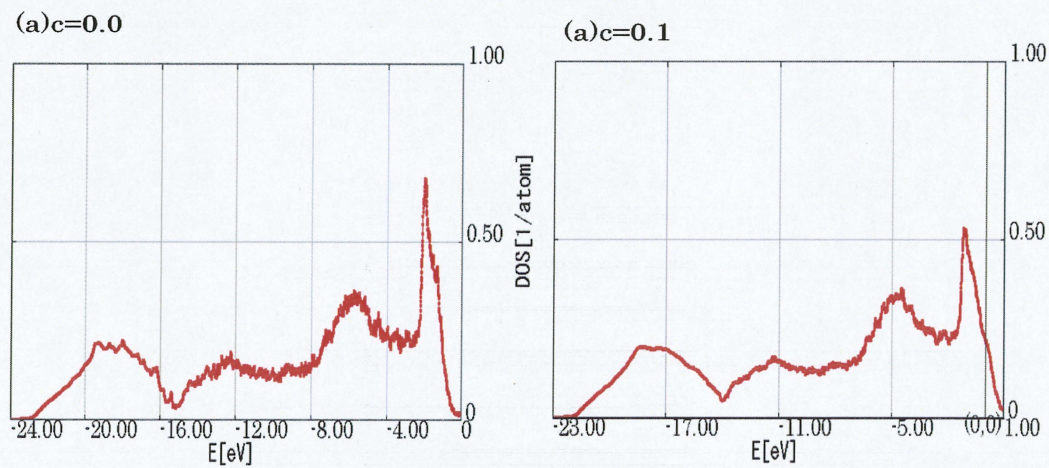
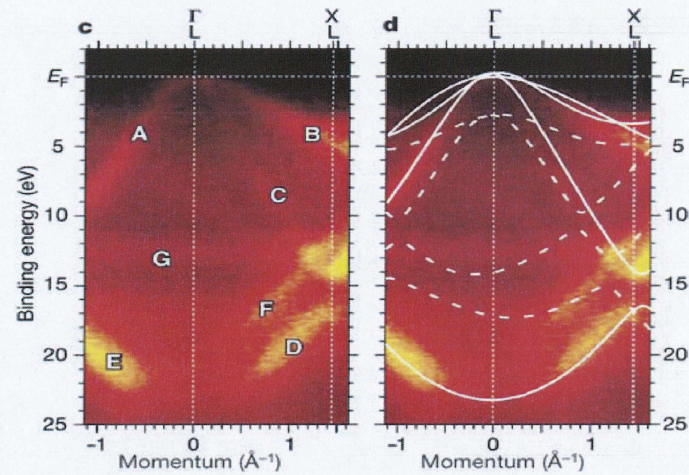


図 14. 角度分解光電子分光の実験結果。右図は実験結果にバンド計算の結果（白線）を重ねたもの



転移温度は以下の式から求めることができる。

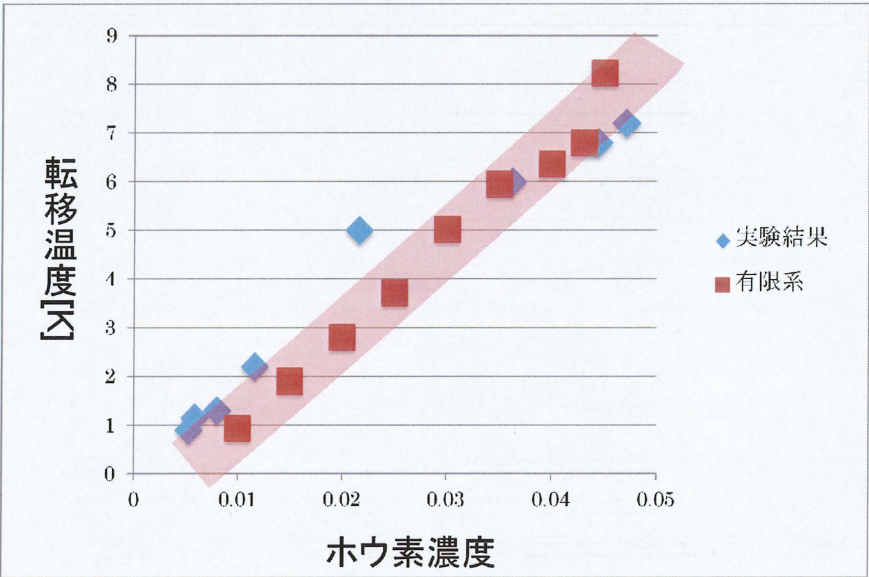
$$1 = \int_{E_F - k_B \theta_D}^{E_F + k_B \theta_D} \frac{V_0 \rho(E)}{2|E - E_F|} \tanh\left(\frac{\beta|E - E_F|}{2}\right) dE$$

V_0 は電子間の相互作用を表す。ここでは実験結果と一致するように V_0 を決定した ($V_0 = 1.043$ [eV])。

フェルミエネルギーでの状態密度の値

c	0.01	0.015	0.02	0.025	0.03	0.035	0.04	0.043	0.045
DOS [1/atom]	0.03252	0.06763	0.08842	0.10443	0.12442	0.13434	0.13815	0.13938	0.15246

図 15. 転移温度と不純物濃度の関係



4. 結論

有限系では単純立方格子の場合不純物バンドが生じフェルミ準位付近での状態密度が CPA の結果よりも大きくなった。ダイヤモンド構造の場合は不純物をドーピングしても不純物バンドは生じずバンドの変化もほとんど生じないことがわかった。この結果はスーパーセルの結果と同じで価電子バンドによる超伝導を支持している。実際のダイヤモンドは単純立方ではなくダイヤモンド構造であるためホウ素ドーピングダイヤモンドの超伝導は価電子バンドによるものであり、不純物バンドによる超伝導は単純立方格子特有の結果であることがわかった。

参考文献

- [1]E.A.Ekimov,V.A.Sidorov, E.D.Bauer, N.M.Meľnik, N.J.Curro, J.D.Thompson and S.M.Stishov et al.:Nature 428(2004) 542.
- [2]神田 久生, 角谷 均, 高圧力の科学と技術, Vol. 17, p.206 (2007) .
- [3] Moritz Hoesch. J. Mizuki SPring-8 利用者情報 /2008 年 1 月
- [4]独立行政法人物質・材料研究機構 2006 年物質材料研究アウトLOOK (2006)
- [5]T.Shirakawa, S.Horiuchi, Y.Ohta and H.Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn.,Vol. 76, No. 1 014711-1 (2007)
- [6] K.-W. Lee and W. E. Pickett Phys.Rev.B 73, 075105 (2006)
- [7]T.Yokoya, T.Nakamura, and T.Matsushita et al :Nature 438,647(2005)
- [8]R.Allen ,et al Phys.Rev B 12 , 4090 (1975)
- [9]W.A.ハリソン 著 小島 忠宣,小島 和子,山田 栄三郎 訳 固体の電子構造と物性 ―化学結合の物理― 上巻(1984)
- [10]D.J.Chadi and M.L. Cohen Phys. Stst. Sol. (b) 68,405(1975)
- [11]森正武, 二重指数関数型変換のすすめ 数理解析研究所講究録(1998),1040: 143-153
- [12]菅原清文, C/C++プログラマーのための OpenMP 並列プログラミング, カットシステム(2009)
- [13]P.パチェコ 著 秋葉博 訳 MPI 並列プログラミング, 培風館(2001)
- [14]<http://molddb.nihs.go.jp/abinitmp/MPICH2>
- [15] Jason Sanders , Edward Kandrot 著 株式会社クイープ訳 CUDA BY EXAMPLE 汎用 GPU プログラミング入門

付録

A. CPA について

2 種類の原子 A,B を c_A, c_B の割合で混ぜた置換型不規則合金を考える。A,B のランダムな配置に対して平均操作を行い一様な媒質に置き換える。この媒質はポテンシャル σ を持つ原子で構成され、もともとの合金と同一な周期的な結晶構造を持つとする。媒質中の原点の原子を A または B で置き換えたとき電子散乱が平均してゼロとなるような条件を与えて、この条件から媒質のポテンシャル σ を求める。

単一不純物に対する散乱行列 t は次のように表せる。

$$t = \frac{v_{im} - v}{1 - (v_{im} - v)F(E)}$$

$$F(E) = \frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{E - E_i}$$

ここで v_{im} は不純物のポテンシャル、 v は母体結晶のポテンシャル、 E_i は母体結晶のエネルギー固有値を表す。そのため、媒質中の原点の原子が A,B に置き換えられた場合の散乱行列は

$$t_A = \frac{v_A - \sigma}{1 - (v_A - \sigma)F(E)} \quad t_B = \frac{v_B - \sigma}{1 - (v_B - \sigma)F(E)}$$

となる。電子散乱が平均してゼロとなる条件は散乱行列の平均がゼロであるため次のように表せてこの式より媒質のポテンシャル σ を決定する。

$$c_A t_A + c_B t_B = 0$$

このような近似をコヒーレントポテンシャル近似である。

B. フーリエ型二重指数関数公式

まず、次のような積分を考える。

$$I_s = \int_0^{\infty} f(x) \sin(\omega x) dx$$

$$I_c = \int_0^{\infty} f(x) \cos(\omega x) dx$$

これらの被積分関数は振動する減衰の遅い関数である。そのため、まず被積分関数を $\phi(t)$ によって変数変換を行う。 $\phi(t)$ は次のような性質を持ち

$$\phi(-\infty) = 0, \quad \phi(\infty) = \infty$$

二重指数関数的にそれぞれの値に収束するように選ぶ。

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \phi'(t) = 0, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \phi(t) = t$$

具体的な関数 $\phi(t)$ としては次のようなものがある。

$$\phi(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2t - \alpha(1 - e^{-t}) - \beta(e^t - 1))}$$

$$\beta = \frac{1}{4}, \quad \alpha = \frac{\beta}{\sqrt{1 + M \log \frac{1+M}{4\pi}}}$$

I_s, I_c はそれぞれ次のように変数変換を行う。

$$I_s \text{ に対して } x = \frac{M}{\omega} \phi(t)$$

$$I_c \text{ に対して } x = \frac{M}{\omega} \phi\left(t - \frac{\pi}{2M}\right) \quad (M \text{ は定数})$$

I_s に対して変数変換した後台形公式用いて、

$$I_s = h \sum_{k=-N}^N \frac{M}{\omega} f\left(\frac{M}{\omega} \phi(kh)\right) \phi'(kh) \sin(M\phi(kh)) \quad (h \text{ は台形公式の刻み幅})$$

となる。 M に対して次のような関係を満たすように選ぶ。

$$Mh = \pi$$

このようにすると k が正で大きくなると

$$\sin(M\phi(kh)) \sim \sin(Mkh) = \sin(k\pi) = 0$$

が成り立つようになり、 \sin は二重指数関数的に 0 に近づいていく (I_c に対しても同様な方法で k の増加に伴い \cos は二重指数関数的に 0 に近づく)。そのため減衰の遅い被積分関数に対して精度の良い結果を得ることができる。この数値積分方法はフーリエ型の二重指数関数公式(DE 公式)と呼ばれている。

C. 並列計算

並列プログラミングの種類を大まかに分けると共有メモリ型と分散メモリ型がある。前者はマルチコアを搭載した単一マシンで使用され、後者はネットワークでつながれたマシン環境で用いられる。

共有メモリ型はメモリをプロセッサ間で共有しているためメモリを増やすことはできない。また、プロセッサ数はマシンに搭載されているプロセッサ以上に増やすことができないため性能向上が頭打ちになるという欠点があるがプログラミングは簡単に行うことができる。

分散メモリ型はそれぞれのプロセッサが独立にメモリを持ち処理を実行するため各プロセッサ間で必要なデータをやり取りしなければならないが、それぞれのプロセッサが独立なメモリを持つため大きなメモリを確保することができ、プロセッサをいくらでも増やす事が可能であるため性能の頭打ちはない。しかし、通信処理は時間がかかるためデータのやり取りをできるだけ行わないアルゴリズムを考える必要があるため一般的にプログラミングが複雑になる。

OpenMP

OpenMP は C, C++, Fortran において共有メモリ型並列処理プログラムを記述するための業界標準規格である。OpenMP の特徴は非常に簡単に並列処理用のプログラムを記述することが可能であり、構造が簡単なプログラムであれば 1 行書き加えるだけで並列処理を行わせることが可能となるためプログラミング初心者でも簡単に並列処理を実行することができる。

OpenMP を使用できる環境は VisualC++ やインテルコンパイラなどの主要なコンパイラはもちろん gcc のようなフリーのコンパイラにも対応しているため並列処理を行う環境を簡単に整えることができる。

具体的な例を次に示す。

プログラム例

(1～50000 までの和を求めるプログラム)

(C++)

(Fortran)

```
#include <iostream>
#include <omp.h>
using namespace std;
```

```
int main()
{
    int i,s;
    s=0;
    #pragma omp parallel for reduction (+:s)
        for(i=1;i<=50000;i++)
        {
            s=s+i;
        }
    cout<<s<<endl;
    return 0;
}
```

```
program main
implicit none
integer i,s
s=0
$omp parallel do reduction (+:s)
do i=1 ,50000
    s=s+i
end do
write(*,*) s
end program main
```

プログラムを見れば簡単にわかると思うが**#pragma omp parallel for reduction (+:s)** , **\$omp parallel do reduction (+:s)**を一行追加するだけで**for,do**によるループを並列化できるのである。

OpenMP によって並列化されたプログラムはまず一つのスレッド (マスタースレッド) で実行され、並列領域の位置にくると複数のスレッドを生成し並列領域を抜けると再び一つのスレッドに戻る **fork-join** 式モデルと呼ばれるモデルである。

これらのスレッドにそれぞれどのように仕事を割り振るかはいくつか種類が存在するが、重要なことはできるだけ各スレッドで仕事の量を均一にすることでスレッド間の待ち時間 (オーバーヘッド)を減らすことである。

ここで紹介した例は **for,do** に対しての並列化であるが **openmp** にはこれ以外にスレッド番号による並列化や **sections** 構文による並列化が存在する。

MPI

MPI は Message Passing Interface の略でありメッセージ交換用の通信ライブラリである。MPI は C/C++ や Fortran で分散メモリ型の並列処理を実現することができ、openmpi, MPICH2 などの実装がありフリーで利用できる。MPI による分散メモリ型並列計算は一つのプログラムを複数のプロセッサでそれぞれ走らせる。この時それぞれのプロセスには 0 から始まる非負整数の rank が割り当てられる。

割り当てられた rank によって異なる処理を行いプロセス間で通信することで並列計算を実現するものである。

C 言語

```
#include <stdio.h>
```

```
#include "mpi.h"
```

```
int main(int argc, char *argv[])
```

```
{
```

```
    int j, sum, re, i, rank, size, next, prev, message, tag;
```

```
    tag=1;
```

```
    MPI_Init(&argc, &argv);
```

```
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
```

```
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
```

```
//(C++の場合)
```

```
//MPI::Init(argc,argv);
```

```
// rank = MPI::COMM_WORLD.Get_rank();
```

```
// size = MPI::COMM_WORLD.Get_size();
```

```
sum=0;
```

```
for(i=rank+1;i<=50000;i=i+size)
```

```
{
```

```
sum=sum+i;
```

```
}
```

```
if(rank==0)
```

```
for(i=1;i<size;i++)
```

```
{
```

```
    MPI_Recv(&re, 1, MPI_INT, i, tag, MPI_COMM_WORLD, MPI_STATUS_IGNORE);
```

```

    //(C++の場合) MPI::COMM_WORLD.recv(&re,1,MPI::INT,i,tag);
sum=sum+re;
}
else
    MPI_Send(&sum, 1, MPI_INT, 0, tag, MPI_COMM_WORLD);
    //(C++の場合) MPI::COMM_WORLD.send(&sum,1,MPI::INT,0,tag);
if(rank==0)
printf("sum=%d\n",sum);
    MPI_Finalize();
    return 0;
}

```

FORTRAN

```

program main
use mpi
implicit none
integer :: i,sum, re, rank, size, tag, next, from, message, ierr
call MPI_INIT(ierr)
call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD, rank, ierr)
call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD, size, ierr)
tag = 1
sum=0
do i=rank+1,50000,size
sum=sum+i
end do
if (rank .eq. 0) then
do i=1,size-1
call MPI_RECV(re, 1, MPI_INTEGER, i, tag, MPI_COMM_WORLD,
MPI_STATUS_IGNORE, ierr)
sum=sum+re
end do
else
call MPI_SEND(sum, 1, MPI_INTEGER, 0, tag, MPI_COMM_WORLD, ierr)
endif
if (rank .eq. 0) then

```



```

write(*,*) sum
endif
call MPI_FINALIZE(ierr)
end program

```

このプログラムは 1～50000 までの和を求めるプログラムである。MPI_Send, MPI_Recv はそれぞれ送信、受信を行う関数である。今回使用した関数は最も基本的な一対一の同期通信を行っているが、非同期通信関数や集団通信関数を用いることで性能を向上させることができる。

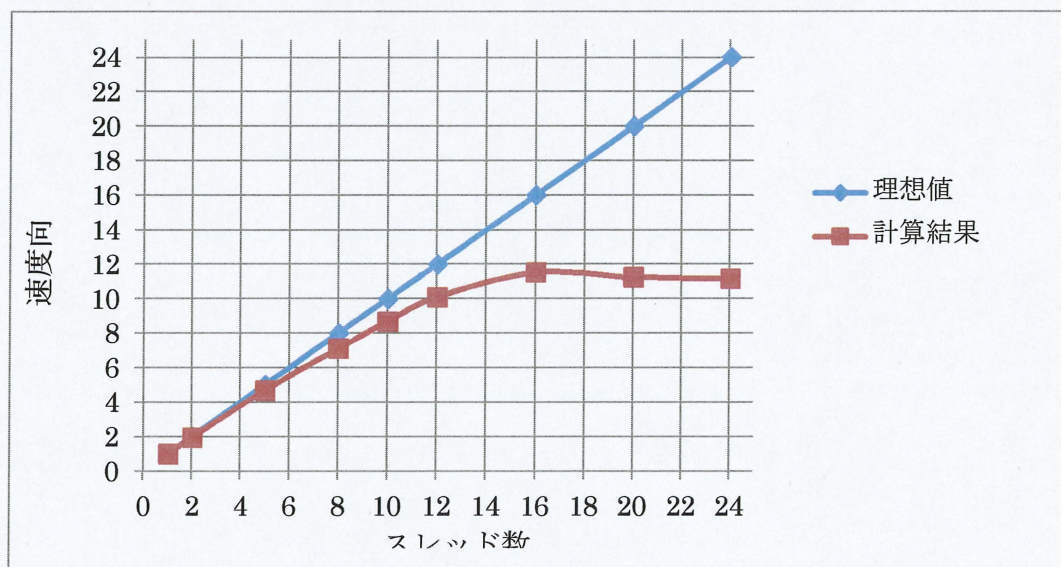
並列化による性能向上を調べるために次のような積分方程式を Picard 法によって解く。右辺第 2 項の積分はガウス求積法により行う(分点数は $(z, \theta, \phi)=(64, 16, 16)$)。Picard 法の逐次代入は 600 回行った。

$$\log f(z, \theta, \phi) = C - \int' g(z, \theta, \phi, z', \theta', \phi') f(z', \theta', \phi') dz' d\theta' d\phi'$$

速度向上比は (非並列での時間)/(並列での時間) で表す。

OS が認識しているコア数が 24 であったため 24 スレッドまで計算を行う。Intel Xeon E5650 を使用。OpenMP による結果は速度向上比がほぼ 12 で頭打ちとなり 16 以上にスレッド数を増やすと処理時間が増加している。

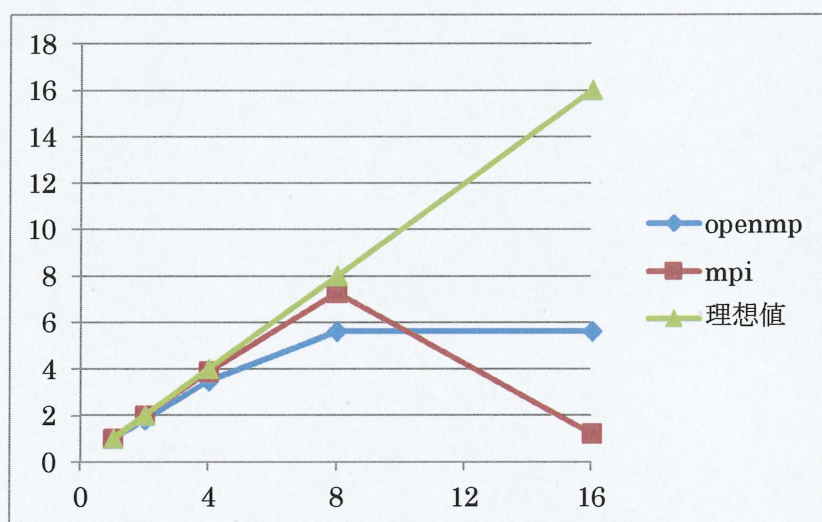
スレッド数が少ない領域では同期処理によるオーバーヘッドによって理想的な台数効果からずれる原因である。処理時間が増加した原因はハイパースレッディングを有効にしているためである。ハイパースレッディングは一つの CPU コアに 2 つの処理を行わせることで処理時間の短縮を行うものであるが、処理を行っているコアの利用していない部分を利用して処理を行うため CPU の性能をフルに使用する処理の場合効果を得ることができないのに加え、オーバーヘッドが大きくなるため処理時間が増大した。



次はハイパースレッディングが使用されていない環境で計算を行う。OS が認識しているコア数は8であるが2台のマシンを使用するためMPIは16プロセスまで計算を行う。CPUはIntel Xeon E5607。

単体マシンでは openmp よりも mpi による並列化のほうが高速であることがわかる。一般的に mpi による並列化は openmp よりも高速である。

同一マシン内での通信は高速に行われるが異なるマシン間では通信コストが大きくなるため性能が低下している。通信コストを減少させるためには通信回数、送信データが少ないアルゴリズムの採用や効率の良いネットワークを構築(今回の環境は Ethernet による通信であるがこれを Gigabit Ethernet や Infini Band に変更することで通信コストを減らすことができる)等の方法がある。



CUDA

CUDAはNVIDIA社が提供しているGPUを用いた並列コンピューティング統合開発環境である。そのためCUDAはNVIDIA社が提供している特定のGPUでしか性能が発揮できない(エミュレーションモードが存在するためCUDAに対応していないGPUに対しても開発、実行はできる)。

CUDAによるプログラミングはC言語をベースにGPUで処理することを明示した関数を記述するだけで計算を行うことができる。例を次に示す。

```
#include <stdio.h>
const int N=50000;
const int NB=1;
const int Nth=512;
__global__ void add(int *sum)
{
```



```

int myid,i,thid;
myid=threadIdx.x+blockIdx.x*blockDim.x;
thid=threadIdx.x;
for(i=myid;i<N;i=i+NB*Nth)
{
sum[myid]=sum[myid]+(i+1);
}
for(i=Nth/2;i!=0;i=i/2)
{
__syncthreads();
if(thid<i)
sum[thid+blockIdx.x*blockDim.x]=sum[thid+blockIdx.x*blockDim.x]+sum[thid+i+blockIdx.x*b
lockDim.x];
}
}
int main()
{
int i, size;
int sum[Nth*NB];
int *sumd;
size =Nth*NB*sizeof(int);
cudaMalloc((void**)&sumd, size);
for(i=0;i<Nth*NB;i++)
{
sum[i]=0;
}
cudaMemcpy(sumd, sum, size, cudaMemcpyHostToDevice);
add<<<NB,Nth>>>(sumd);
cudaMemcpy(sum, sumd, size, cudaMemcpyDeviceToHost);
for(i=1;i<NB;i=i++)
{
sum[0]=sum[0]+sum[i*Nth];
}
printf("%d  ¥n",sum[0]);
cudaFree(sumd);
}

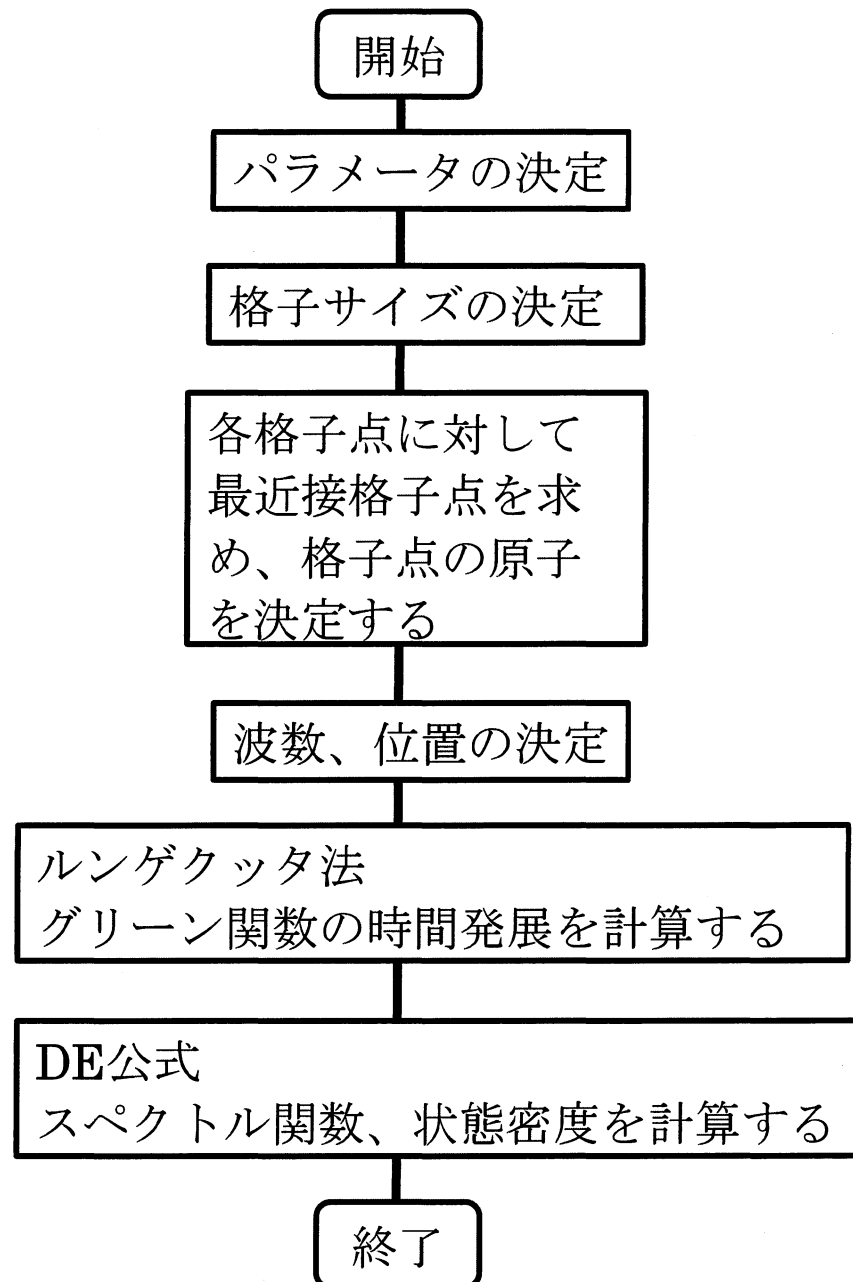
```

`add<<<NB,Nth>>>(sumd)`はGPUで処理する関数でNBはブロック数、Nthはスレッド数を表す。CUDAは指定した数のブロックにスレッドを作成してそれぞれのスレッドで処理を行いホストに処理結果をデバイス(GPU)側からコピーする。あらかじめデータが必要な場合はホストからデバイスへコピーを行う。(ホスト-デバイス間のデータのやり取りは`cudaMemcpy`を使用する。)

CUDAはC言語をベースにしているがFortranによるCUDA Fortranも存在する。

D. プログラム

フローチャート



```

#include <iostream>
#include <fstream>
#include <math.h>
#include <complex>
#include <omp.h>

```

```

const unsigned long ranmax=184467440734317056;
const double PI=3.141592653589793;
const double hber=1.0;
const double Emax=25.0025;
const double a=3.56;
const int NR=150;

```

```

//约束因子 q
const double q=0.1;
const int inte_T=5200;

```

```

using namespace std;

```

```

double naiseki(double k[],double R[])
{
    int i;
    double kR;
    kR=0;
    for(i=0;i<=2;i++)
    {
        kR=kR+k[i]*R[i];
    }
    return kR;
}

```

```

double Pij(double x,double A[],double B [],int i,int j)
{
    if(j==0)
    return A[i];
    j=j-1;
}

```

```

return (Pij(x,A,B,i-1,j))*(B[i]-x)-Pij(x,A,B,i,j)*(B[i-j-1]-x))/(B[i]-B[i-j-1]);
}

```

```

unsigned long xor128(){
    static unsigned long x=123456789,y=362436069,z=521288629,w=88675123;
    unsigned long t;
    t=(x^(x<<11));x=y;y=z;z=w;
    return( w=(w^(w>>19))^(t^(t>>8)) );
}

```

```

double DEphy(double t,double M)
{
    double a,B;

    B=0.25;
    a=B/sqrt(1+M*log((1+M)/4.0/PI));

    if(t==0)
        return 1.0/(2.0+a+B);
    return t/(1.0-exp(-2.0*t-a*(1-exp(-t))-B*(exp(t)-1)));
}

```

```

double dDEphy (double t,double M)
{
    double a,B;

    B=0.25;
    a=B/sqrt(1+M*log((1+M)/4.0/PI));

    if(t==0)
        return (4.0+a*a+3.0*B+B*B+a*(5.0+2.0*B))/(2.0*(2.0+a+B)*(2.0+a+B));

    return 1.0/(1.0-exp(-2.0*t-a*(1-exp(-t))-B*(exp(t)-1)))+
        exp(-2.0*t-a*(1-exp(-t))-B*(exp(t)-1))*(-2.0-a*exp(-t)-B*exp(t))*t
}

```



```

/(1-exp(-2.0*t-a*(1-exp(-t))-B*(exp(t)-1)))/(1-exp(-2.0*t-a*(1-exp(-t))-B*(exp(t)-1)));
}

double Eva()
{

ofstream fout("diaDOSC=005.dat");
ofstream fout1("dosC.dat");
ofstream fout2("dosB.dat");

fout.precision(12);
fout1.precision(12);
fout2.precision(12);

int
Br[NR*NR*NR][3],mp,near_x[NR][NR][NR][4],near_y[NR][NR][NR][4],near_z[NR][NR][NR][4],sic
,kk,jj,x,y,z,m,o,ra,n,kx,ky,dim_x,dim_y,dim_z,atom,ii,imp;

double
V2s1pc,V1s2pc,h,W,N,M,AR[5],ARB[5],FR,AI[5],AIB[5],B[5],Fl,aaa,xsin,xcos,FRsin,FRcos,Flsin
,Flcos,FRsinB,FRcosB,FlsinB,FlcosB,DE,rungew[5],Vssc,Vspc,Vppc,Vppp,E,T,Tstep,phase[NR
][NR][NR][4],AAA,Vss,V1s2p,V2s1p,Vxx,Vxy,Vxz,R[NR][NR][NR][4],A,AB,NH,DOS[50000],DOS
B[50000],CEs,CEpx,CEpy,CEpz,BEs,BEpx,BEpy,BEpz,rrr[NR][NR][NR][3],k[NR][NR][NR][3],c;

complex<double>
SSA,S,SSAB,SB,rungek[NR][NR][NR][5][4],Gi[NR][NR][NR][3][4],i,Gn[NR][NR][NR][2][4],G_all[i
nte_T+10][4],G_allB[inte_T+10][4],G_sinp,GE_kidou,V[4][4];

i=complex<double>(0,1);
n=20000;

Tstep=0.05;

//不純物濃度
c=0.0;

```

//飛び移り・原子エネルギー

Vss=-15.2;

V1s2p=10.25;

V2s1p=V1s2p;

Vxx=3.0;

Vxy=8.30;

Vxz=Vxy;

BEs= -0.57;

BEpx= 5.33;

BEpy= BEpx;

BEpz= BEpx;

CEs= (-5.55);

CEpx= (3.0);

CEpy= CEpx;

CEpz= CEpx;

V[0][0]=Vss;

V[0][1]=V1s2p;

V[0][2]=V1s2p;

V[0][3]=V1s2p;

V[1][0]=V2s1p;

V[1][1]=Vxx;

V[1][2]=Vxy;

V[1][3]=Vxy;

V[2][0]=V2s1p;

V[2][1]=Vxy;

V[2][2]=Vxx;

V[2][3]=Vxy;

V[3][0]=V2s1p;

V[3][1]=Vxy;

V[3][2]=Vxy;

```
V[3][3]=Vxx;
```

```
atom=0;
```

```
for(m=0;m<50000;m++)
```

```
{
```

```
DOS[m]=0;
```

```
DOSB[m]=0;
```

```
}
```

```
for(sic=0;sic<=1;sic++)
```

```
{
```

```
for(ky=0;ky<1;ky++)
```

```
{
```

```
//有限系の大きさ
```

```
dim_x=53+ky*3;
```

```
dim_y=50+ky*2;
```

```
dim_z=52+ky*4;
```

```
for(kx=0;kx<=0;kx++)
```

```
{
```

```
atom=atom+1;
```

```
ra=1;
```

```
NH=0;
```

```
imp=0;
```

```
//最近接の計算
```

```
for(x=1;x<=dim_x;x++)
```

```
{
```

```
for(y=1;y<=dim_y;y++)
```

```
{
```

```
for(z=1;z<=dim_z;z++)
```

```
{
```

```
rungek[x][y][z][0][0]=0.0;
```



```

rungek[x][y][z][0][1]=0.0;
rungek[x][y][z][0][2]=0.0;
rungek[x][y][z][0][3]=0.0;

```

```

if(z%4==1)
{
if(y%2==1)
{

near_x[x][y][z][0]=x; near_y[x][y][z][0]=y; near_z[x][y][z][0]=z+1;

near_x[x][y][z][1]=x-1; near_y[x][y][z][1]=y-1; near_z[x][y][z][1]=z+1;

near_x[x][y][z][2]=x; near_y[x][y][z][2]=y-1; near_z[x][y][z][2]=z-1;

near_x[x][y][z][3]=x-1; near_y[x][y][z][3]=y; near_z[x][y][z][3]=z-1;

if(x==1)
{
near_x[x][y][z][1]=dim_x;
near_x[x][y][z][3]=dim_x;
}

if(y==1)
{
near_y[x][y][z][1]=dim_y;
near_y[x][y][z][2]=dim_y;
}

if(z==dim_z)
{
near_z[x][y][z][0]=1;
near_z[x][y][z][1]=1;
}
if(z==1)
{

```

```

        near_z[x][y][z][2]=dim_z;
        near_z[x][y][z][3]=dim_z;
    }
}
else
{
    near_x[x][y][z][0]=x; near_y[x][y][z][0]=y-1; near_z[x][y][z][0]=z+1;

    near_x[x][y][z][1]=x; near_y[x][y][z][1]=y; near_z[x][y][z][1]=z+1;

    near_x[x][y][z][2]=x; near_y[x][y][z][2]=y-1; near_z[x][y][z][2]=z-1;

    near_x[x][y][z][3]=x; near_y[x][y][z][3]=y; near_z[x][y][z][3]=z-1;

    if(y==1)
    {
        near_y[x][y][z][0]=dim_y;
        near_y[x][y][z][2]=dim_y;
    }

    if(z==dim_z)
    {
        near_z[x][y][z][0]=1;
        near_z[x][y][z][1]=1;
    }
    if(z==1)
    {
        near_z[x][y][z][2]=dim_z;
        near_z[x][y][z][3]=dim_z;
    }
}

}

}

if(z%4==2)

```

```

{

if(y%2==1)
{
    near_x[x][y][z][0]=x; near_y[x][y][z][0]=y; near_z[x][y][z][0]=z+1;

    near_x[x][y][z][1]=x; near_y[x][y][z][1]=y+1; near_z[x][y][z][1]=z+1;

    near_x[x][y][z][2]=x; near_y[x][y][z][2]=y; near_z[x][y][z][2]=z-1;

    near_x[x][y][z][3]=x; near_y[x][y][z][3]=y+1; near_z[x][y][z][3]=z-1;

    if(y==dim_y)
    {
        near_y[x][y][z][1]=1;
        near_y[x][y][z][3]=1;
    }

    if(z==dim_z)
    {
        near_z[x][y][z][0]=1;
        near_z[x][y][z][1]=1;
    }
    if(z==1)
    {
        near_z[x][y][z][2]=dim_z;
        near_z[x][y][z][3]=dim_z;
    }
}

else
{
    near_x[x][y][z][0]=x+1; near_y[x][y][z][0]=y; near_z[x][y][z][0]=z+1;

    near_x[x][y][z][1]=x; near_y[x][y][z][1]=y+1; near_z[x][y][z][1]=z+1;

    near_x[x][y][z][2]=x; near_y[x][y][z][2]=y; near_z[x][y][z][2]=z-1;

```



```

near_x[x][y][z][3]=x+1; near_y[x][y][z][3]=y+1; near_z[x][y][z][3]=z-1;

if(x==dim_x)
{
near_x[x][y][z][0]=1;
near_x[x][y][z][3]=1;
}
if(y==dim_y)
{
near_y[x][y][z][1]=1;
near_y[x][y][z][3]=1;
}

if(z==dim_z)
{
near_z[x][y][z][0]=1;
near_z[x][y][z][1]=1;
}
if(z==1)
{
near_z[x][y][z][2]=dim_z;
near_z[x][y][z][3]=dim_z;
}

}
}

if(z%4==3)
{

if(y%2==1)
{

near_x[x][y][z][0]=x; near_y[x][y][z][0]=y; near_z[x][y][z][0]=z+1;

near_x[x][y][z][1]=x; near_y[x][y][z][1]=y-1; near_z[x][y][z][1]=z+1;

```

```

near_x[x][y][z][2]=x; near_y[x][y][z][2]=y; near_z[x][y][z][2]=z-1;

near_x[x][y][z][3]=x; near_y[x][y][z][3]=y-1; near_z[x][y][z][3]=z-1;

if(y==1)
{
near_y[x][y][z][1]=dim_y;
near_y[x][y][z][3]=dim_y;
}

if(z==dim_z)
{
near_z[x][y][z][0]=1;
near_z[x][y][z][1]=1;
}
if(z==1)
{
near_z[x][y][z][2]=dim_z;
near_z[x][y][z][3]=dim_z;
}

}

else
{

near_x[x][y][z][0]=x; near_y[x][y][z][0]=y; near_z[x][y][z][0]=z+1;

near_x[x][y][z][1]=x-1; near_y[x][y][z][1]=y-1; near_z[x][y][z][1]=z+1;

near_x[x][y][z][2]=x; near_y[x][y][z][2]=y-1; near_z[x][y][z][2]=z-1;

near_x[x][y][z][3]=x-1; near_y[x][y][z][3]=y; near_z[x][y][z][3]=z-1;

if(x==1)
{

```

```

near_x[x][y][z][1]=dim_x;
near_x[x][y][z][3]=dim_x;
}

if(y==1)
{
near_y[x][y][z][1]=dim_y;
near_y[x][y][z][2]=dim_y;
}

if(z==dim_z)
{
near_z[x][y][z][0]=1;
near_z[x][y][z][1]=1;
}
if(z==1)
{
near_z[x][y][z][2]=dim_z;
near_z[x][y][z][3]=dim_z;
}
}

}

if(z%4==0)
{

if(y%2==1)
{

near_x[x][y][z][0]=x; near_y[x][y][z][0]=y+1; near_z[x][y][z][0]=z+1;

near_x[x][y][z][1]=x+1; near_y[x][y][z][1]=y; near_z[x][y][z][1]=z+1;

near_x[x][y][z][2]=x; near_y[x][y][z][2]=y; near_z[x][y][z][2]=z-1;

near_x[x][y][z][3]=x+1; near_y[x][y][z][3]=y+1; near_z[x][y][z][3]=z-1;

```



```

    if(x==dim_x)
    {
        near_x[x][y][z][1]=1;
        near_x[x][y][z][3]=1;
    }

    if(y==dim_y)
    {
        near_y[x][y][z][0]=1;
        near_y[x][y][z][3]=1;
    }

    if(z==dim_z)
    {
        near_z[x][y][z][0]=1;
        near_z[x][y][z][1]=1;
    }
    if(z==1)
    {
        near_z[x][y][z][2]=dim_z;
        near_z[x][y][z][3]=dim_z;
    }
}

else
{
    near_x[x][y][z][0]=x; near_y[x][y][z][0]=y; near_z[x][y][z][0]=z+1;

    near_x[x][y][z][1]=x; near_y[x][y][z][1]=y+1; near_z[x][y][z][1]=z+1;

    near_x[x][y][z][2]=x; near_y[x][y][z][2]=y; near_z[x][y][z][2]=z-1;

    near_x[x][y][z][3]=x; near_y[x][y][z][3]=y+1; near_z[x][y][z][3]=z-1;

    if(y==dim_y)

```

```

        {
            near_y[x][y][z][1]=1;
            near_y[x][y][z][3]=1;
        }

        if(z==dim_z)
        {
            near_z[x][y][z][0]=1;
            near_z[x][y][z][1]=1;
        }
        if(z==1)
        {
            near_z[x][y][z][2]=dim_z;
            near_z[x][y][z][3]=dim_z;
        }
    }
}

NH=NH+1;
//格子点での原子を指定
if(c>(double)(xor128)%ranmax)/(double)ranmax)
{
    R[x][y][z][0]=BEs;
    R[x][y][z][1]=BEpx;
    R[x][y][z][2]=BEpy;
    R[x][y][z][3]=BEpz;

    Br[imp][0]=x;
    Br[imp][1]=y;
    Br[imp][2]=z;

    imp=imp+1;

}
else

```

```

        {
            R[x][y][z][0]=CEs;
            R[x][y][z][1]=CEpx;
            R[x][y][z][2]=CEpy;
            R[x][y][z][3]=CEpz;
        }
    }
}

cout<<"imp="<<imp/NH<<endl;

        E=-Emax;

ra=0;

//位置、波数の計算
    for(x=1;x<=dim_x;x++)
    {
        for(y=1;y<=dim_y;y++)
        {
            for(z=1;z<=dim_z;z++)
            {

rrr[x][y][z][2]=a/4.0*(double)(z-1);

if(z%4==1)
{

            if(y%2==1)
            {
                rrr[x][y][z][0]=(double)(x-1)*a;
                rrr[x][y][z][1]=(double)(y-1)*a/2.0;
            }
            else

```



```

    {
        rrr[x][y][z][0]=(double)(x-1)*a+a/2.0;
        rrr[x][y][z][1]=(double)(y-1)*a/2.0;
    }

}

if(z%4==2)
{

    if(y%2==1)
    {
        rrr[x][y][z][0]=(double)(x-1)*a+a/4.0;
        rrr[x][y][z][1]=(double)(y-1)/2.0*a+a/4.0;
    }
    else
    {
        rrr[x][y][z][0]=(double)(x-1)*a+a*3.0/4.0;
        rrr[x][y][z][1]=(double)(y-1)*a/2.0+a/4.0;
    }

}

if(z%4==3)
{

    if(y%2==1)
    {
        rrr[x][y][z][0]=(double)(x-1)*a+a/2.0;
        rrr[x][y][z][1]=(double)(y-1)*a/2.0;
    }
    else
    {

```

```

        rrr[x][y][z][0]=(double)(x-1)*a;
        rrr[x][y][z][1]=(double)(y-1)*a/2.0;
    }

}

if(z%4==0)
{

    if(y%2==1)
    {
        rrr[x][y][z][0]=(double)(x-1)*a+a*3.0/4.0;
        rrr[x][y][z][1]=(double)(y-1)*a/2.0+a/4.0;
    }
    else
    {
        rrr[x][y][z][0]=(double)(x-1)*a+a/4.0;
        rrr[x][y][z][1]=(double)(y-1)*a/2.0+a/4.0;
    }

}

for(ii=0;ii<=3;ii++)
    {

/*
//x
k[x][y][z][0]=(xor128()/ranmax-0.5)*4.0*PI/a;
//y
if(fabs(k[x][y][z][0])<=PI/a)
k[x][y][z][1]=(xor128()/ranmax-0.5)*4.0*PI/a;
else
k[x][y][z][1]=(xor128()/ranmax-0.5)*2.0*(3.0*PI/a-fabs(k[x][y][z][0]));
//z

```

```

if( fabs(k[x][y][z][0])>PI/a )
{
k[x][y][z][2]=(3.0*PI/a-fabs(k[x][y][z][0])-fabs(k[x][y][z][1]) )*(xor128()/ranmax-0.5)*2.0;
}
else if ( fabs(k[x][y][z][1])>PI/a )
{
k[x][y][z][2]=(3.0*PI/a-fabs(k[x][y][z][0])-fabs(k[x][y][z][1]))*(xor128()/ranmax-0.5)*2.0;
}
else
{
if(fabs(k[x][y][z][1])<(-fabs(k[x][y][z][0])+PI/a))
k[x][y][z][2]=(xor128()/ranmax-0.5)*4.0*PI/a;
else
k[x][y][z][2]=(3.0*PI/a-fabs(k[x][y][z][0])-fabs(k[x][y][z][1]))*(xor128()/ranmax-0.5)*2.0;
}
*/

//k[x][y][z][0]=((double)(xor128()%ranmax)/(double)ranmax-0.5)*4.0*PI/a;
//k[x][y][z][1]=((double)(xor128()%ranmax)/(double)ranmax-0.5)*4.0*PI/a;
//k[x][y][z][2]=((double)(xor128()%ranmax)/(double)ranmax-0.5)*4.0*PI/a;

//L点
//k[x][y][z][0]=PI/a;
//k[x][y][z][1]=PI/a;
//k[x][y][z][2]=PI/a;

//Γ点
k[x][y][z][0]=0.0;
k[x][y][z][1]=0.0;
k[x][y][z][2]=0.0;

//X点
//k[x][y][z][0]=0;
//k[x][y][z][1]=0;
//k[x][y][z][2]=PI/a*2.0;
//

```



```

phase[x][y][z][0]=naiseki(k[x][y][z],rrr[x][y][z]);
Gi[x][y][z][1][0]=(-i*exp(i*phase[x][y][z][0])/NH);
        }
    }
}

rungew[0]=1.0;
rungew[1]=0.5*Tstep;
rungew[2]=0.5*Tstep;
rungew[3]=1.0*Tstep;

for(ii=0;ii<=3;ii++)
    {
G_all[0][ii]=complex<double>(0,-1.0);
    }
for(ii=0;ii<=3;ii++)
    {
G_allB[0][ii]=complex<double>(0,-1.0*( (double)imp/(double)NH ));
    }

//ルンゲクッタ法
for(m=1;m<=inte_T;m++)
{

    for(ii=0;ii<=3;ii++)
    {
G_all[m][ii]=complex<double>(0,0);
G_allB[m][ii]=complex<double>(0,0);
    }

T=m*Tstep;

for(kk=1;kk<=4;kk++)
{

```

```

#pragma omp parallel
{
    #pragma omp for schedule(auto) private(x,y,z,ii,T,GE_kidou)
        for(x=1;x<=dim_x;x++)
        {
            for(y=1;y<=dim_y;y++)
            {
                for(z=1;z<=dim_z;z++)
                {

for(ii=0;ii<=3;ii++)
{

                Gn[x][y][z][1][ii]=0;

if(z%4==1)
{

if(y%2==1)
{

//// 1

if(ii==0)
{
//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0]

);

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

```



```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==1)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)* (1.0)*V[ii][0]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

```

```

[1][0]
                                +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
                                -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]

```

```

+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

```

```

if(ii==2)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)*(1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

    -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

    -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0]);

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

```

```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);
//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
                    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
                    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
                    +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2]);
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
                        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
                        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
                        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

```



```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==3)
{
//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(-1.0)*(1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0]);

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]]

```

[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(1.0)*V[ii][2]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]

-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][2]

-Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][2]

+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];

//pz軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

V[ii][3]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][3]

```
+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}
```

}

else

{

// 2

if(ii==0)

{

//s軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][1][0]

+Gi[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]]

[1][0]

+Gi[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]]

[1][0]

+Gi[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]]

[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0]);

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][2]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

```

```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==1)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)* (1.0)*V[ii][0]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

```



```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
    -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
    -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][3]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==2)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)* (1.0)*V[ii][0]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

```

```

[1][0]
                                -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
                                +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
                        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
                        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
                        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]

```

```

+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][3]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

-runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}
if(ii==3)
{

```

//s軌道

```
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)*(1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
    -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
    -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]
```

```
+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];
```

//px軌道

```
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
    -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]
```

```
-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]
```



```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);
//py軌道
Gn[x][y][z][1][iij]=Gn[x][y][z][1][iij]+
(1.0)*V[iij][2]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2]);
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][iij]=Gn[x][y][z][1][iij]+
V[iij][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3]);
}

}

}

if(z%4==2)
{

if(y%2==1)
{
// 3

if(ii==0)
{
//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0]);

//px軌道

```

```

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)*(1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]]
[1][1]
                                +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
                                +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
                                -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];
//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)*(1.0)*V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
                                -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
                                +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
                                -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];

```

//pz軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(-1.0)*(1.0)*V[ii][3]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]]

[1][3]

-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];

}

if(ii==1)

{

//s軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(1.0)*V[ii][0]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]

+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][0]

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][0]

-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][2]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
                        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
                        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
                        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

```

```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][3]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==2)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]

```



```

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

-runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0]);

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

-runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

```

```

[1][2]
                                +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
                                +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungeew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungeew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungeew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungeew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][3]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
                                -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
                                +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
                                -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungeew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungeew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungeew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungeew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}
if(ii==3)
{

```

//s軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(1.0)*V[ii][0]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][0]

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][0]

+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(1.0)*V[ii][1]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][1]

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][1]

-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);
//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][2]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
    -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2]);
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][iii]=Gn[x][y][z][1][iii]+
    V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
    +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3]);
}

}
else
{

// 4

if(ii==0)
{
//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0]);

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(-1.0)*(1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]]

```

```

[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];
//py軌道
Gn[x][y][z][1][iij]=Gn[x][y][z][1][iij]+
(-1.0)* (1.0)*V[iij][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2]
);
//pz軌道

```



```

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)*(1.0)*V[ii][3]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

    -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

    -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3]);
}

if(ii==1)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][0]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

    -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][2]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
    -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
    +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

```

```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][3]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==2)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]

```

```

-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

```

//px軌道

```

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

```

//py軌道

```

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

```

```

[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}
if(ii==3)
{

//s軌道

```

```

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][0]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungek[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+rungek[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungek[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungek[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

```


//py軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(1.0)*V[ii][2]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][2]

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][2]

-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];

//pz軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

V[ii][3]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];

```
}
```

```
}
```

```
}
```

```
if(z%4==3)
```

```
{
```

```
if(y%2==1)
```

```
{
```

```
// 5
```

```
if(ii==0)
```

```
{
```

```
//s軌道
```

```
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
```

```
    V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
```

```
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
```

```
[1][0]
```

```
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
```

```
[1][0]
```

```
        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
```

```
[1][0]
```

```
+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]
```

```
+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]
```

```
+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]
```

```
+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];
```

//px軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(1.0)*V[ii][1]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]
-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]
-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]
+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(1.0)*V[ii][2]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]
-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]
+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

```

        -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2]);
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

    -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

    -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==1)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)* (1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

```

```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
                    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
                    -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
                    -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==2)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)* (1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

```

```

[1][0]
                                -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

                                -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

                                +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

                                -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
                                (1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
                                +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
                                -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
                                -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

                                +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

                                +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

                                -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

                                -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
                                V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
                                +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]

```



```

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}
if(ii==3)
{

//s軌道

```

```
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)*(1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]
```

```
+runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

-runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0]);
```

//px軌道

```
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

-runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+runge[w[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);
```

//py軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(1.0)*V[ii][2]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]

-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][2]

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][2]

-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];

//pz軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

V[ii][3]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];

```

}

}
else
{

if(ii==0)
{
//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
      V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
      +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
      +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
      +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

      +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

      +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

      +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

      +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
      (1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
      -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
      +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
      -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

```

[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(1.0)*V[ii][2]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]

-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][2]

-Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][2]

+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];

//pz軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

(1.0)*V[ii][3]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][3]

-Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][3]

-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][3]

```
+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==1)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)*(1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
```

```

V[i][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
               +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
               +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
               +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);
//py軌道
Gn[x][y][z][1][i]=Gn[x][y][z][1][i]+
(1.0)*V[i][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
                     +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
                     -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
                     -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][i]=Gn[x][y][z][1][i]+

```



```

(1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
                        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
                        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
                        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==2)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(-1.0)* (1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
                        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
                        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
                        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

```

```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}
if(ii==3)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)* (1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
        -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

```

//px軌道

```

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

```

//py軌道

```

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

```

[1][2]

+runglew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-runglew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

-runglew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+runglew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];

//pz軌道

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+

V[ii][3]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

[1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

[1][3]

+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][3]

+runglew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+runglew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+runglew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+runglew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];

}

}

}

```

if(z%4==0)
{

if(y%2==1)
{

// 7

if(ii==0)
{
//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(-1.0)*(1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

```

```

[1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]

[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);
//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(-1.0)* (1.0)*V[ii][2]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2]);
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(-1.0)* (1.0)*V[ii][3]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]]
[1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

```

```

[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==1)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+runge[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

```



```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0]);

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
                    +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][2]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
                        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
                        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
                        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2]);
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
    -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
    -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==2)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][0]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
    -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

```

```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

```

//px軌道

```

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
                        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
                        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
                        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

```

```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

```

//py軌道

```

Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
                  +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
                  +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
                  +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][3]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}
if(ii==3)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][0]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]

```

```

+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]

+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]

```

```

[1][2]
                                +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
                                -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2]);
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
                                +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
                                +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
                                +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3]);
}
}
else
{

```

```

// 8
if(ii==0)
{
//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
    +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

    +rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0]);

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (-1.0)* (1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]]
[1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
    -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

    -rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];
//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(-1.0)*(1.0)*V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(-1.0)* (1.0)*V[ii][3]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]]
[1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

```



```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==1)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][0]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
V[ii][1]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]

```

```

[1][1]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);
//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][2]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2]);
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][3]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]

```

```

[1][3]
                                -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}

if(ii==2)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][0]/4.0*(Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
                                -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
                                +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
                                -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

```

```

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
                        -Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
                        +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
                        +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1]);
//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][2]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
                  +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
                  +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
                  +Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2]);
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][3]/4.0*( Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][3]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][3]
-Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}
if(ii==3)
{

//s軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
(1.0)*V[ii][0]/4.0*(-Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][0]
-Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][0]
+Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][0]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][0]

```

```

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][0]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][0];

//px軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][1]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][1]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][1]
    -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][1]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][1]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][1];

//py軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    (1.0)*V[ii][2]/4.0*( -Gi[near_x[x][y][z][0]] [near_y[x][y][z][0]] [near_z[x][y][z][0]] [1][2]
    +Gi[near_x[x][y][z][1]] [near_y[x][y][z][1]] [near_z[x][y][z][1]]
[1][2]
    +Gi[near_x[x][y][z][2]] [near_y[x][y][z][2]] [near_z[x][y][z][2]]
[1][2]
    -Gi[near_x[x][y][z][3]] [near_y[x][y][z][3]] [near_z[x][y][z][3]]
[1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][2]

```

```

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][2]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][2]

-rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][2];
//pz軌道
Gn[x][y][z][1][ii]=Gn[x][y][z][1][ii]+
    V[ii][3]/4.0*(
        Gi[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]]
        [1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]]
        [1][3]
        +Gi[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]]
        [1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][0]][near_y[x][y][z][0]][near_z[x][y][z][0]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][1]][near_y[x][y][z][1]][near_z[x][y][z][1]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][2]][near_y[x][y][z][2]][near_z[x][y][z][2]][kk-1][3]

+rungew[kk-1]*rungek[near_x[x][y][z][3]][near_y[x][y][z][3]][near_z[x][y][z][3]][kk-1][3];
}
}

}

if(sic==1)
Gn[x][y][z][1][ii]=-Gn[x][y][z][1][ii];
if(kk==1)
rungek[x][y][z][kk][ii]=(Gn[x][y][z][1][ii]+R[x][y][z][ii]*Gi[x][y][z][1][ii])/i/hber;
if(kk==2)
rungek[x][y][z][kk][ii]=(Gn[x][y][z][1][ii]+R[x][y][z][ii]*(Gi[x][y][z][1][ii]+rungek[x][y][z][kk-1][ii]*Tstep*
0.5))/i/hber;

```

```

if(kk==3)
rungek[x][y][z][kk][ii]=(Gn[x][y][z][1][ii]+R[x][y][z][ii]*(Gi[x][y][z][1][ii]+rungek[x][y][z][kk-1][ii]*Tstep*
0.5))/i/hber;
if(kk==4)
rungek[x][y][z][kk][ii]=(Gn[x][y][z][1][ii]+R[x][y][z][ii]*(Gi[x][y][z][1][ii]+rungek[x][y][z][kk-1][ii]*Tstep)
)/i/hber;
    }
    }
    }
}

} //並列領域

} //k領域(runngekutta )

#pragma omp parallel for schedule(auto) private (x,y,z,ii)
for(x=1;x<=dim_x;x++)
{
    for(y=1;y<=dim_y;y++)
    {
        for(z=1;z<=dim_z;z++)
        {
            for(ii=0;ii<=3;ii++)
            {
Gi[x][y][z][2][ii]=Gi[x][y][z][1][ii]+(rungek[x][y][z][1][ii]+2.0*rungek[x][y][z][2][ii]+2.0*rungek[x][y][z][3
][ii]+rungek[x][y][z][4][ii])/6.0*Tstep;
            }
        }
    }

    for(x=1;x<=dim_x;x++)
    {
        for(y=1;y<=dim_y;y++)
        {
            for(z=1;z<=dim_z;z++)
            {

```



```

        for(ii=0;ii<=3;ii++)
        {
            G_all[m][ii]=G_all[m][ii]+exp(-i*phase[x][y][z][ii])*Gi[x][y][z][2][ii];
        }}}

        for(z=0;z<imp;z++)
        {
            for(ii=0;ii<=3;ii++)
            {

G_allB[m][ii]=G_allB[m][ii]+exp(-i*phase[ Br[z][0] ][ Br[z][1] ][ Br[z][2] ][ii])*Gi[ Br[z][0] ][ Br[z][1] ][
Br[z][2] ][2][ii];
            }}

#pragma omp parallel for schedule(auto) private (x,y,z,ii)
        for(x=1;x<=dim_x;x++)
        {
            for(y=1;y<=dim_y;y++)
            {
                for(z=1;z<=dim_z;z++)
                {
                    for(ii=0;ii<=3;ii++)

{
                Gi[x][y][z][1][ii]=Gi[x][y][z][2][ii];
            }

        }

    }

}

for(m=0;m<=inte_T;m++)
{
    T=m*Tstep;
    for(ii=1;ii<=3;ii++)
    {

```

```

G_all[m][0]=G_all[m][0]+G_all[m][ii];
G_allB[m][0]=G_allB[m][0]+G_allB[m][ii];
    }
}

aaa=0;
E=-Emax;
mp=0;

#pragma omp parallel for schedule(auto) private
(E,o,W,SB,S,z,y,DE,ii,xsin,xcos,m,T,AR,AI,ARB,AIB,B,FRsin,Flsin,FRcos,Flcos,SSA,FRsinB,Fl
sinB,FRcosB,FlcosB,SSAB,AB,A)
for(o=0;o<=10000;o++)
{
E=-Emax+0.005*(double)o;

mp=mp+1;
S=0;
SB=0;
h=0.001; //刻み
z=0;
y=0;
W=fabs(E/hber);
if(E<0)
DE=-1.0;
else
DE=1.0;
N=8000;

M=PI/h;

{
for(ii=-N;ii<=N;ii++)
{

{

```

```

        xsin=M/W*DEphy(ii*h,M);
        xcos=M/W*DEphy(ii*h-Pi/2.0/M,M);
    for(m=z;m<inte_T;m++)
    {
        T=m*Tstep;
        if(xsin<T)
        {
            z=m;
            break;
        }
    }
    for(m=y;m<inte_T;m++)
    {
        T=m*Tstep;
        if(xcos<T)
        {
            y=m;
            break;
        }
    }

    if(z<2)
        z=1;

    if(y<2)
        y=1;

    kk=3;

        if(z<1.1)
        {
    for(x=0;x<=4;x++)
    {
        AR[x]=G_all[x][0].real();
        AI[x]=G_all[x][0].imag();
    }

```

```

        ARB[x]=G_allB[x][0].real();
        AIB[x]=G_allB[x][0].imag();

        B[x]=(x)*Tstep;
    }

        }
        else
        {

for(x=z-2;x<=z+2;x++)
    {
        AR[x-(z-2)]=G_all[x][0].real();
        AI[x-(z-2)]=G_all[x][0].imag();

        ARB[x-(z-2)]=G_allB[x][0].real();
        AIB[x-(z-2)]=G_allB[x][0].imag();

        B[x-(z-2)]=x*Tstep;
    }
}

FRsin=Pij(xsin,AR,B,kk,kk);
FIsin=Pij(xsin,AI,B,kk,kk);

FRsinB=Pij(xsin,ARB,B,kk,kk);
FIsinB=Pij(xsin,AIB,B,kk,kk);

if(z>=inte_T-1)
{
    FRsin=0;
    FIsin=0;
    FRsinB=0;
    FIsinB=0;
}

```

```

//cout<<xcos<<"    "<<B[0]<<"    "<<B[4]<<"    "<<endl;

//fout2<<xcos<<"    "<<FIsin<<endl;
if(xcos>aaa)
    aaa=xcos;
if(xsin>aaa)
    aaa=xcos;
    if(y<1.1)
    {
for(x=0;x<=4;x++)
{
    AR[x]=G_all[x][0].real();
    AI[x]=G_all[x][0].imag();

    ARB[x]=G_allB[x][0].real();
    AIB[x]=G_allB[x][0].imag();

    B[x]=(x)*Tstep;
}
    }
    else
    {

for(x=y-2;x<=y+2;x++)
{
    AR[x-(y-2)]=G_all[x][0].real();
    AI[x-(y-2)]=G_all[x][0].imag();

    ARB[x-(y-2)]=G_allB[x][0].real();
    AIB[x-(y-2)]=G_allB[x][0].imag();

    B[x-(y-2)]=x*Tstep;
}
    }

FRcos=Pij(xcos,AR,B,kk,kk);

```

```

        Flcos=Pij(xcos,AI,B,kk,kk);

        FRcosB=Pij(xcos,ARB,B,kk,kk);
        FlcosB=Pij(xcos,AIB,B,kk,kk);

if(y>=inte_T-1)
{
    FRcos=0;
    Flcos=0;
    FRcosB=0;
    FlcosB=0;
}
SSA=(FRsin+i*Flsin)*i*DE*sin(xsin*W)*dDEphy(ii*h,M)*h*M/W*exp(-q*xsin)
    +(FRcos+i*Flcos)*cos(xcos*W)*dDEphy(ii*h-DE*PI/2.0/M,M)*h*M/W*exp(-q*xcos);

SSAB=(FRsinB+i*FlsinB)*i*DE*sin(xsin*W)*dDEphy(ii*h,M)*h*M/W*exp(-q*xsin)
    +(FRcosB+i*FlcosB)*cos(xcos*W)*dDEphy(ii*h-DE*PI/2.0/M,M)*h*M/W*exp(-q*xcos);
S=S+SSA;
SB=SB+SSAB;

    }

}
A=-S.imag()/PI/hber;
AB=-SB.imag()/PI/hber;
}

DOS[o]=DOS[o]+A;
DOSB[o]=DOSB[o]+AB;
}
}

} //sic領域

for(o=0;o<=10000;o++)

```

```

{
E=-Emax+0.005*(double)o;

if(sic==1)
{
//DOS[o]=DOS[o]+A;
fout<<E<<"    "<<DOS[o]<<endl;
//DOSB[o]=DOSB[o]+AB;
fout2<<E<<"    "<<DOSB[o]<<endl;
fout1<<E<<"    "<<DOS[o]-DOSB[o]<<endl;
}

}

}

//sic領域

return 0;
}

int main()
{
double c;
Eva();
return 0;
}

```