

mini-symposium

hctak について

青木 保夫

重イオン用 CDCC を中心とした  
プログラム群

Fortran 90 を使用

zero-base で書いた

<http://www.tac.tsukuba.ac.jp/~yaoki>  
にて公開中

## 代表的なプログラムとその機能

opm: 中心力光学ポテンシャル

微分断面積/ポテンシャルパラメータ

wsf: WS ポテンシャル下の波動関数

束縛及び散乱状態

共鳴状態探索

束縛状態波動関数の Fourier 展開

hctak: CDCC 方程式を解き

S 行列を計算する

$J^\pi$  毎の並列計算が可能 (MPI)

elx: 上記 S 行列  $\rightarrow$  弾性散乱微分断面積

trix: 上記 S 行列  $\rightarrow$  三重微分断面積

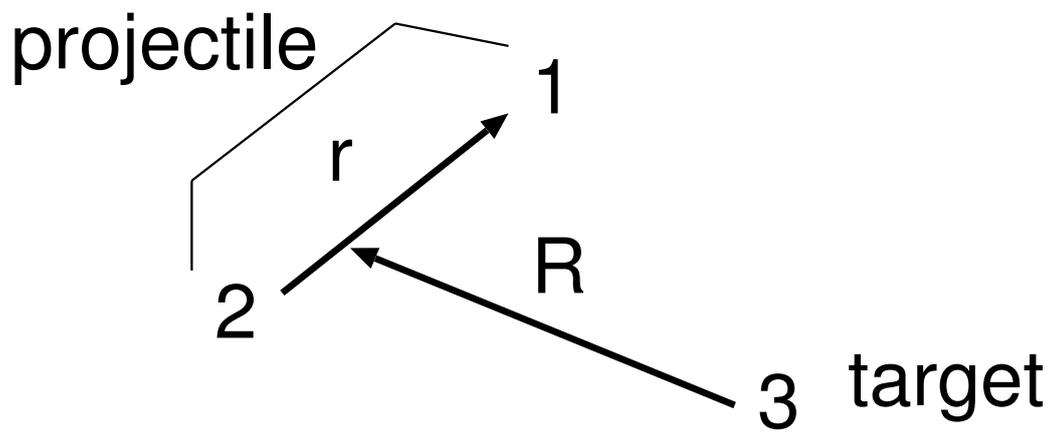
三重微分断面積を多重立体角積分

umtab: 核種 (基底状態) のデータベース

nucspe: 反応記号の解読

$(p+^{22}\text{Mg})+^{12}\text{C}$ ,  $E(\text{Al})=1702 \text{ MeV}$

hctak.pdf: 利用マニュアル



int.	pot. type	states
$V_{12}$	real pot.	bound/ scatt.
$V_{13}$	OP pot.	scatt.
$V_{23}$	OP pot.	scatt.

Hamiltonian H:

$$H = T_r + V_{12}(r) \\ + T_R + V_{13}(r_{13}) + V_{23}(r_{23})$$

wave function  $\phi(r)$  be defined by

$$\{T_r + V_{12}(r) - E_c\} \phi_c(r) = 0$$

scatt. state wf. at large  $r$

$$\phi_c(k, r) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr - l_c\pi/2 + \delta_{ck})}{r}$$

$k$  wave number

$l_c$  orb. ang. mom. for ch. c

$\delta_{ck}$  nucl. phase shift

if charge and spin are neglected

truncation             $k$  and spin space  
discretization         $k$  space

hence

Continuum Discretized  
Coupled Channels (CDCC)

$$\hat{\phi}_{c j} = \frac{1}{\sqrt{k_j - k_{j-1}}} \int_{k_{j-1}}^{k_j} \phi_c(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d\mathbf{k}$$

and is orthonormalized as

$$\langle \hat{\phi}_{c j} | \hat{\phi}_{c' j'} \rangle_{\mathbf{r}} = \delta_{c c'} \delta_{j j'}$$

suffix	meaning
$c, c'$	spins
$j, j'$	wave numbers

eigen state of  $H$  with  
angular momentum  $J, M$

$$\Psi_{JM} = \frac{1}{R} \sum_{c,j} \chi_{L_{cj}}^J(R) \times [\hat{\phi}_{cj}(r) i^{l_c} Y_{l_c}(\hat{r}) i^{L_{cj}} Y_{L_{cj}}(\hat{R})]_{JM}$$

[ ... ] for ang. mom. coupling

$\chi_{L_{cj}}^J(R)$  : motion of (1-2) and 3,  
satisfies the CDCC eq.

$$(T_R - E_{cj}) \chi_{L_{cj}}^J(R) = - \sum_{c'j'} \langle [cj]_J | (V_{13} + V_{23}) | [c'j']_J \rangle \times \chi_{L'_{c'j'}}^J(R)$$

CDDC eq. is solved numerically  
with usual boundary cond.

$$\chi_{L_{c_j}}^J(R) \rightarrow I_{L_{c_0}} \delta_{c,c_0} \delta_{L_{c_j},L_{c_0}} - \sqrt{\frac{K_{c_0}}{K_{c_j}}} S_{c_j, c_0 L_{c_0}}^J O_{c_j}$$

where  $c_0$  stands for inc. ch.

$I_L (O_L)$  are usual Coul. wf.

## Elastic cross sec

$$\sigma_{el} \propto |f_c + \sum (\text{geom. factor}) e^{i(\sigma_{L_0} + \sigma_L)} \\ \times \left( S_{L, L_0}^J - \delta_{L L_0} \right) Y_{LM}(\hat{\mathbf{R}})|^2$$

## triple diff. cross sec.

$$\frac{d^3 \sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} \propto (\text{final state dens.}) \times |T|^2$$

$$T \propto \sum_{J M c} (\text{geom. factor}) \left( \frac{e^{i(\delta_{ck} + \sigma_{ck})}}{k} \right) \\ \times \left( e^{i(\sigma_{L_0} + \sigma_{L_c})} S_{L_c L_0}^J(k) \right) \\ \times [Y_{l_c}(\hat{\mathbf{r}}) \otimes Y_{L_c}(\hat{\mathbf{R}})]_{J M}$$

## 歴史的な流れ

八尋・井芹・桜木さん等物理学会での講演  
RCNP 偏極国際会議での上村氏の講演

上村氏から 青木へソース提供  
使用開始 < --- 井芹さんの協力

CDCC(d,p) ?

$$T(d, p) = \langle \chi_p^{(-)} \Phi_B | V_{np} | \Psi_{CDCC}^{(+)} \Phi_A \rangle$$

$\Psi_{CDCC}$  の基底状態重心運動部分を  
TWOFN R へ読み込ませる  
(テンソル力を受け付ける)

Reid soft core pot. での散乱状態

井芹  ${}^3S_1$ - ${}^3D_1$

青木  ${}^3S_1$ - ${}^3D_1$ ,  ${}^3D_2$

${}^3P_0$ ,  ${}^3P_1$ ,  ${}^3P_2$ - ${}^3F_2$

‘-’ で繋いだ状態は、結合状態

${}^3D_3$  状態は Gauss int.

重陽子専用 tak.f 開発

上村版より高速、高精度

$f(CE; c, c'; \lambda) \propto R^\lambda, \quad R \rightarrow 0$

相反性  $S_{ab} = S_{ba}$

3次スプラインによる行列要素の内挿

Stömer の8点法

初期条件設定による  $u_c^J$  の発散回避

S 行列計算の次元低下と条件数評価

## Reid soft core pot.

原点付近での振舞

湯川理論だと  $1/r^3$

$$h_2^{(1)}(ix) = \frac{e^{-x}}{x} \left( 1 + \frac{3}{x} + \frac{3}{x^2} \right)$$

ここで、 $x = \mu r \sim 0.7 r$

補正項を加えて、 $1/r$  としている。

Schrödinger eq. は  
確定特異点を持ち、  
原点付近では非常に硬い (stiff)  
級数展開項と 対数項とで  
二つの独立解を書き下せる。

Lattice QCD の核力  
テンソル部分は原点で 0  
湯川理論と矛盾している！！  
singularity は簡単に消せる？

非常にテンソル力が強いいため

数値計算で  $\alpha$  状態と  $\beta(\gamma)$  状態の  
弁別するのが困難

$$\frac{d^2}{dx^2} \begin{pmatrix} u \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S & T \\ T & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ w \end{pmatrix}$$

原点付近で初期値を

$$(u = \epsilon, w = 0)$$

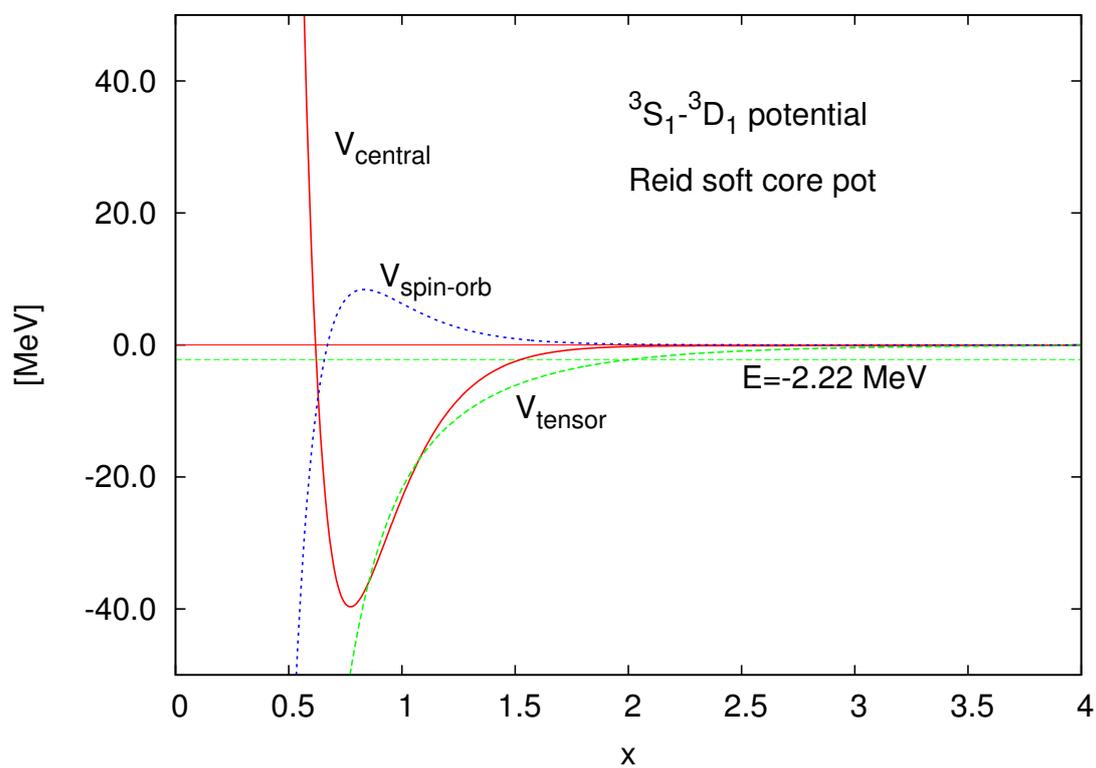
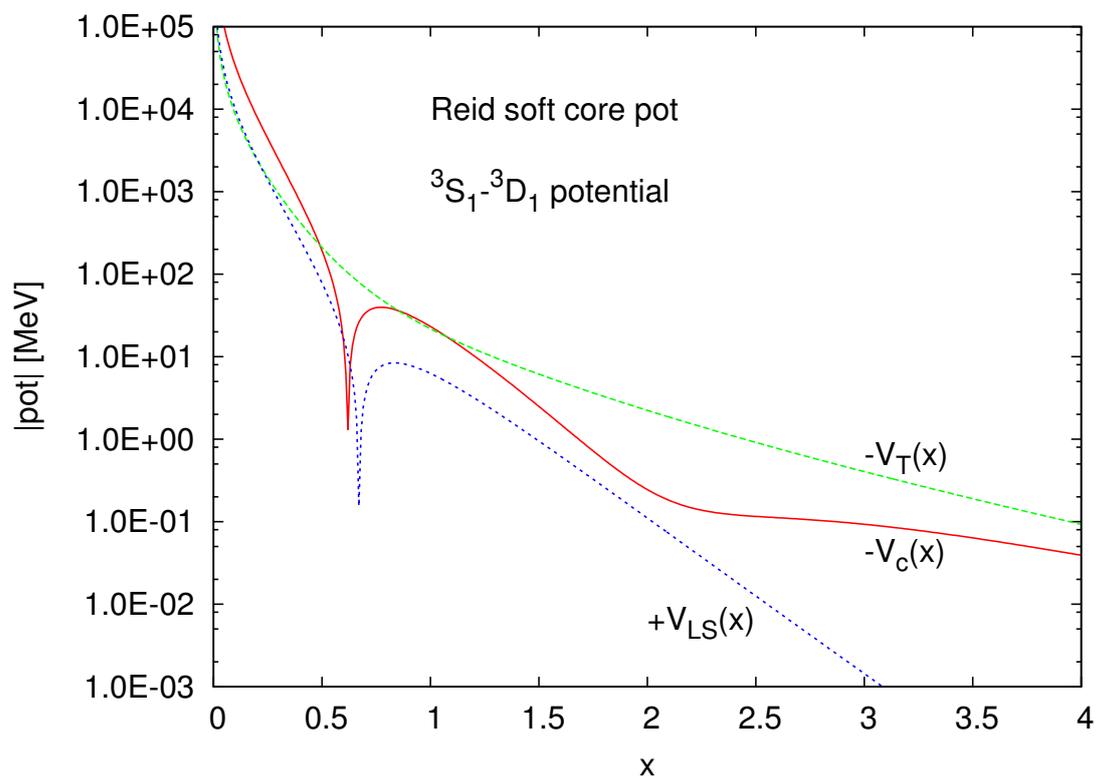
$$(u = 0, w = \epsilon)$$

と与えて数値的に解いても

二つの解の直交性が極端に悪い。

$$\begin{aligned}
V &= V_C + V_T S_{12} + V_{LS} L \cdot S \\
V_C &= -10.463 Y(x) + 210.936 Y(2x) \\
&\quad - 12715.2 Y(4x) + 59545.8 Y(6x) \\
V_T &= -10.463 \left\{ (1 + 3/x + 3/x^2) Y(x) \right. \\
&\quad \left. - (48/x + 12/x^2) Y(4x) \right\} \\
&\quad + 1407.8 Y(4x) - 10041 Y(6x) \\
V_{LS} &= 2835.64 Y(4x) - 16278.6 Y(6x)
\end{aligned}$$

ここで、 $Y(x) \equiv e^{-x}/x$



## 発散回避

大きな軌道角運動量の部分波 波動関数の  
振幅は、積分中に巨大振幅になる

積分の立ち上げ半径を  $x j_L(x)$  の振幅が  
1 st ピークでの振幅の  
 $10^{-8}$  となる半径からとする

## S 行列計算の次元低下と条件数評価

CDCC eq. の独立解

$\vec{u}_i, (i = 1, 2 \cdots n)$  の重ね合わせ

$$U \equiv (\vec{u}_1 \vec{u}_2 \cdots \vec{u}_n)$$

漸近領域での接続条件

$$\begin{pmatrix} U & O \\ U' & O' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W \\ S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I \\ I' \end{pmatrix}$$

W は重ね合わせ係数、S は S 行列  
O (I) は外 (内) 向きクーロン波動関数を  
対角要素とする行列

$$(O' U - O U') W = 2 i K$$

K は波数を対角要素とする行列  
次元数が半分になった

行列  $(O' U - O U')$  の

条件数 (1 ノルム) を評価する

→ 計算精度の確認

ctak.f へ拡張

クーロン分解過程を考慮

真空偏極 (Uehling) ポテンシャル

Pong-Austern 流の反対称化

三重微分断面積 ← 井芹さんの協力

応用

重陽子：弾性散乱

：0度での三重微分断面積

重陽子の polarizability

CDCC approach to

Oppenheimer and

Phillips process

## 微分方程式を解きながら直交化

$$u_c^J(R) \propto \frac{(kR)^{J+1}}{(2J+1)!!}$$

$k_{c'}/k_c = 1/2$ ,  $J = 100$  の時、

$$\left(\frac{k_{c'}}{k_c}\right)^{100} = 10^{-30}$$

15桁の有効数字では取り扱えない！

CDCC 方程式は線形だから、  
解きながら直交化する

この手法は原理的には有効だが、  
効率的なアイデアは知らない

## 真空偏極: Uehling のポテンシャル

後方でのクーロン散乱断面積の増し分は  
陽子・陽子では の約 0.5 %  
重陽子・原子核では約 0.2 - 0.3 %

$$\begin{aligned}\delta V(r) = & -\frac{2\alpha}{3\pi} \int d^3x \rho(x) \\ & \times \int_1^\infty dt \sqrt{t^2 - 1} \left( \frac{1}{t^2} + \frac{1}{2t^4} \right) \\ & \times \frac{e^{-2ctR}}{R}\end{aligned}$$

電荷密度  $\rho$  は

$$\int d^3x \rho(x) = Z$$

ここで、 $R = |\vec{r} - \vec{x}|$

$c$  は電子のコンプトン波長 (約 240 fm)  
の逆数

$\alpha$  は微細構造定数

$t = 1$  で微分が発散

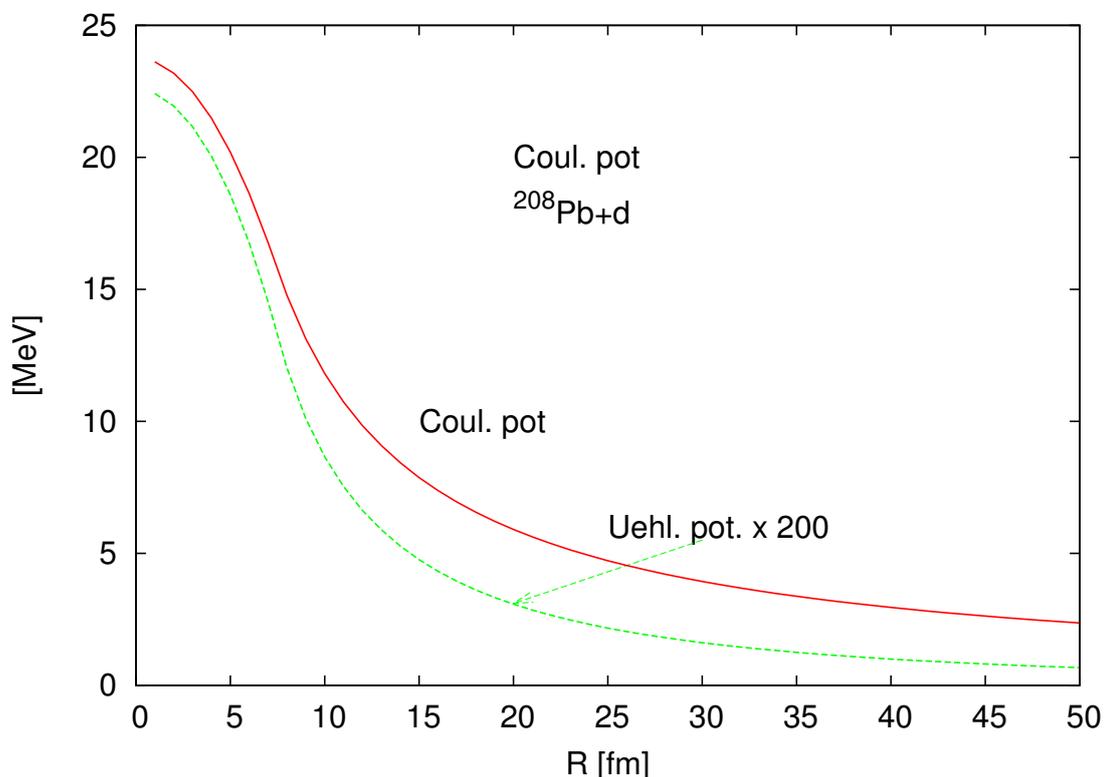
Euler-Mclaurin の和公式を利用

積分 = 台形公式 +

(両端での奇数階微分の差)  $\times$  荷重

$y = \log(t - 1)$  と変数変換

両端点での微分が 0



## 重陽子 folded potential の反対称化

Pong and Austern を参照

核子光学ポテンシャルを利用する。

→ 入射核子と核内核子の反対称化は  
現象論的に取り込まれている

## 重陽子内核子と核内核子の反対称化

核内核子： 密度とフェルミガスモデル

重陽子： Hulthén 波動関数

非局所ポテンシャルを導く

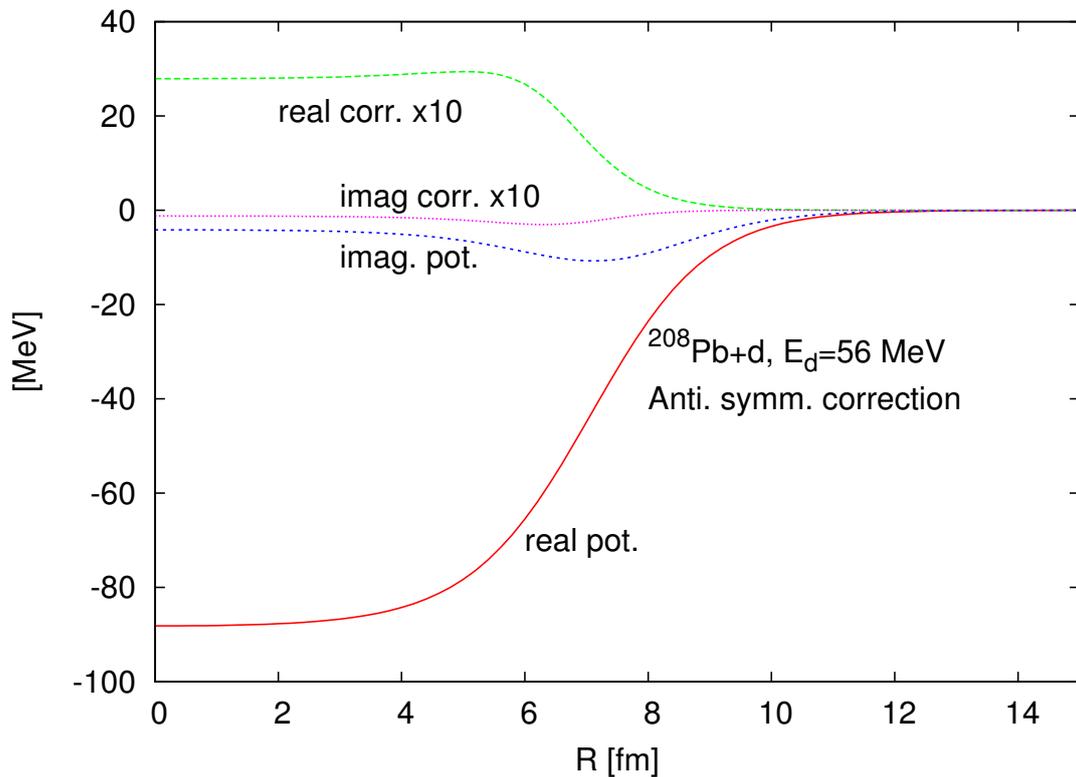
局所等価ポテンシャルを作る

局所運動量近似を利用

実部は浅く、虚部は深くなる

中心部には近付くな！！

中心部には来たら消す！！



20 MeV 重陽子の鉛核による弾性散乱：  
 微分断面積の山谷が約5度程度  
 後方にずれて、  
 実験値の再現性が改良

$$\begin{aligned} \{E - E^{(0)} - t_p - t_n - U_p^{(0)} - U_n^{(0)}\} \psi \\ = (1 - P_p)(1 - P_n) V_{pn} \psi \end{aligned}$$

Singly proj. app:

$$\begin{aligned} U^S(\vec{R}, \vec{R}') = & \left\{ \frac{4\hbar^2}{M} (\beta^2 - \alpha^2) \rho_N(\vec{R}) \right\} \\ & \times H(|\vec{R} - \vec{R}'|) \end{aligned}$$

Nonlocal kernel:

$$\begin{aligned} H(s) = & \frac{2\alpha\beta(\alpha + \beta)}{(\alpha - \beta)^2} \\ & \times \left\{ \frac{1}{\beta + \alpha} \frac{\phi_d(2s)}{\phi_d(0)} - \frac{\exp(-2\beta s)}{2\beta} \right\} \\ & \times \frac{3}{k_f s} j_1(k_f s) \\ & \sim A \exp(-Bs) \\ & \sim A_H \exp(-B_H s^2) \end{aligned}$$

$k_f$  by local Fermi gas model.

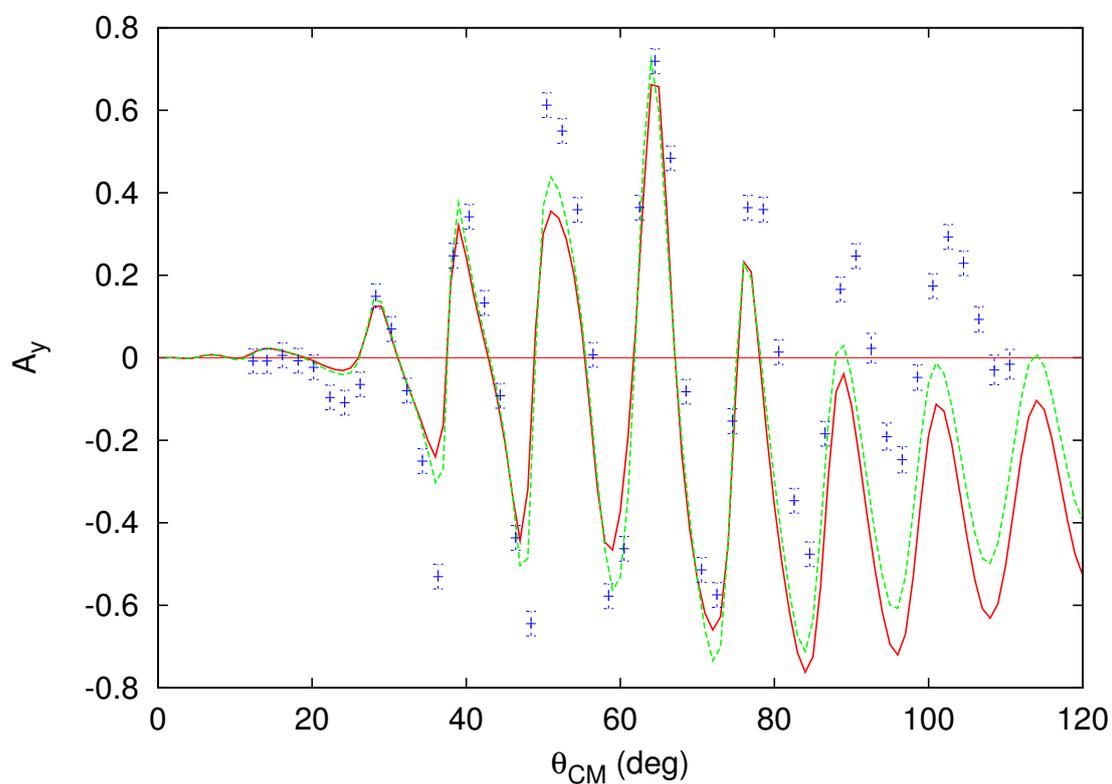
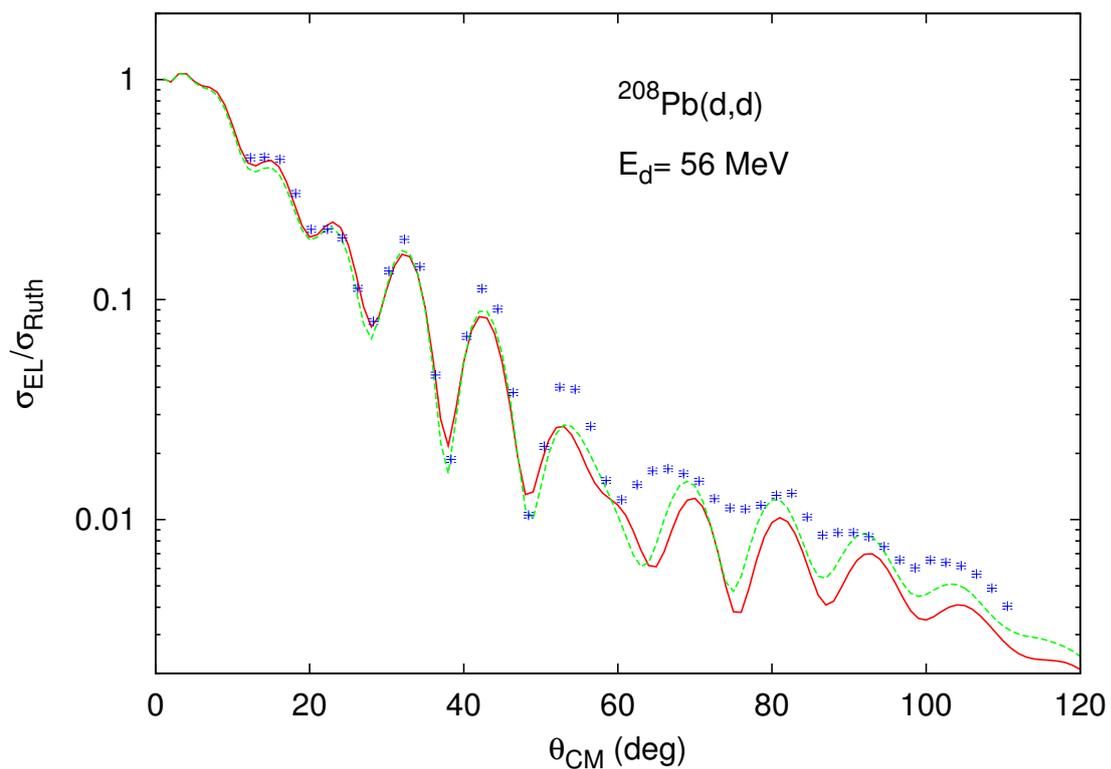
Equivalent local potential  $U_L^S(R)$ :

$$U_L^S(R) = \frac{4\hbar^2}{M}(\beta^2 - \alpha^2) \\ \times \rho_{\bar{N}}(R) \left( \frac{\pi}{B_H} \right)^{3/2} \\ \times \exp \left\{ \frac{M}{B_H \hbar^2} (U_d + U_L^S - E) \right\}$$

nucleon density:

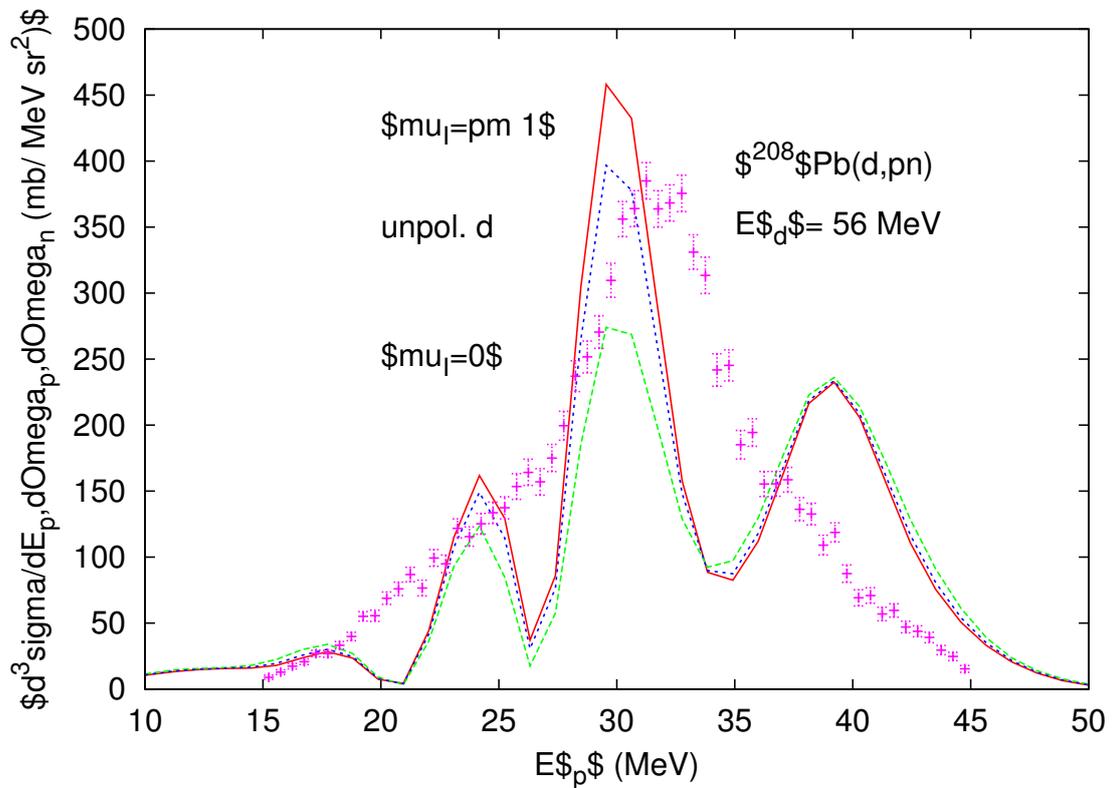
$$\rho_{\bar{N}}(R) = \frac{208}{82} \rho_{charge}(R)$$

## 松岡さんの実験データ

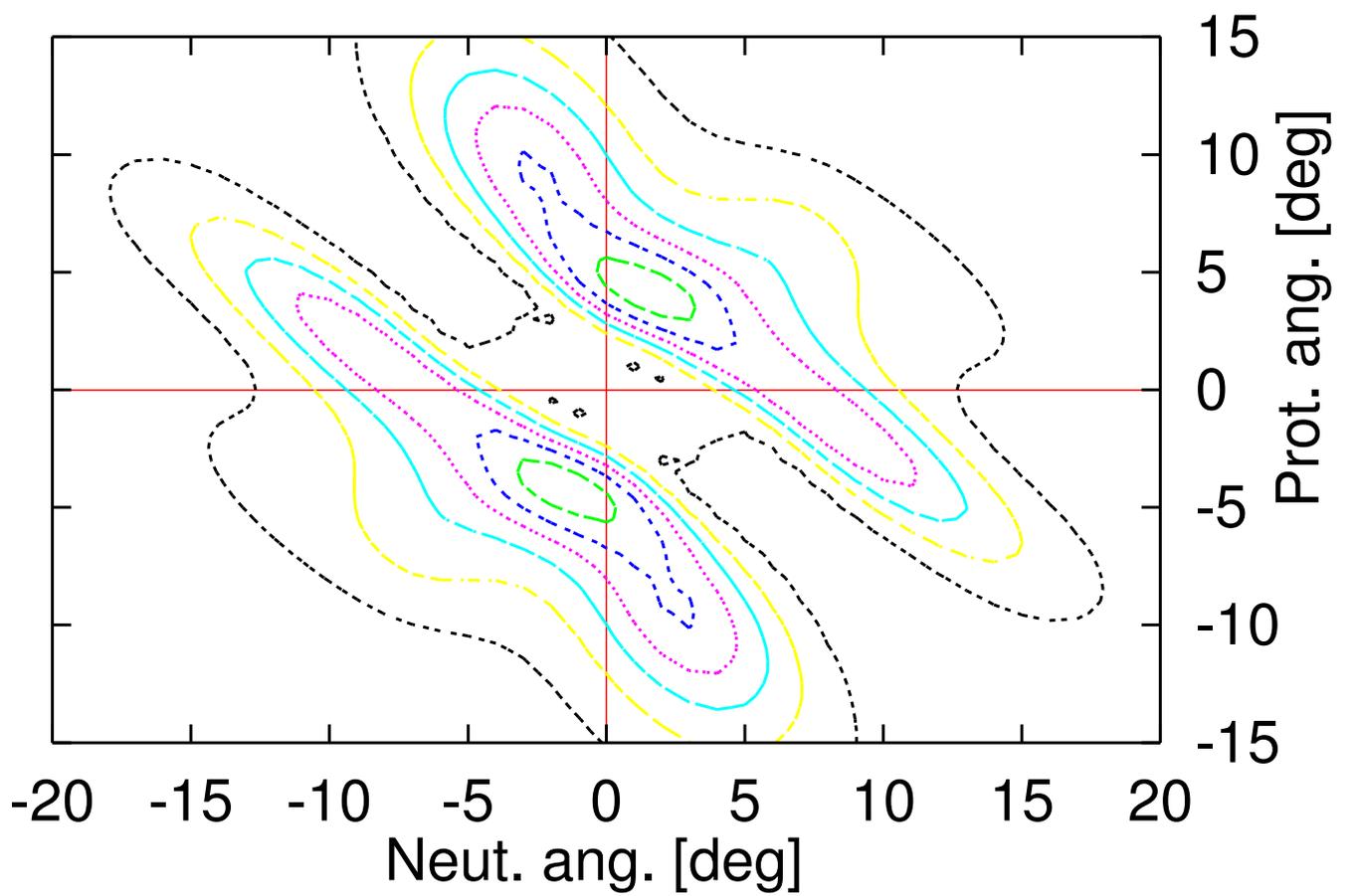


緑線はクーロン分解ありの計算

## 岡村さんの実験データ

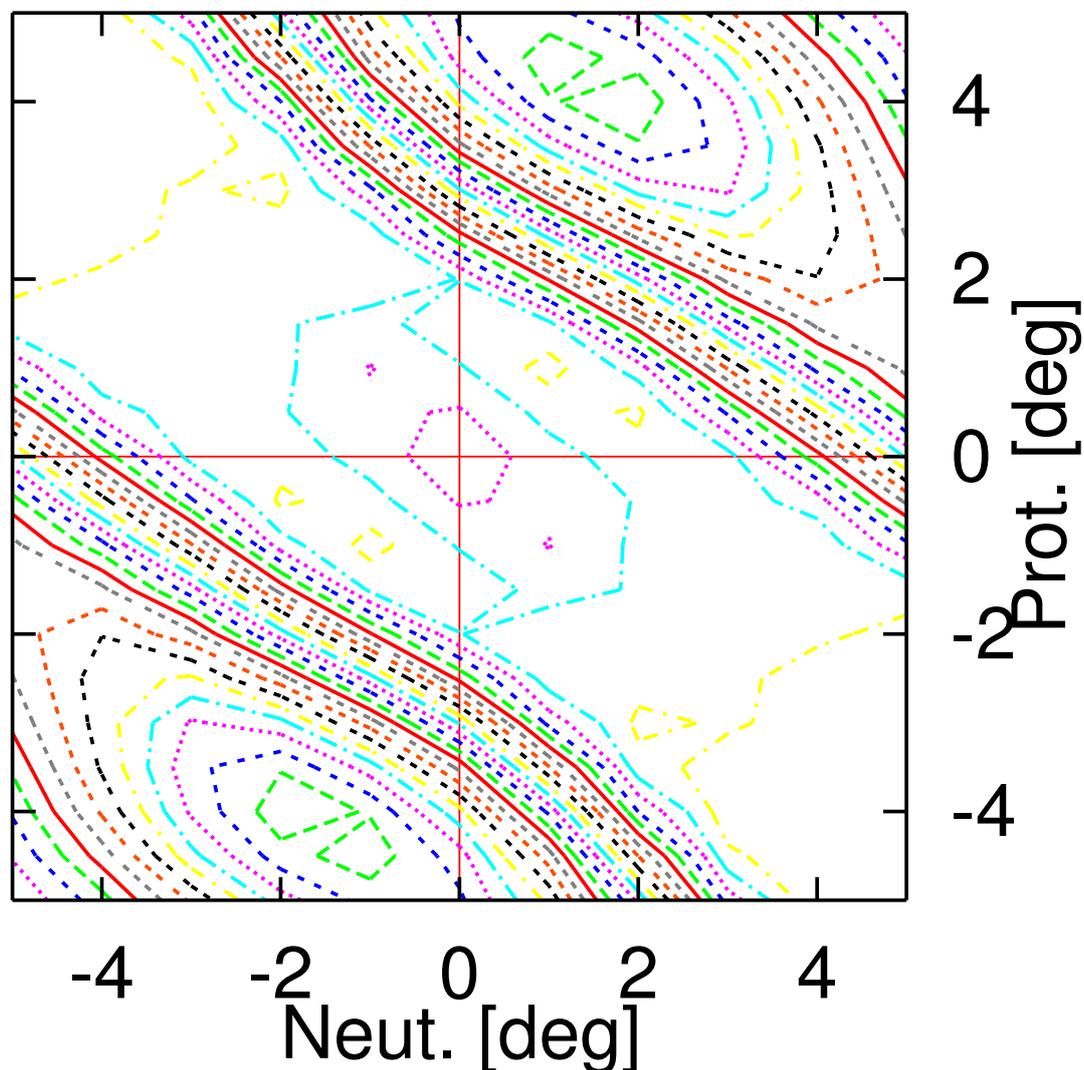


計算は、偏極ビーム使用。  
これをスピン平均すると青線になる



クーロン軌道より、陽子は外へ  
 中性子は内へ  
 但し、陽子と中性子は同方向へ出る

両粒子が0度方向に放出される確率は小さい



near/far comp. が0度で干渉する  
0度での幅と角運動量是不確定性を満足  
 $\delta\theta L = 1$   
 $L = kR$  とすると、分解半径が推定可

## 重陽子の電气的分極率

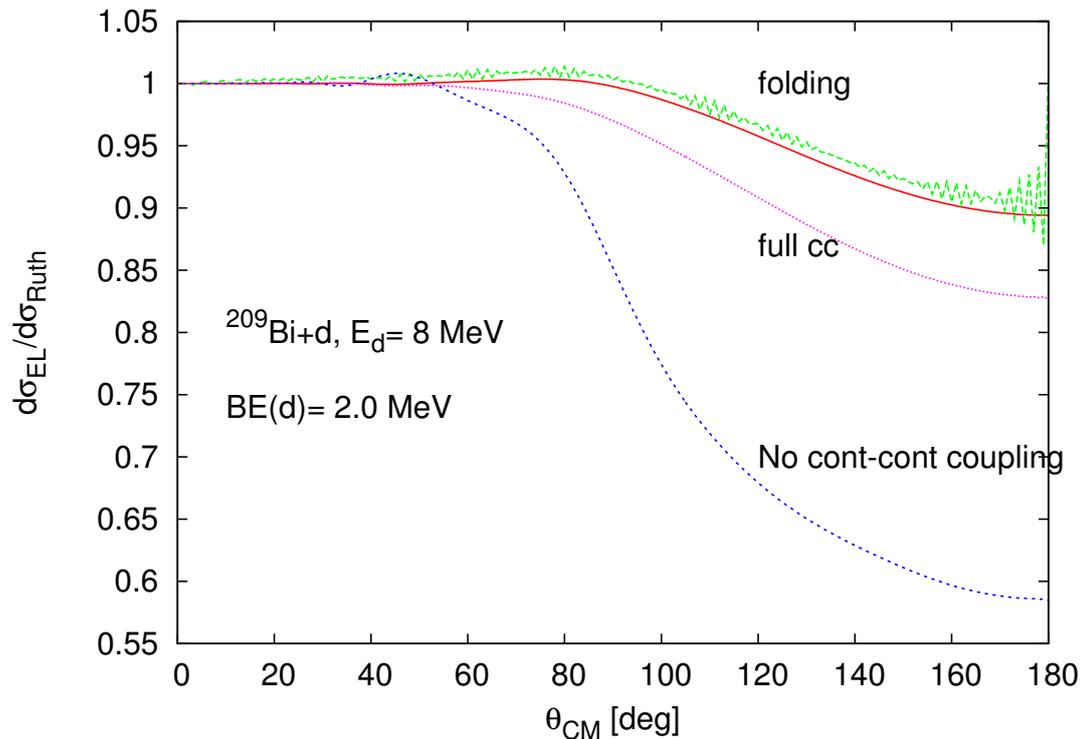
Ramsay 達は一様電場  $\vec{E}$  の下での  
エネルギー  $W$  を考えた

$$\begin{aligned} W &= -\frac{\alpha E^2}{2} \\ &= -\sum_{n>0} \frac{(0|ezE|n)(n|ezE|0)}{4(E_n - E_0)} \end{aligned} \quad (1)$$

状態  $|n\rangle$  は  ${}^3P$  が主寄与項

8 MeV  $d+{}^{209}\text{Bi}$  弾性散乱  
後方で約 3% の寄与と評価

## hctak での簡単な計算



No cont-cont coupling と書いたのは、以下の連立方程式を解いている。

$$D^2 u_0 = \sum_i V_{0i} u_i$$

$$D^2 u_j = V_{jj} u_j + V_{j0} u_0, \quad (j \neq 0)$$

## 個人的な考え

Ramsay の評価は、クーロン分解の 2 次項  
分解過程はクーロン分解の 1 次項  
従って、弾性散乱からは評価出来ない！

## 後知恵

式 (1) を使用し CDCC のアイデアで  
直接評価出来そうだ

## OP process

Lawrence 達は、 $p, \alpha$  誘起反応断面積の  
‘入射エネルギー依存性’は  
Gamow 理論で OK

$d$  誘起反応断面積はガモフ理論よりも、  
穏やかなエネルギー依存性

Oppenheimer と Philips は  
クーロン分解後の中性子吸収として、  
( $d, p$ ) 反応断面積の  $E_d$  依存性を説明

OP proc. への CDCC approach  
 CDCC 波動関数から、重心運動の流れの密度を大きな球面で立体角積分する。

分解チャネルに対し

$$|S_{L L_0}^{c J}|^2 \propto \sum_{c' L'} \int dR \operatorname{Im} \left( \chi_{L L_0}^{c J} * V_{c c'} \chi_{L' L_0}^{c' J} \right)$$

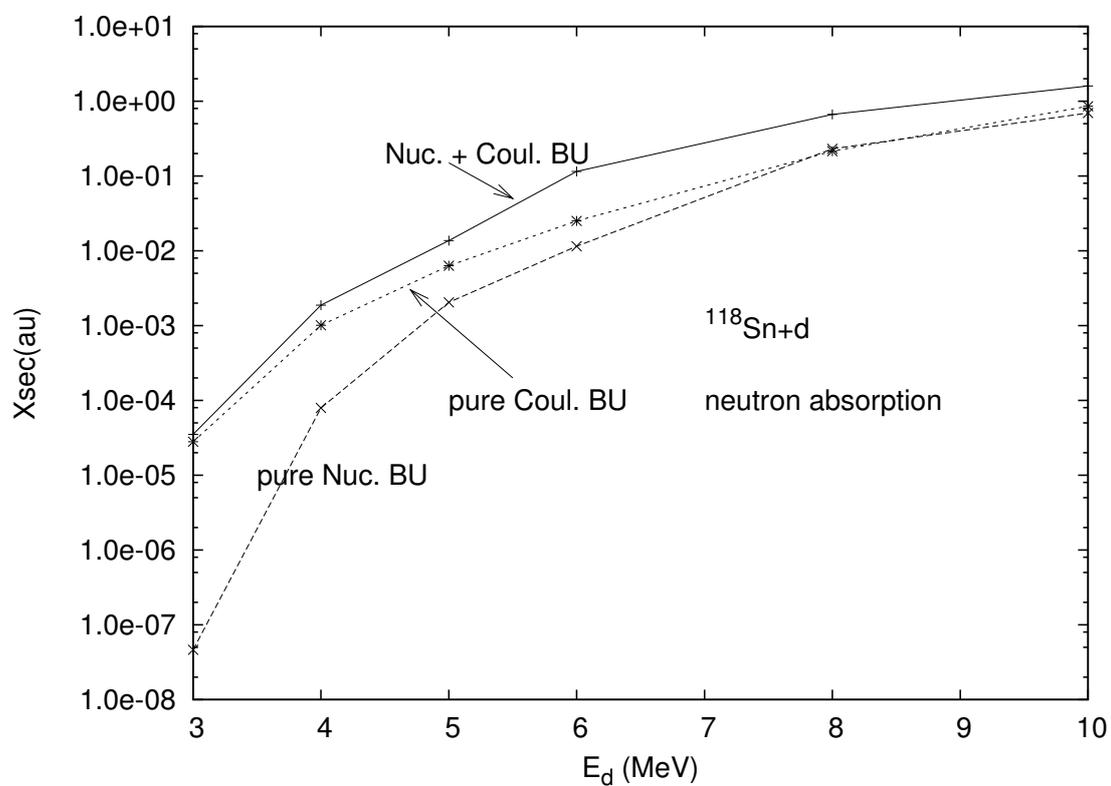
被積分関数は、湧き口密度を与える

右辺対角要素は虚部ポテンシャルの  
 対角要素だから負  
 吸い込み過程を表す

虚部の中性子 (陽子) 成分は分解後の  
 中性子 (陽子) 吸収断面積

$$\sigma(d, p) 、 \sigma(d, n)$$

## $^{118}\text{Sn}+d$ の計算値



核力だけの分解過程よりも、  
かなり穏やかなエネルギー依存性

## CDDC(d,p)

反応の T 行列を次式と近似する。

$$T_{\beta\alpha} = \langle \chi_b^{(-)} \Phi_B | V_b - U_b | \Psi_a^{(+)} \Phi_A \rangle$$

広義重陽子の内部構造

$$\Phi_n(l^n s_d I_a^n m_a^n; \mathbf{r}) = i^{l^n} Y_{l^n s_d I_a^n, m_a^n} \phi_n(\mathbf{r})$$

システム 1 の波動関数

$$\begin{aligned} & \langle I_B M_B | I_A M_A \rangle \\ &= \sum_{l_1 j} S_{B A l_1 j}^{(1)} u_{l_1 j}(r_1) \\ & \quad \times (I_A M_A j M_B - M_A | I_B M_B) \\ & \quad \times i^{-l_1} [Y_{l_1}(\hat{r}_1) \otimes \phi_{s_x}]_{j M_B - M_A}^* \end{aligned}$$

システム 2 関連の成分

$V_b - U_b \sim V_{np}$  と近似する

$$\begin{aligned} V_{np}(\mathbf{r}_2) \Phi_a^n(l^n s_d I_a^n, m_a^n; \mathbf{r}_2) \\ = \sum_{l_2} D_{l_2}^n(\mathbf{r}_2) i^{l_2} Y_{l_2 s_d} I_a^n, m_a^n(\hat{\mathbf{r}}_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_{l_2}^n(\mathbf{r}_2) \equiv \sum_{l_n} \phi_{l_n} I_a^n(\mathbf{r}_2) \\ \times \langle i^{l_2} Y_{l_2 s_d} I_a^n | V_{np} | i^{l_n} Y_{l_n s_d} I_a^n \rangle \end{aligned}$$

$l_2$  は重陽子 D 状態及び  $V_{np}$  のテンソル力に起因

$$\begin{aligned} \langle s_b m_b | V_{np}(\mathbf{r}_2) | I_a^n m_a^n \rangle \\ = \sum_{l_2 s} S_{ab l_2 s}^{(2)}(s_b m_b s m_s | I_a^n m_a^n) \\ \times D_{l_2}^n(\mathbf{r}_2) i^{l_2} [Y_{l_2}(\hat{\mathbf{r}}_2) \otimes \phi_{s_x}]_{s m_s} \end{aligned}$$

この式で移行スピン  $s$  が定義された。

## 核行列要素

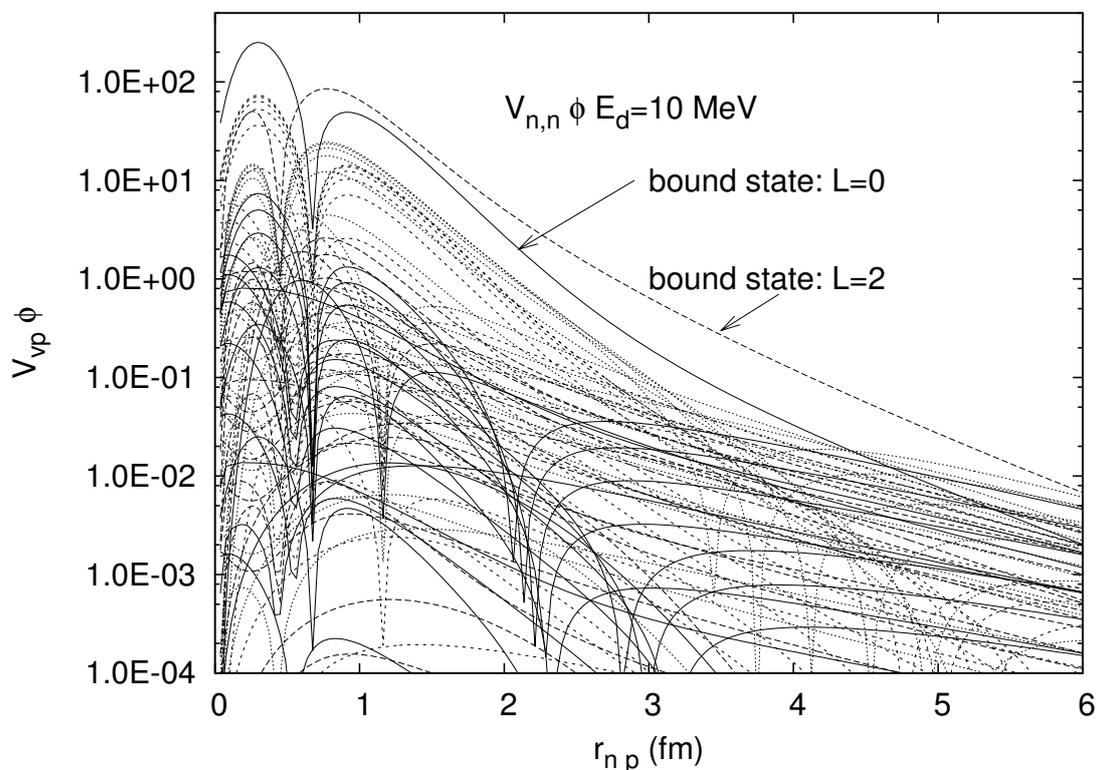
DWBA の標準的な行列要素に持ち込む。

$$\begin{aligned} & \langle I_B M_B, s_b m_b | V_{np} | I_A M_A, I_a^n m_a^n \rangle \\ &= \sum_{l s j} \sum_{l_1 l_2} S_{B A l_1 j}^{(1)} S_{a b l_2 s}^{(2)} \\ & \quad \times (\text{幾何学的因子}) \\ & \quad \times i^{-l} f_{l m}^{l_1 j l_2 s}(r_1, r_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_{l m}^{l_1 j l_2 s}(r_1, r_2) &= u_{l_1 j}(r_1) D_{l_2}^n(r_2) \\ & \quad \times [Y_{l_1}(\hat{r}_1) \otimes Y_{l_2}(\hat{r}_2)]_{l m}^* \end{aligned}$$

$f_{l m}^{l_1 j l_2 s}$  は  
束縛状態  $u_{l_1 j}(r_1)$  と  $D_{l_2}^n(r_2)$  の積で、  
有効 range がきまる

図は、 $D_{l_2}^n(r_2)$  を色々な”重陽子”状態に対して描いたものである。



通常为重陽子の基底状態に対応する場合が大きな振幅を持つ事は明らかである。

いわゆる重陽子 D 状態さえ、大きな寄与はしない。

重イオン用の開発 → hctak.f

クーロン波動関数の副プログラム

Virminham アルゴリズム

3項漸化式の連分数表現

3j, 6j 係数副プログラム

階乗計算の排除

今後の機能追加

1) 区分的摂動近似 (Jost func?)

2) E-CDCC

3) inelastic break up

考えられる利用法

1) 複合核形成断面積の計算

2) 分極率

3) 触媒核融合 ?

## クーロン波動関数

これまでは、 $1/\rho$  の漸近展開  
使用が幾らか難しく  
利用範囲は制限される

### 3項漸化式

$$\alpha F_{l+1} + \beta F_l + \gamma F_{l-1} = 0$$

反復利用で、 $F_{l-1}$  は発散？

↓

$$\frac{\alpha}{\left(\frac{F_l}{F_{l+1}}\right)} + \beta + \gamma \left(\frac{F_{l-1}}{F_l}\right) = 0$$

比で書き、連分数計算に持ち込むと  
安定的に使用出来る場合がある

### 3 J 係数

$\vec{j}_3 = \vec{j}_1 + \vec{j}_2, m_3 = m_1 + m_2$  とする  
5 自由度がある

$j_1, j_2, j_3, m_3$  を固定した 3 項漸化式

3J 定義式に  $\vec{j}_3^2 = (\vec{j}_1 + \vec{j}_2)^2$  を作用  
 $3J(\underline{m_2 - 1}) = p 3J(\underline{m_2}) + q 3J(\underline{m_2 + 1})$

$j_1, j_2, m_1, m_2$  を固定した 3 項漸化式

3J 定義式に  $j_{1z}$  を作用  
 $3J(\underline{j_3 - 1}) = a 3J(\underline{j_3}) + b 3J(\underline{j_3 + 1})$

## 6 J 係数

### Elliot-Biedenharn の恒等式

$$\begin{aligned} & \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_7 & j_8 & j_9 \end{Bmatrix} \\ &= \sum_J (2J + 1) (-1)^{J + \sum_i j_i} \\ & \quad \times \begin{Bmatrix} ? & ? & ? \\ ? & ? & ? \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} ? & ? & ? \\ ? & ? & ? \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} ? & ? & ? \\ ? & ? & ? \end{Bmatrix} \end{aligned}$$

$j_7 = j_2, j_8 = j_1, j_9 = 1$  を代入  
変数に 1 を含む場合は、顕な式を使用

$j_6$  をパラメータとする、3 項漸化式

$$6J\{\underline{j_6 + 1}\} = \alpha 6J\{\underline{j_6}\} + \beta 6J\{\underline{j_6 - 1}\}$$

## 漸化式の利用法

$3J(\underline{j_3})$  を例にとる

先ず  $j_{max}$  に適用。

$3J(\underline{j_{max} + 1}) = 0$  だから、

$$3J(\underline{j_{max} - 1}) = C_1 \times 3J(\underline{j_{max}})$$

次に、 $j_{max} - 1$  に適用。 etc.

規格化の式

$$\sum (2j + 1) 3J(\underline{j})^2 = 1$$

比例係数  $C_n$  の平方和が決まる

$3J(\underline{j_{max}})$  の絶対値は確定

Condon-Shortley の位相規約

直交性を用いて、精度チェック

## 触媒核融合

分解反応の逆過程を取り上げる

粒子 1 と 2 が、標的 3 の近くに来る

粒子 3 を媒介して、1 と 2 が融合する

見掛けの三体力が発生している

$\gamma$  線を出さずに、粒子 3 の運動で  
保存則を保証する

散乱状態にある粒子 1・2 が始状態

1・2 の束縛状態が終状態

この遷移の S 行列は CDCC で計算可

## 弱結合 CDCC 方程式の解法

R. G. Gordon, J. Chem. Phys. 51 14(1969)

$$\frac{d^2 \chi_c}{dr^2} = V_{cc} \chi_c + \sum_{c' \neq c} V_{cc'} \chi_{c'} \quad (2)$$

区間  $[r_0, r_1]$  での解は既知

区間  $[r_1, r_2]$  での解は？

補助関数を導入する

$$\frac{d^2}{dr^2} \begin{pmatrix} F_c \\ G_c \end{pmatrix} = V_{cc} \begin{pmatrix} F_c \\ G_c \end{pmatrix} \quad (3)$$

Wronskian は一定値 (1)

$$W(r) \equiv F'_c G_c - F_c G'_c = 1 \quad (4)$$

(2) 式の解を  $F_c, G_c$  で展開

$$\chi_c(r) = \alpha_c(r) F_c(r) + \beta_c(r) G_c(r) \quad (5)$$

$\alpha_c, \beta_c$  は、穏やかに変化する  $r$  の関数

$$F_c(r) \alpha'_c(r) + G_c(r) \beta'_c(r) = 0$$

$$\begin{aligned} F'_c(r) \alpha'_c(r) + G'_c(r) \beta'_c(r) \\ = \sum_{c' \neq c} V_{cc'}(r) \chi_{c'}(r) \end{aligned}$$

$\alpha'$ ,  $\beta'$  について解き、  
これらを区間  $[r_1, r_2]$  で積分する  
必要に応じ、次の区間へ適用する

激しく振動する  $\chi_c(r)$  が、  
穏やかに変化する  $\alpha(r), \beta(r)$  に変換  
閉チャンネルにも、適用可能