

DSTART

برنامه DSRART یک چگالی بار اولیه با استفاده از جمع چگالیهای اتمی تولید شده توسط برنامه LSTART را برای شروع مرحله دوم که در آن محاسبات بلوری به طور خودسازگار انجام می شوند تولید می کند. ورودی این برنامه case.struct، case.rsp، case.in1 و case.in2 و خروجیهای آن case.clmsum و case.outputd است. ورودی case.rsp که خود خروجی برنامه lstart می باشد حاوی چگالیهای اتمی است و در طی مراحل حل خودسازگار تغییر نمی کند. خروجی case.clmsum که در ابتدا بلافاصله بعد از اجرای برنامه DSTART حاوی یک جمع اولیه از چگالیهای اتمی است در پایان هر چرخه از مراحل حل خودسازگار به طور پیوسته تغییر می کند. این تغییرات تا حصول شرط همگرایی و رسیدن به چگالی الکترونی مناسب بلوری ادامه دارد. چگالی بار کل در نمایش هماهنگیهای شبکه و به صورت ضرایب فوریه در خروجی case.clmsum نوشته می شوند، که در آن جمله با تقارن کروی $LM=0,0$ به $4\pi r^2 \rho(r)$ و سایر جملات غیر کروی به $r^2 \rho(r)$ اشاره دارند.