

برنامه های مرحله آماده سازی

NN

برنامه NN فواصل نزدیکترین همسایگان تمام اتمها را بر اساس موقعیتهای اتمی داده شده محاسبه و بدین ترتیب روی هم افتادگیهای کرات را تحقیق می کند، که در صورت اخیر با کاهش شعاع کرات باید از روی هم افتادگیها جلوگیری شود. ورودی این برنامه `case.struct` و خروجی آن `case.outputnn` است. این برنامه همچنین هم ارز بودن یا نبودن اتمها را تحقیق می کند که از این اطلاعات می توان از نادرست بودن احتمالی `case.struct` آگاه شد. در صورت نادرست بودن `case.struct` برنامه NN یک `case.struct_nn` پیشنهادی تولید می کند، که باید صحت آن مورد بررسی قرار گیرد. این بدان معنی است که `case.struct_nn` لزوماً `case.struct` مطلوب نیست، چرا که کوچکترین خطای نوشتاری در وارد کردن موقعیتهای اتمی یکی از دلایل بروز هم ارز شناخته نشدن اتمهای هم ارز است. گاه لازم است که دو اتم هم ارز غیر هم ارز شناخته شوند، مثلاً در محاسبات پاد فرو مغناطیس `bcc-Cr`، که در این صورت اتمهای هم ارز باید با برچسبهای 1 و 2 به صورت `Cr1`, `Cr2` از یکدیگر در `case.struct` تمیز داده شوند.

SGROUP

برنامه SGROUP گروه فضایی شبکه و گروههای نقطه ای هریک از نقاط شبکه را بر اساس نوع شبکه، ثابتهای شبکه، و موقعیتهای اتمی داده شده تعیین می کند. ورودی این برنامه `case.struct` و خروجی آن `case.outputsgroup` است. این برنامه سلولهای واحد احتمالی کوچکتر نسبت به سلول داده شده اولیه را می یابد، می تواند مبدا سلول را به اندازه یک بردار معین داده شده جا به جا کند، و همچنین بر اساس `case.struct` داده شده یک `case.struct_sgroup` پیشنهاد می کند. مراجع این برنامه برای تمام 230 گروه فضایی جداول بین المللی کریستالوگرافی سال 1992 می باشند.

SYMMETRY

برنامه SYMMETRY گروههای نقطه ای هریک از نقاط شبکه، عملگرهای تقارنی متناظر با هر گروه نقطه ای، و مقادیر LM نمایش هماهنگیهای شبکه را بر اساس نوع شبکه و موقعیتهای اتمی داده شده تعیین می کند. ورودی این برنامه `case.struct` و خروجیهای آن `case.outputs` و `case.in2_st` است. این برنامه توسط G. Vielsack برای تعیین ترکیبات LM در یک دستگاه مختصات دلخواه نوشته شده است که سپس

در آن از ماتریسهای دوران موضعی برای کمینه کردن تعداد ترکیبات LM در بسط هماهنگهای شبکه پتانسیل و چگالی بار مطابق با رابط زیر استفاده می شود:

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{LM} V_{LM}(\vec{r}) Y_{LM}(\hat{\vec{r}}) ; \vec{r} \in MT \\ \sum_K V_K e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} ; \vec{r} \in I \end{cases}, \quad \rho(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{LM} \rho_{LM}(\vec{r}) Y_{LM}(\hat{\vec{r}}) ; \vec{r} \in MT \\ \sum_K \rho_K e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} ; \vec{r} \in I \end{cases}$$

که در آنها MT و I به ترتیب نواحی درون کرات و ناحیه خارج از کرات را نمایش می دهند. مثلاً در گروه نقطه ای mm2 و برای L=1 اگر دستگاه مختصات به گونه ای اختیار شود که محور Z بر محور دوران دوگانه منطبق باشد آنگاه فقط ترکیب LM=1, 0 لازم است، در حالی که در یک دستگاه مختصات دلخواه هر سه جمله 1, 1 ; 1, 1 ; 1, 0 LM ضروری اند.

تعبیر بارهای جزیی مستلزم انتخاب یک دستگاه مختصات مناسب است. در مثال بالا اربیتالهای p به دو نمایش کاهش ناپذیر شکافته می شوند، اما آنها تنها در صورتی می توانند به اربیتالهای p_x, p_y, p_z نسبت داده شوند که محور Z یک محور دوران دو گانه باشد.

LSTART

برنامه LSTART نسخه تصحیح شده یک کد اتمی است. این کد با استفاده از تقریب LSDA به حل نسبیتی معادله دیراک- فوک می پردازد.

ورودیهای این برنامه case.struct و case.inst و خروجیهای آن، case.vsp, case.rsp, case.inm, case.inc, case.in2, case.in1, case.in0, case.outputst است. برنامه LSTART پتانسیلهای اتمی را درون کره های موفین-تین تولید می کند (case.vsp). این برنامه چگالیهای اتمی را نیز تولید می کند (case.rsp)، که این چگالیه ها توسط برنامه DSTART مورد استفاده قرار گرفته تا یک چگالی اولیه برای مرحله حل خودسازگار تولید کند. در این مرحله الکترونیهای ظرفیت (ظرفیت + شبه مغزه) باید از الکترونیهای مغزه تفکیک شوند، که این تفکیک با انرژی جداسازی به عنوان یک پارامتر ورودی انجام می شود. براساس انرژی جداسازی مقادیر ویژه اتمی و ورودی برنامه های مرحله حل خودسازگار یعنی case.in0, case.in1, case.in2, case.inc و case.inm تولید می شوند. بنابراین انتخاب انرژی

جداسازی (S.E.) از اهمیت زیادی برخوردار است، زیرا مبنای محاسبات مرحله خود سازگار و در نتیجه نتایج نهایی در همین مرحله پایه ریزی می شود. برای تعیین انرژی جداسازی به صورت زیر عمل می کنیم:

الف) به ازای یک مقدار معین از انرژی جداسازی (-6.0Ry) برنامه LSTART را اجرا می کنیم.

ب) ویژه مقادیر تولید شده در فایل خروجی case.outputst را به صورت زیر مورد بررسی قرار می دهیم:

-514.09504	-514.09427
-60.04156	-60.96008
-51.73511	-51.67440
-50.81845	-50.75597
-6.80000	-6.61035
-4.38376	-4.19666
-4.27103	-4.08485
-0.47568	-0.30733
-0.46495	-0.29712
-0.37634	-0.30776

ستون سمت چپ ویژه مقادیر انرژی الکترونیهای با اسپین بالا و ستون سمت راست ویژه مقادیر انرژی الکترونیهای با اسپین پایین را بر حسب Ry برای اتم Fe نمایش می دهند، (واحد انرژی در حین اجرای برنامه eV می باشد ولی خروجی آن به واحد Ry تبدیل می شود. علت این امر این است که واحد انرژی در برنامه Ry است در حالی که این واحد از ابتدا در برنامه اولیه تصحیح نشده اتمی eV بوده است). ویژه مقادیر انرژی فوق به ترتیب مربوط به حالت های اتمی زیر از اتم آهن می باشند:

1s, 2s, 2p*, 2p, 3s, 3p*, 3p, 3d*, 3d, 4s

که در آنها "*" به حالتهایی با عدد کوانتومی نسبیتی متفاوت اشاره می کند.

ج) مقایسه انرژی جداسازی داده شده (-6.0Ry) با ویژه مقادیر حالت های اتمی نشان می دهد که دو الکترون حالت 3s به عنوان الکترونیهای مغزه اختیار شده اند. علت مغزه بودن دو الکترون 3s آن است که انرژی الکترون اسپین بالای این حالت، -6.8000Ry ، و انرژی الکترون اسپین پایین آن، -6.61035Ry ، کمتر از انرژی جداسازی، -6.0Ry می باشند. این بدان معنی است که اگر به جای عدد -6.0Ry عدد -7.0Ry به عنوان انرژی جداسازی اختیار گردد، آنگاه دو الکترون حالت 3s الکترونیهای ظرفیت به حساب خواهند آمد.

د) در این مرحله باید تحقیق شود که آیا دو الکترون حالت $3s$ رفتاری همانند الکترونهاى مغزه دارند یا رفتار آنها بیشتر شبیه به الکترونهاى ظرفیت (ظرفیت یا نیمه مغزه) است. برای این منظور باید بار کل و بار کل درون کره به ازای هر دو انرژی جداسازی $(-6.0\text{Ry}, -7.0\text{Ry})$ با هم مقایسه شوند. این مقایسه میزان نشت بار از درون کره را نشان خواهد داد. اگر الکترونهاى حالت $3s$ الکترونهاى مغزه باشند، نباید از درون کره به بیرون نشت کنند. اگر الکترونهاى حالت $3s$ الکترونهاى ظرفیت (ظرفیت یا نیمه مغزه) باشند، می توانند از درون کره به بیرون نشت کنند. بار کل و بار کل درون کره به ازای انرژی جداسازی -6.0Ry در خروجی case.outputs به صورت زیر نوشته شده است:

TOTAL CORE-CHARGE:	12.00000000005831
TOTAL CORE-CHARGE INSIDE SPHERE:	11.99785897382221

که معادل با نشتی 0.00214 الکترون به خارج از کره است.
 بار کل و بار کل درون کره به ازای انرژی جداسازی -7.0Ry در خروجی case.outputs به صورت زیر نوشته شده است:

TOTAL CORE-CHARGE:	10.00000000005758
TOTAL CORE-CHARGE INSIDE SPHERE:	9.999999992285076

که معادل با نشتی 0.00000000008 الکترون به خارج از کره است. مقایسه این دو نشتی نشان می دهد که عدد -7.0Ry عدد مناسبتری برای انرژی جداسازی است. این بدان معنی است که الکترونهاى $3s$ اتم آهن رفتاری شبیه به الکترونهاى ظرفیت دارند، که اگر بر آنها با انرژی -6.0Ry تحمیل شود که وارد مغزه گردند، آنگاه به دلیل ماهیت ظرفیت بودنشان از درون کره به خارج نشت خواهند کرد که مطلوب نیست. به عکس اگر با انتخاب انرژی مناسبتر -7.0Ry به الکترونهاى $3s$ اجازه داده شود که به عنوان الکترون ظرفیت ایفای نقش کنند، آنگاه الکترونهاى باقی مانده قبل از حالت $3s$ که واقعا الکترونهاى مغزه هستند هیچ تمایلی به نشت به خارج از کره از خود نشان نمی دهند که مطلوب است. هر چند اکنون واضح است اما ذکر آن خالی از لطف نیست که تعداد الکترونهاى مغزه با انتخاب انرژی جداسازی -6.0Ry برابر دوازده الکترون است (چون دو الکترون $3s$ اکنون درون مغزه می باشند) که به اندازه 2 الکترون بیشتر از ده الکترون مغزه با انتخاب انرژی جداسازی -6.0Ry است (چون دو الکترون $3s$ اکنون خارج مغزه می باشند).

انرژی کل هر اتم نیز یکی دیگر از اطلاعات حاصل از برنامه LSTART است، که از آنها می توان برای محاسبه انرژی همبستگی اتمهای سبک استفاده کرد. برای محاسبه انرژی همبستگی اتمهای سنگین که در آنها برهمکنش اسپین-مدار اهمیت دارد روش ابر یاخته توصیه شده است. در حالت کلی انرژیهای محاسبه شده به روشهای مختلف می توانند با هم قابل مقایسه نباشند. این بدان معنی است که انرژی کل بلوری محاسبه شده به روش LAPW می تواند با انرژیهای اتمی محاسبه شده به روش اتمی دیراک-فوک سازگار نباشد به گونه ای که نتوان از آنها برای یک محاسبه دقیق انرژی همبستگی استفاده کرد. این عدم سازگاری به ویژه با اعمال برهمکنش اسپین-مدار تشدید می گردد. در روش ابر یاخته هم انرژی بلوری و هم انرژی اتمی به روش LAPW محاسبه می شوند. در این روش برای هر اتم یک ابر یاخته ساخته می شود و انرژی کل آن اتم به روش LAPW محاسبه می گردد. اگر چه این ابر یاخته می تواند از هر نوعی باشد ولی تجربه نشان داده است که یک ابر یاخته از نوع fcc با ثابت شبکه مناسب برای این منظور مطلوبتر است. برای تعیین یک ثابت شبکه مناسب با ید به ازای ثابتهای شبکه متفاوت انرژی کل را محاسبه کرد. اگر ثابت شبکه به اندازه کافی بزرگ اختیار شود به گونه ای که اتمها انقدر از یکدیگر دور باشند که با هم هیچ نوع برهمکنشی نداشته باشند، به ثابت شبکه مناسب دست یافته ایم. ذکر این نکته مفید است که افزایش ثابت شبکه حجم محاسبات را افزایش می دهد، پس کمینه ثابتهای شبکه ای که شرط عدم برهمکنش اتمهای درون ابر سلول را برآورده کند یک ثابت شبکه بهینه به شمار می آید.

ورودی دیگر برنامه LSTART تعیین نوع تقریب برای پتانسیل تبادلی-همبستگی است که می تواند هر یک از موارد متعارف زیر

LSDA (Perdew & Wang 92), GGA (Perdew 96), GGA (Perdew 92)

و یا موارد دیگر زیر باشد:

جدول: انواع پتانسیلهای موجود در کد WIEN2k

Potential option	Potential name
11	HPBE GGA-X-Energy, PBE-C-Energy, PBE potential
12	HPBE GGA-XC-Energy, PBE potential
27	TPSS meta GGA-XC-Energy, PBE potential

43	Van Voorhis+G.Scuseria M-GGA (PBE potential)
44	HPBE GGA-X-Energy + KCIS-C energy, PBE potential
13	PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 96 GGA
14	Perdew-Wang 91 GGA
15	Engel-Vosko 93 GGA exchange with Perdew-Wang 91 GGA correlation term
16	Leeuwen exchange potential with Perdew-Wang 91 GGA correlation term
17	Lembarki exchange potential with Perdew-Wang 91 GGA correlation term
18	TH1 (Tozer-Handy 98) GGA
19	TH2 (Tozer-Handy 98) GGA
20	HCTH (Tozer-Handy 98) GGA
21	TH2 (Tozer-Handy 98)-V, HCTH-Energy
22	Filatov-Thiel GGA (PBE potential)
23	BLYP GGA (PBE potential)
24	Revised PBE-X + PBE-C (pbe-potential)
25	Engel-Vosko 93 GGA exchange with LSDA correlation term
26	Engel-Vosko 93 GGA exchange potential with LSDA potential correlation term combined with Perdew-Wang 91 GGA exchange energy with Perdew-Wang 91 GGA correlation term
29	GEA (with coefficient of Engel-Vosko 93 GGA) exchange with LSDA correlation term
30	EX = 1.d0, E-TOT should give number of electrons
31	EX-LDA only
32	EC-LDA only
33	EX-PBE only
34	EC-PBE only
35	for analysing xi and eta (case.vns and case.vsp contains xi and eta in terms of YLM)
36	for analysing (laplace rho) case.vns and case.vsp contains laplace rho in terms of YLM

37	LDA and GGA parts of 3-parameters hybrid functional B3PW91
40	HPBE GGA test
41	HPBE GGA (X only)
42	HPBE-C GGA

عدد کوانتومی اصلی، عدد کوانتومی نسبیتی، عدد اشغال الکترونیهای ظرفیت از طریق ورودی case.inst به برنامه lstart داده می شود. این ورودی case.inst که توسط دستور instgen_lapw بر اساس case.struct داده شده قابل تولید است برای اتم روی به صورت زیر است:

```
ZINC
Ne 6      (inert gas, # OF VALENCE ORBITALS not counting spin)
3,-1,1.0  N      ( N,KAPPA,OCCUP; = 3S UP, 1 ELECTRON)
3,-1,1.0  N      3S DN
3,-2,2.0  N      3P UP
3,-2,2.0  N      3P DN
3, 1,1.0  N      3P*UP
3, 1,1.0  N      3P*DN
3,-3,3.0  P      3D UP
3,-3,3.0  P      3D DN
3, 2,2.0  P      3D*UP
3, 2,2.0  P      3D*DN
4,-1,1.0  P      4S UP
4,-1,1.0  P      4S DN
```

که در صورت استفاده از w2web یا اجرای init_lapw به طور خودکار case.inst ایجاد می شود. که در آن آرایش بی اثر Ne به عنوان مغزه اختیار شده است، $\text{Zn:}[\text{Ne}]3s^23p^63d^{10}4s^2$. این فایل می تواند برای اتم روی به صورت زیر منتهی با مغزه Ar یعنی $\text{Zn:}[\text{Ar}]3d^{10}4s^2$ هم باشد:

```
ZINC
Ar 3      (inert gas, # OF VALENCE ORBITALS not counting spin)
3,-3,3.0  P      3D UP
3,-3,3.0  P      3D DN
3, 2,2.0  P      3D*UP
3, 2,2.0  P      3D*DN
```

4,-1,1.0 P
4,-1,1.0 P

4S UP
4S DN

که در آنها "*" به تغییر عدد کوانتومی نسبیتی، κ ، به ازای یک عدد کوانتومی مداری، l ، اشاره دارد. عدد 6 پس از Ne به عدد 3 پس از Ar تغییر یافته است، زیرا این عدد نصف تعداد حالت‌های ظرفیت با در نظر گرفتن اسپین الکترونهاست. خط آخر این فایل را به عنوان مثال در نظر گرفته، 4,-1,1.0 P، و هر یک از قسمت‌های آن را که با کاما از یکدیگر جدا شده اند را به صورت زیر از چپ به راست تعریف می کنیم: عدد کوانتومی مداری l ، عدد کوانتومی نسبیتی κ ، عدد اشغال الکترونی، و P معرف آن است که چگالی الکترونی این اربیتال اتمی که با اعداد کوانتومی مربوطه معین شده است در فایلی به نام case.sigma نوشته (Print) شود. فایل case.sigma که می تواند شامل جمع تمام اربیتال‌های اتمی باشد و در رسم چگالی ابر الکترونی مورد استفاده قرار گیرد خالی خواهد بود اگر به جای P حرف N نوشته شود. حرف P حتما باید بزرگ نوشته شود، چه در غیر این صورت عمل نخواهد کرد. این نکته می تواند در اینجا حایز اهمیت باشد که عدد اشغال می تواند یک عدد غیر صحیح مثبت باشد (مثلا تولید case.inst اتم هیدروژن می تواند آموزنده باشد!). case.inst لزوما بر ساختار اتمی آنها منطبق نیست، بلکه این فایل به گونه ای تولید می شود که برای مقاصد فعلی برنامه وین مناسب باشد و به انرژی کمینه تراز زمینه آن اتم با کمترین صرف وقت منجر شود. جای تعجب نیست اگر با تغییر عدد اشغال اجرای برنامه با اختطاری شبیه "..... NSTOP=" متوقف شود، زیرا این یک برنامه اتمی تغییر یافته به منظور تولید چگالی‌های اتمی به گونه ای است که در محاسبات بلوری وین به همگرایی مطلوب با صرف کمتر وقت منجر شود، که بازگشت آن به نسخه اولیه اتمی خود مستلزم تغییر پارامترهای ترکیب کننده (Mixing Parameters) است. حداکثر عدد اشغال به ازای عدد کوانتومی نسبیتی و عدد کوانتومی مداری کل برای اربیتال‌های s, p, d, f در جدول زیر آورده شده اند، که در آن مثلا عدد کوانتومی نسبیتی به ازای $l=3; s=\pm 1$ به اعداد 3- و 3+ به صورت زیر

$$l=3; s=\pm 1 \Rightarrow j=3 \pm \frac{1}{2} \Rightarrow j = \begin{cases} \frac{7}{2} \\ \frac{5}{2} \end{cases} \Rightarrow \kappa = -s \left(j + \frac{1}{2} \right) = \begin{cases} -\left(\frac{7}{2} + \frac{1}{2} \right) = -4 \\ +\left(\frac{5}{2} + \frac{1}{2} \right) = +3 \end{cases}$$

منجر خواهد شد که مطابق با جدول زیر 6 الکترون (3 الکترون با اسپین بالا و 3 الکترون با اسپین پایین) در حالت $l=3, \kappa=3$ و 8 الکترون (4 الکترون با اسپین بالا و 4 الکترون با اسپین پایین) در حالت $l=3, \kappa=-4$ با احتساب اسپین قرار می گیرند.

جدول: اعداد کوتتمی نسبیتی

		عدد کوانتومی مداري کل $j = l + s/2$		عدد کوانتومی نسبیتی κ		حداکثر عدد اشغال	
اريتال	l	$s = -1$	$s = +1$	$s = -1$	$s = +1$	$s = -1$	$s = +1$
S	0		1/2		-1		2
P	1	1/2	3/2	1	-2	2	4
D	2	3/2	5/2	2	-3	4	6
F	3	5/2	7/2	3	-4	6	8

KGEN

برنامه KGEN نقاط k در ناحیه اول بریلوئن را روی نقاط شبکه بندی شده خاصی تولید می کند، که می توانند در روش تصحیح شده انتگرالگیری tetrahedron مورد استفاده قرار گیرند. تصحیحاتی که در روش tetrahedron برای انتگرالگیری ناحیه اول بریلوئن انجام شده است اجازه می دهد که از این روش به طور موثری بتوان در روشهای ساختار الکترونی مبتنی بر امواج تخت هم استفاده کرد. ورودی این برنامه case.struct و خروجیهای آن case.outputkgen، case.klist و case.kgen است. خروجی case.klist در برنامه LAPW1 به عنوان ورودی و خروجی case.kgen در برنامه tetra به عنوان ورودی مورد استفاده قرار می گیرند. خروجی case.kgen همچنین می تواند در برنامه LAPW2 به عنوان ورودی مورد استفاده قرار گیرد مشروط بر آنکه در ورودی اصلی برنامه LAPW2 یعنی case.in2 روش محاسبه انرژی فرمی (EF) روش TETRA اختیار شده باشد. بر همکنش اسپین-مدار در ترکیبات مغناطیسی تقارن را کاهش می دهد، بنابراین اجرای برنامه kgen در حضور چنین برهمکنشی ضروری است: `x kgen -so`.

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 هماهنگهای 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.

جدول: ورودیها و خروجیهای ضروری و اختیاری برنامه های مرحله آماده سازی.

برنامه ها	ورودیهای		خروجیهای	
	ضروری	اختیاری	ضروری	اختیاری
NN	nn.def		case.outputnn	Case.struct_nn
	case.struct			
SGROUP	case.struct		case.outputsgroup	Case.struct_sgroup
SYMMETRY	symmetry.def		case.outputs	Case.struct_st
	case.struct	case.in2_st	case.in2_sy	
LSTART	lstart.def		case.outputst	Case.vspup
	case.struct		case.vsp	Case.vspdn
	case.inst		case.in0_st	Case.vsp_st
			case.in1_st	Case.vspdn_st
			case.in2_st	Case.sigma
			case.inc_st	

			case.inm_st	
			case.inm_restart	
KGEN	kgen.def		case.outputkgen	
	case.struct		case.klist	
			case.kgen	
DSTART	dstart.def		case.outputd	
	case.struct		case.clmsum(up)	
	case.rsp(up)		Dstart.error	
	case.in1			
	case.in2			

اگر چه تک تک برنامه های مرحله آماده سازی به صورت زیر قابل اجرا هستند:

نام برنامه x

مثلاً:

x lstart

اما همه آنها به طور پیوسته توسط برنامه `init_lapw` قابل اجرا هستند. برای این منظور کافی است که دستور `init_lapw` یا به طور ساده تر دستور `init` اجرا شود. این برنامه علاوه بر اجرای تک تک برنامه های مرحله آماده سازی کارهای اضافه تری نیز انجام می دهد مثل: تولید بعضی از فایل های ورودی برنامه های مرحله حل خودسازگار، ذخیره کردن یک فایل تغییر یافته با نام دیگر، اعلان برخی هشدارهای مفید که بر اساس آنها علت بعضی از خطاها تا حدودی مشخص می شود و همچنین مطرح کردن سوالات مناسبی در برخی از مراحل و نشان دادن عکس العمل مناسب در مقابل پاسخ داده شده به سوالات. لازم به ذکر است که اجرای این برنامه مستلزم فقط داشتن فایل `case.struct` است. برنامه `init_lapw` و تمام برنامه هایی که برنامه های اصلی نوشته شده به زبان `FORTRAN90` را به هم مربوط می کنند (بجز برنامه های موجود در `SRC_w2web/` که به زبان `PERL` نوشته شده اند) در واقع برنامه های سیستم عاملی هستند که در لایه `C-shell` از سیستم عامل لینوکس (`Linux`) نوشته شده اند. اما این بدان معنی نیست که لایه لازم برای نصب کد باید لزوماً `csh` یا `tcsch` باشد، بلکه کد وین می تواند در لایه `bash` و یا لایه های دیگر سیستم عامل لینوکس نصب شود. زیرا از یک لایه غیر `C` می توان با دستور `/bin/csh` این لایه را فراخوانی کرد، که این تمهید در برنامه های سیستم عاملی وین اندیشیده شده است. اما آنچه که (در حال حاضر) ضروری است نصب بر روی سیستم عامل لینوکس است.