

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.**