

LCORE

برنامه LCORE نسخه تصحیح شده یک کد اتمی است. این کد با استفاده از تقریب LSDA در معادله دیراک-فوک به حل کاملاً نسبیتی الکترونیهای مغزه (با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین-مدار) و یا حل غیر نسبیتی اگر NERL در case.struct تصریح شده باشد می پردازد [J. P. Desclau]. می پردازد. ورودیهای این برنامه case.struct، case.inc، case.vsp و خروجیهای آن case.outputc، case.scfc، case.clmcor اند. بخش کروی پتانسیل تولید شده case.vsp توسط برنامه LAPW0 در هر مرحله به عنوان ورودی مورد استفاده قرار می گیرد. برنامه LCORE مقادیر ویژه، case.clmcore، چگالیهای متناظر الکترونیهای مغزه و سهم الکترونیهای مغزه در نیروهای اتمی را به دست می دهد. نمونه ای از ورودی case.inc به صورت زیر است:

```

4 0.0          # of orbitals,  shift of
potential
1,-1,2         n (principal quantum
number), kappa, occup. number
2,-1,2         2s
2,-2,4         2p
2, 1,2         2p*
1 0.0          # of orbital of
second atom
1,-1,2         1s
0              end switch

```

ساختار ورودی case.inc شبیه به ورودی اصلی برنامه LSTART
 یعنی case.inst است. برنامه های LSTART و LCORE نیز
 دارای یک ریشه اتمی و بسیار شبیه به یکدیگرند. پس در اینجا فقط
 به تفاوت ورودی case.inc با ورودی case.inst می پردازیم. جابه
 جایی انرژی پتانسیل در خط اول (0.0) برای اعمال روش مغزه
 باز open core اندیشیده شده است. در صورت استفاده از روش
 مغزه باز باید مقدار غیر صفر مناسب برای این جابه جایی به دست
 آورده شود. توصیف خطوط بعدی عینا همان است که در مورد
 case.inst قبلا ارایه شد. برخلاف case.inst که در آن اسپین

**الکترونهاى ازهم تفکيک شده بودند در case.inc الکترونهاى
اسپين بالا و پايين با هم در نظر گرفته شده اند.**