

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.