

جدول: ورودیها و خروجیهای ضروری و اختیاری برنامه های مرحله حل خودسازگار.

برنامه ها	ورودیهای		خروجیهای	
	ضروری	اختیاری	ضروری	اختیاری
LAPW0	Lapw0.def	case.clmup/dn	case.output0	Case.r2v
	case.struct		case.scf0	Case.vcoul
	case.in0		case.vsp(up/dn)	
	case.clmsum		case.vns(up/dn)	
ORB	orb.def	case.scf1	case.outputorb	Case.br1orb
	case.struct	case.vorb_old	case.scforb	Case.br2orb
	case.inorb		case.vorb	Case.weigh
	case.dmat		orb.error	
	case.vsp			
LAPW1	lapw1.def	case.vns	case.output1(s)	Case.nsh(s)
	case.struct	case.klist	case.scf1(s)	
	case.in1		case.vector(s)	
	case.vsp		case.energy	
LAPWSO	lapwso.def			
	case.struct		case.outputso	case.vectorso
	case.inso		case.scfso	case.vectordum
	case.vector	case.norm	lapwso.error	
	case.vsp			

	case.energy			
LAPW2	lapw2.def	case.kgen	case.output2(s)	case.qtl(s)
	case.struct	case.nsh(s)	case.scf2(s)	case.weight
	case.in2(s)	case.weight	case.clm[val sc]	case.weigh
	case.vector(s)	case.weigh	case.help3*	
	case.vsp			
	case.energy			
LAPWDM	lapwdm.def	case.inso	case.outputdm	
	case.struct		case.scfdm	
	case.indm		case.dmat	
	case.vector		lapwdm.error	
	case.vsp			
	case.weigh			
	case.energy			
SUMPARA	case.struct	case.scf2p	case.outputsum	
	case.clmval		case.clmval	
			case.scf2	
LCORE	lcore.def	case.vns	case.outputc	case.corewf
	case.struct		case.scfc	
	case.inc		case.clmcor	
	case.vsp		lcore.error	
بعد از LCORE فایل‌های case.scf x به فایل case.scf ضمیمه می شوند و همچنین،				

فایل **case.clmsum** به فائل **case.clmsum_old** تغییر نام می یابد

MIXER	mixer.def	case.clmsum_old	case.outputm	case.broyd1
	case.struct	case.clmsc	case.scfm	case.broyd2
	case.inm	case.clmcor	case.clmsum	
	case.clmval	case.scf	mixer.error	
		case.broyd1		
		case.broyd2		

بعد از MIXER فایل **case.scfm** به فایل **case.scf** ضمیمه می شود
بنابراین

پس از پایان یک چرخه دو فایل عمده عبارتند از **case.scf** و **case.clmsum**