

Geometrieüberprüfung

nn



Bestimmung der Punkt- und Raumgruppen

sgroup



Auswerten der Symmetrie

symmetry



Generiere atomares $n(\mathbf{r})$

lstart



Generiere \mathbf{k} -Gitter

kgen



Generiere interstitielles $n(\mathbf{r})$

dstart
(dstart -up / -dn)



Selbstkonsistenzzyklen