模块与变量声明、初始赋值 打开必要的文档 写版本信息

读入POSCAR文件头 读入POTCAR 读入INCAR 准备芯层移动相关的计算 k空间能量展宽相关准备

> 再次读入POTCAR 准备LDA+U初始化

原子PAW计算的电荷密度差一 致性检验

读入POSCAR

响应函数等相关初始设置 交换-相关势列表

> 晶体对称性初始化 读KPOINTS文件 生成k点有关的量

设置波函数有关的基本量 k空间网格点生成

设置波函数有关的基本量 生成k空间网格点

写出各类初始化信息 晶格参数、k点信息