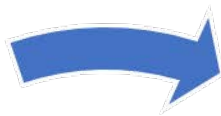


猜测波函数
初始结构



计算Fock
矩阵

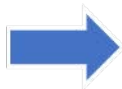


求解HF
方程



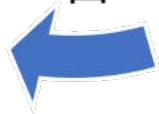
判断前后两
次结果是否
收敛

是



输出
波函数结构

否



作出下一
步猜测

猜测方法：
最陡下降法
(拟) 牛顿法
DIIS算法
.....