

Démarrage SCF : Initialiser les orbitales $\mathbf{C}^{(0)}$

Construire la matrice de Fock $\mathbf{F}^{(k)}$

Résoudre l'équation de
Roothaan-Hall : $\mathbf{FC} = \mathbf{SC}\epsilon$

Mettre à jour les orbitales $\mathbf{C}^{(k+1)}$

Convergence atteinte ?

Non

Retourner à $\mathbf{F}^{(k)}$

Oui

Terminer : \mathbf{C} et ϵ convergés

