

Inizializzazione

ρ^{in}

v_{eff}

$$\{H^{KS}\}_{ij} = \langle \psi_i | \left[\left(-\frac{\nabla^2}{2} + \hat{v}_{eff} \right) | \psi_j \rangle \right]$$

$$\det(H^{KS} - \varepsilon I) = 0$$

$\{ \psi_i \}^{out}$

ρ^{out}

$\rho^{out} \quad \{ \varepsilon_i \}$

$\rho^{out} \rightarrow \rho^{in}$

No

Auto
Consistenza
?

Si

Auto
Consistenza
Raggiunta

