

Inizializzazione

$\rho^{in}$

$v_{eff}$

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

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

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

$\rho^{out}$

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

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

No

Auto  
Consistenza  
?

Si

Auto  
Consistenza  
Raggiunta

