

Definir molécula: $\{R_A, Z_A, N\}$ en una base $\{\phi_\mu\}$

Calcular integrales: $S_{\mu\nu}, H_{\mu\nu}, (\mu\nu|\lambda\sigma)$

Iniciar matriz de densidad $P = 0$

Matriz de Fock: $F = H + G(P)$

Ortogonalizar la base: $X^\dagger S X = I$

Diagonalizar Fock en la nueva base: $F' = X^\dagger F X \Rightarrow C', \epsilon$

Actualizar $C = X C'$ y nueva densidad $P_{\mu\nu} = 2 \sum_i C_{\mu i} C_{\nu i}$

Convergencia?

Sí

Terminar SCF

No