

Comme on vient de le montrer, le potentiel effectif de Kohn–Sham depend de la densite electronique, elle-meme calculee a partir des fonctions d'ondes des electrons independants, qui, a leur tour, dependent du potentiel calcule a partir de la densite, ... etc. Les fonctions de bases de type atomique (fonctions de Slater) sont exposees brievement en fin de cette partie. Pour traiter ces equations, les orbitales de Kohn–Sham doivent etre developpees sur une base de fonctions