

Comme on vient de le montrer, le potentiel effectif de Kohn–Sham dépend de la densité électronique, elle-même calculée à partir des fonctions d'ondes des électrons indépendants, qui, à leur tour, dépendent du potentiel calculé à partir de la densité, ... etc. Les fonctions de bases de type atomique (fonctions de Slater) sont exposées brièvement en fin de cette partie. Pour traiter ces équations, les orbitales de Kohn–Sham doivent être développées sur une base de fonctions.