$$H_\sigma = \sum_k \varepsilon_k \tilde{n}_{k\sigma} + \sum_m E_{m\sigma} \tilde{n}_{m\sigma} + \sum_{m,k} (V_{km} C^*_{k\sigma} C_{m\sigma} + V_{mk} C^*_{m\sigma} C_{k\sigma}) \tag{7}$$

où : $$E_{m\sigma} = E_o + \sum_{m' \neq m} (U_{mm'} - J_{mm'}) n_{m'\sigma} + \sum_{m'} U_{mm'} n_{m'-\sigma} \tag{8}$$

Les éléments diagonaux de la fonction de Green $G^\sigma_{mm}(E) = \langle m\sigma \left| \frac{1}{E+is-H} \right| m\sigma \rangle$ sont simplement reliés à la densité d'états supplémentaire due au mélange de l'état $(m\sigma)$ avec les états du continuum :

$$\rho_{m\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\, G^\sigma_{mm}(E) \tag{9}$$

et les équations pour les fonctions de Green sont :

$$G^\sigma_{mm'}(E - E_{m'\sigma}) - \sum_k V_{km'} G^\sigma_{mk} = \delta_{mm'} \tag{10.a}$$

$$G^\sigma_{mk}(E - \varepsilon_k) - \sum_{m'} V_{m'k} G^\sigma_{mm'} = 0 \tag{10.b}$$

En général, $G^\sigma_{mm'}$ est différent de zéro pour m différent de m' à cause de l'effet de champ cristallin ; nous négligeons ici cet effet, ce qui est exact pour des surfaces d'énergie constante sphériques, par exemple pour une bande de conduction d'électrons libres. $G^\sigma_{mm'}$ peut alors s'écrire :

$$G^\sigma_{mm'} = \frac{\delta_{mm'}}{E - E_{m\sigma} - \Gamma + i\Delta} \tag{11}$$

avec Γ et Δ indépendants de l'orbitale considérée. On peut supposer (Anderson 1961) que Γ et Δ sont indépendants de l'énergie E et tenir compte de Γ en déplaçant l'énergie non perturbée E_o. La densité d'états supplémentaire introduite par l'état $(m\sigma)$ est :

$$\rho_{m\sigma}(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{\Delta^2 + (E - E_{m\sigma})^2} \tag{12}$$