

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

$$\text{où : } E_{m\sigma} = E_0 + \sum_{m' \neq m} (U_{mm'} - J_{mm'}) n_{m'\sigma} + \sum_{m'} U_{mm'} n_{m'-\sigma} \quad (8)$$

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

$$\rho_{m\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G_{mm}^{\sigma}(E) \quad (9)$$

et les équations pour les fonctions de Green sont :

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

$$G_{mk}^{\sigma}(E - \epsilon_k) - \sum_{m'} V_{m'k} G_{mm'}^{\sigma} = 0 \quad (10.b)$$

En général, $G_{mm'}^{\sigma}$ 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. $G_{mm'}^{\sigma}$ peut alors s'écrire :

$$G_{mm'}^{\sigma} = \frac{\delta_{mm'}}{E - E_{m\sigma} - \Gamma + i\Delta} \quad (11)$$

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_0 . La densité d'états supplémentaire introduite par l'état ($m\sigma$) est :

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