

Dans (15), le premier terme somme des énergies Hartree-Fock à un électron tient compte deux fois de l'énergie d'interaction ; il faut donc retrancher cette énergie (deuxième et troisième termes de (15)).

La dérivée de l'énergie totale $\mathcal{G}$ par rapport à E_{OF} est égale au nombre total d'électrons N localisés (ceci est vrai quelle que soit la forme de la densité d'états $\rho_{m\sigma}(E)$) :

$$\frac{d\mathcal{G}}{dE_{OF}} = N = \sum_{m,\sigma} n_{m\sigma} \quad (16)$$

Le nombre total d'électrons localisés N et E_{OF} sont donc des variables conjuguées : N est la variable extensive et E_{OF} la variable intensive.