

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.