

§ 2. - MODELE THEORIQUE

Le modèle théorique utilisé est une extension du modèle d'état lié virtuel au cas d'états dégénérés d'orbite en utilisant le formalisme d'Anderson.

2.1. - ETATS NON DEGENERES D'ORBITE.

Rappelons brièvement les résultats de la méthode d'Anderson (1961). L'Hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k \tilde{n}_{k\sigma} + E_0 \sum_{\sigma} \tilde{n}_{\sigma} + U \tilde{n}_{+} \tilde{n}_{-} + \sum_{k,\sigma} (V_{kf} C_{k\sigma}^* C_{\sigma} + V_{fk} C_{\sigma}^* C_{k\sigma}) \quad (1)$$

$\tilde{n}_{k\sigma}$ désigne l'opérateur nombre d'électrons pour les électrons de conduction, \tilde{n}_{σ} l'opérateur nombre d'électrons pour les électrons localisés.

En utilisant l'approximation de Hartree-Fock, on trouve la forme de la densité d'états $\rho_{\sigma}(E)$ supplémentaire de l'état localisé résonant avec les électrons de conduction :

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

où Δ est la demi-largeur de l'état lié virtuel et :

$$E_{\sigma} = E_0 + U n_{-\sigma} \quad (3)$$

où n_{σ} est la valeur moyenne de l'opérateur \tilde{n}_{σ} .

La solution self-consistante du problème est donnée par le système des deux équations :

$$\Delta \cotg \pi n_{\sigma} = E_0 - E_F + U n_{-\sigma} \quad (4)$$