Ce système d'équations (4) peut avoir des solutions magnétiques ou non magnétiques. Si $E_o - E_F$ est grand, la solution est non magnétique. Si $E_o - E_F$ diminue, on obtient une solution magnétique, quand :

$$U\rho(E_F) = 1 \tag{5}$$

analogue à la condition de Stoner pour l'apparition du ferromagnétisme dans une bande. Si $E_o - E_F$ diminue encore, le moment magnétique augmente ; enfin l'état devient presque plein et on a à nouveau une solution non magnétique (figure 1). La transition du cas non magnétique au cas magnétique est une transition du 2ème ordre, c'est-à-dire que l'on a une augmentation continue du moment magnétique, si E_o varie par rapport à E_F(sous l'influence de la pression par exemple).

2.2. - ETATS DEGENERES D'ORBITE.

Dans le cas d'états dégénérés d'orbite, l'Hamiltonien s'écrit (K. Yosida et al., 1965) :

$$\begin{aligned} H = \sum_k \varepsilon_k \tilde{n}_{k\sigma} + E_o \sum_{m,\sigma} \tilde{n}_{m\sigma} + \sum_{m,k,\sigma} (V_{km} C^*_{k\sigma} C_{m\sigma} + V_{mk} C^*_{m\sigma} C_{k\sigma}) \\ + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m,m',\sigma \\ (m\neq m')}} (U_{mm'} - J_{mm'}) \tilde{n}_{m\sigma} \tilde{n}_{m'\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{m,m',\sigma} U_{mm'} \tilde{n}_{m\sigma} \tilde{n}_{m'-\sigma} \end{aligned} \tag{6}$$

où σ est le nombre quantique de spin et m le nombre quantique orbital de chaque état localisé. Pour un état de ℓ donné, m varie de -ℓ à +ℓ (le nombre ℓ est égal à 1 pour un état p, 2 pour un état d et 3 pour un état f). Les trois premiers termes représentent une extension triviale au cas dégénéré de l'Hamiltonien d'Anderson. Dans les deux derniers termes, on tient compte des intégrales de Coulomb $U_{mm'}$ et d'échange $J_{mm'}$ entre différentes orbitales.

On traite le problème dans l'approximation de Hartree-Fock en suivant la méthode d'Anderson. L'Hamiltonien à un électron de spin σ est :