

Toute la discussion de ce cas est basée sur le système d'équations self-consistentes à température nulle :

$$\Delta \cotg \pi n_{m\sigma} = E_{OF} + \sum_{m' (\neq m)} (U_{mm'} - J_{mm'}) n_{m'\sigma} + \sum_{m'} U_{mm'} n_{m'-\sigma} \quad (13)$$

en comptant l'énergie E_O par rapport au niveau de Fermi :

$$E_{OF} = E_O - E_F \quad (14)$$

Dans la partie suivante, on étudie les solutions des équations (13) en faisant varier E_{OF} ; la discussion de ces équations dépend des paramètres $U_{mm'}$, $J_{mm'}$, et Δ dont on détermine l'ordre de grandeur pour les différents cas physiques dans la partie 4.

2.3. - ENERGIE TOTALE.

La différence d'énergie entre l'alliage avec une impureté et le métal pur est la somme d'une contribution des électrons de conduction et d'une contribution des électrons localisés dans les états liés virtuels.

Dans l'approximation où Γ et Δ sont supposés indépendants de l'énergie, la contribution venant de la variation de la densité d'états des électrons de conduction due à l'introduction des niveaux liés virtuels est strictement nulle. Pour garder le nombre total d'électrons constant, il suffit donc de tenir compte du transfert des électrons localisés dans la bande de conduction à l'énergie de Fermi E_F , ce qui revient à compter les énergies à partir de E_F ; l'énergie totale à température nulle est* :

$$\mathcal{E} = \sum_{m,\sigma} \int_{-\infty}^{E_F} (E - E_F) \rho_{m\sigma}(E) dE - \frac{1}{2} \sum_{\substack{m,m',\sigma \\ (m \neq m')}} (U_{mm'} - J_{mm'}) n_{m\sigma} n_{m'\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{m,m',\sigma} U_{mm'} n_{m\sigma} n_{m'-\sigma} \quad (15)$$

* Les intégrales intervenant dans cette expression (15) sont divergentes pour une densité d'états de forme lorentzienne ; en fait cette divergence n'existe pas physiquement, car on prend pour borne inférieure de l'intégrale le bas de la bande de conduction ; dans le cas physique où E_{OF} est très petit par rapport à la largeur de la bande de conduction, l'énergie totale est alors définie à une constante près, ce qui revient à prendre une origine arbitraire sur les courbes de l'énergie en fonction de E_{OF} .