

permet de décrire le mélange des électrons localisés de caractère f et des électrons de conduction et aussi car il tient compte explicitement de la dégénérescence orbitale de l'état 4f.

De plus, le modèle que nous avons développé dans la partie précédente décrit typiquement un alliage dilué de terre rare dans une matrice normale ; cependant, dans le cas des terres rares, cette méthode peut aussi être appliquée aux métaux purs. On sait en effet que, dans le métal pur de terre rare, les couches 4f ont une très faible extension spatiale par rapport aux distances interatomiques ; donc la fonction d'onde exacte doit être un mélange de fonctions d'onde à caractère s et à caractère f sur l'atome, mais partout ailleurs elle est pratiquement une fonction d'onde d'électrons s.

On peut donc en première approximation négliger les diffusions multiples et décrire le métal pur comme une collection d'impuretés sur chaque site cristallin. On peut d'ailleurs trouver une justification de la faiblesse des diffusions multiples : les petites valeurs expérimentales des températures d'ordre magnétique dans les métaux purs de terres rares donnent en effet de petites valeurs des couplages magnétiques. Nous appliquons donc maintenant notre modèle aux métaux de terres rares.

Il est tout d'abord important de connaître l'ordre de grandeur des paramètres physiques  $U$ ,  $J$  ( $F_0$ ,  $F_2$ ) et  $\Delta$ . On sait que la demi-largeur des états liés virtuels 4f est très petite, de l'ordre de quelques centièmes d'électron-volt ; de récents calculs de bandes (J.O. Dirmock et al. 1964) et surtout de récentes expériences d'absorption optique (J.F. Wilkins et al. 1962) permettent d'évaluer approximativement cette demi-largeur à 0,01<sup>ou 0,02</sup> électron-volt. Nous reviendrons sur ce point dans la partie 6 sur le Cérium. Puisque, la largeur de l'état lié virtuel est très petite pour les terres rares, les intégrales de Coulomb et d'échange effectives intervenant dans les conditions d'apparition du magnétisme peuvent être considérablement plus petites que les intégrales de Coulomb et d'échange atomiques ; ceci dépend de manière critique du remplissage de l'état lié virtuel. Les valeurs de  $E_{mF}$  correspondant aux conditions d'apparition du magnétisme sont grandes par rapport à  $\Delta$  et d'après la formule (53), l'intégrale de Coulomb effective reste grande par rapport à  $\Delta$ , de l'ordre de quelques dizaines à une centaine de  $\Delta$ , c'est-à-dire de l'ordre d'un électron-volt. L'intégrale d'échange est moins réduite par les corrélations que l'intégrale de