

§ 5. - ETUDE DE LA DEGENERESCENCE ORBITALE A TEMPERATURE FINIE

Dans cette partie, on étudie le cas dégénéré d'orbite à température finie. Ce traitement est certainement imparfait comme toute théorie utilisant l'approximation de Hartree-Fock. Cette théorie a deux défauts majeurs :

1°) L'approximation de Hartree-Fock est une théorie à un électron : on néglige l'entropie associée aux excitations collectives et on ne tient compte que de l'entropie associée aux excitations individuelles.

2°) Les fonctions d'onde qui décrivent les différentes orientations du moment magnétique possibles de l'impureté ne forment pas une base irréductible pour le groupe de rotation. On ne décrit donc pas l'entropie associée aux fluctuations des composantes transverses du spin; de toutes façons, dans le cas où les états localisés sont partiellement remplis, on ne sait pas calculer ce terme supplémentaire des excitations individuelles et on le néglige dans la suite. En définitive, on ne peut donc pas calculer le moment magnétique total dans la région paramagnétique et on ne sait en fait déterminer que sa composante le long de l'axe Oz.

L'influence de la température n'est importante que si la température kT est de l'ordre de la demi-largeur de l'état lié virtuel Δ . La température n'a pratiquement pas d'influence dans le cas des états liés virtuels p et d pour lesquels la largeur est de l'ordre de l'électron-volt et le traitement à température nulle permet de décrire complètement ces deux cas, comme nous l'avons vu dans la partie précédente. Ce traitement à température ^{nulle} est aussi valable pour les terres rares normales de configurations $4f^n$, car la température modifie très peu les résultats, si les orbitales sont pratiquement pleines ou pratiquement vides. Dans le cas du Cérium et de l'Ytterbium la largeur est de l'ordre de kT pour les températures usuelles et E_{OF} proche d'une valeur critique; l'effet de la température est certainement important. Le traitement à température finie développé dans cette partie s'applique donc essentiellement aux états liés virtuels $4f$ dans le Cérium et l'Ytterbium.