

5.1. - FORMALISME A TEMPERATURE FINIE.

Quand on passe du traitement à température nulle au traitement à température finie, la seule modification dans l'approximation de Hartree-Fock vient de l'intégrale donnant le nombre $n_{m\sigma}$ dans chaque orbitale :

$$n_{m\sigma} = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{m\sigma}(E, T) dE = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{m\sigma}(E) \frac{1}{1 + \exp \frac{E - E_F}{kT}} dE \quad (62)$$

où $\rho_{m\sigma}(E)$ est la densité d'états supplémentaire définie à température nulle et $\rho_{m\sigma}(E, T)$ la nouvelle densité d'états supplémentaire.

Soit, $n = G_T \left(\frac{E_{OF}}{\Delta} \right)$ la fonction de $\frac{E_{OF}}{\Delta}$ avec $\frac{\Delta}{kT}$ pour paramètre, définie par l'intégrale :

$$n = G_T \left(\frac{E_{OF}}{\Delta} \right) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{1+x^2} \frac{1}{1 + \exp \frac{\Delta}{kT} \left(x + \frac{E_{OF}}{\Delta} \right)} \quad (63)$$

et soit $\frac{E_{OF}}{\Delta} = \phi_T(n)$ la fonction inverse de la fonction $G_T \left(\frac{E_{OF}}{\Delta} \right)$.

A température nulle $\phi_{T=0}(n) = \cotg \pi n$.

Pour passer du système d'équations self-consistentes à température nulle au système à température finie, il suffit de remplacer la fonction $\cotg \pi n$ par la fonction $\phi_T(n)$.

Le système d'équations self-consistentes s'écrit donc :

$$\Delta \phi_T(n_{m\sigma}) = E_{OF} + \sum_{m' (\neq m)} (U_{mm'} - J_{mm'}) n_{m'\sigma} + \sum_{m'} U_{mm'} n_{m'-\sigma} \quad (64)$$

La fonction $\phi_T(n)$, calculée dans l'appendice IV, a la même allure que la fonction $\cotg \pi n$ et sa valeur absolue augmente avec la température, quelle que soit la valeur de n .