L'énergie totale est obtenue à partir de l'expression générale (15) en prenant la forme de densité d'états $\rho_{m\sigma}(E,T)$ à température finie définie par (62) :

$$\mathcal{E} = \sum_{m,\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(E-E_F)\rho_{m\sigma}(E)\, dE}{1 + \exp \frac{E-E_F}{kT}} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{m,m',\sigma \\ (m\neq m')}} (U_{mm'} - J_{mm'}) n_{m\sigma} n_{m'\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{m,m',\sigma} U_{mm'} n_{m\sigma} n_{m'-\sigma} \qquad (65)$$

et $$\frac{d\mathcal{E}}{dE_{oF}} = N = \sum_{m,\sigma} n_{m\sigma} \qquad (66)$$

5.2 - DOUBLE DEGENERESCENCE ORBITALE DANS LE CAS OU J = 0.

Le système d'équations self-consistentes (64) s'écrit quand J est nul :

$$\varphi_T(n_{m\sigma}) = \Phi_T(n_{m\sigma}) + \frac{U}{\Delta} n_{m\sigma} = \frac{E_{oF} + U N}{\Delta} \qquad (67)$$

A température nulle, la fonction $\varphi_{T=0}(n)$ est égale à la fonction $\varphi(n)$ définie dans la partie 3. La fonction $\varphi_T(n)$ est tracée sur la figure 35 pour différentes valeurs de la température et pour $\frac{U}{\Delta}$ donné. On peut faire une discussion graphique des équations (67) avec cette fonction $\varphi_T(n)$ comme à température nulle avec la fonction $\varphi(n)$.

Pour $\frac{U}{\Delta}$ donné (supérieur à $\pi$), la fonction $\varphi_T(n)$ a un maximum et un minimum pour les petites valeurs du rapport $\frac{kT}{\Delta}$, alors qu'elle n'a plus d'extremum au-dessus d'une valeur critique $\frac{kT_o}{\Delta}$ du rapport $\frac{kT}{\Delta}$ (La courbe $\varphi_{T_o}(n)$ a un point d'inflexion à tangente horizontale pour $n = \frac{1}{2}$). La valeur de $\frac{kT_o}{\Delta}$ augmente avec $\frac{U}{\Delta}$ ($\frac{kT_o}{\Delta}$ est de l'ordre de $\frac{1}{4}\ \frac{U}{\Delta}$ pour $U \gg \Delta$).

Pour $\frac{U}{\Delta}$ donné, quand la température est inférieure à $T_o$, on obtient, quand $E_{oF}$ diminue, un cas magnétique de spin et d'orbite (région (I) sur la figure 18), puis un cas magnétique de spin avec les orbitales de même spin également remplies (région (II) sur la figure 18) et enfin un cas magnétique de spin et d'orbite (région (III) sur la figure 18). Les transitions qui font passer d'un cas au suivant sont du 1er ordre et les sauts $\Delta N$ du nombre total d'électrons à ces transitions diminuent quand la température augmente; ces sauts $\Delta N$ s'annulent pour $T = T_o$ et les valeurs de $E_{oF}$ des transitions tendent vers $E_{oF} = -\frac{3U}{2}$. Au-dessus de $T_o$, la