

L'enthalpie libre G_L par atome est donc :

$$G_L = \mathcal{G}_L + pv \approx \mathcal{G}_0 + \frac{\alpha}{2}(v - v_0)^2 + pv \quad (69)$$

Le volume atomique v correspondant à la position d'équilibre stable du cristal est déterminé par le minimum de G par rapport à v , ce qui donne l'équation d'état :

$$p \approx -\alpha(v - v_0) \quad (70)$$

où α est directement relié à la compressibilité K_0 du Lanthane :

$$\alpha = \frac{1}{K_0 v_0} \quad (71)$$

Dans le cas du Cérium, nous faisons les approximations suivantes :

- la bande de conduction est identique à celle du Lanthane,
- la densité d'états $n(E)$ de cette bande au voisinage du niveau de Fermi est constante et indépendante du volume.

Par contre, nous tenons compte de la variation du niveau de Fermi $\epsilon_F(v)$ du Lanthane avec le volume. Nous vérifierons que ces approximations sont cohérentes. Dans ces conditions, si le Cérium a $3 + N_c$ électrons de conduction (le nombre d'électrons f est $N = 1 - N_c$), le niveau de Fermi E_F correspondant au volume v est :

$$E_F = \epsilon_F(v) + \frac{N_c}{n(E_F)} \quad (72)$$

L'état lié virtuel $4f$ introduit dans l'expression de l'énergie libre le terme $\mathcal{G} + N E_F$ où $\mathcal{G}$ est définie par l'équation (65) valable pour une impureté. L'entropie associée aux électrons $4f$ est contenue dans (65). L'enthalpie libre par atome est donc :

$$G \approx \mathcal{G}_L + N_c \left[\epsilon_F(v) + \frac{N_c}{2n(E_F)} \right] + \mathcal{G} + N E_F + pv \quad (73)$$