

$\frac{|V_{kf}|^2}{E_{111} - E'_{100}}$. Ce cas permet de retrouver les principaux résultats du modèle décrit ci-dessus avec une bande^{de} conduction d'électrons libres : l'Ytterbium devient un semi-métal, puis un semi-conducteur de bande interdite croissante quand on augmente la pression. Dans le cas où E_{111} est voisin de E'_{100} , la bande interdite maximum est supérieure à la valeur donnée par le modèle d'électrons libres et peut être de l'ordre du dixième d'électron-volt.

Ce dernier cas où E_{111} est peu supérieur à E'_{100} permet de bien rendre compte des expériences de résistivité sous pression. De plus cette situation correspond à une structure de bandes et à une topologie des surfaces d'énergie constante très probables dans le cas d'un métal divalent comme l'Ytterbium.

Enfin, il faut tenir compte de la dégénérescence orbitale réelle du niveau 4f. L'addition de la dégénérescence orbitale complique les calculs, mais ne modifie pas considérablement les résultats. L'Ytterbium étant divalent avec une couche 4f presque pleine, il y a 8 électrons s et f pour chaque direction de spin. Sans mélange s-f, on a une bande s et 7 bandes f dégénérées d'énergie E_m pour chaque direction de spin. Le mélange s-f modifie la structure de bandes comme dans le modèle sans dégénérescence orbitale.

Quand on traite la bande de conduction dans l'approximation des électrons libres, les éléments de matrice V_{km} de mélange s-f sont proportionnels aux harmoniques sphériques $Y_3^m(\theta_k, \phi_k)$ pour la direction k considérée. Avec mélange s-f, il subsiste une bande de caractère f six fois dégénérée à l'énergie E_m et deux nouvelles bandes de caractère mixte s et f séparées par une bande interdite, d'une manière tout à fait analogue au cas non dégénéré de la figure 30. En ce qui concerne les deux nouvelles bandes de caractère mixte s et f, la seule modification par rapport au cas non dégénéré provient du remplacement dans les formules (87) et (88) de $|V_{kf}|^2$ par $\sum_m |V_{km}|^2$; cette somme est constante et indépendante de la direction du vecteur d'onde \vec{k} ; cependant la largeur de la bande interdite pour une direction de \vec{k} donnée dépend de la position de E_m par rapport au bas et au haut de la bande de conduction et par suite de la direction de \vec{k} . L'addition de la dégénérescence orbitale dans le cas d'une bande de conduction traitée en électrons libres permet de retrouver la discussion du cas non dégénéré avec les trois possibilités : métal, semi-métal et semi-conducteur de bande interdite croissante. De plus, dans ce dernier cas, la largeur de la bande interdite (analogue à la formule (88) du cas non dégénéré) est égale à :