

§ 3. - ETUDE DU CAS DEGENERÉ D'ORBITE

Avant d'étudier le cas réel d'un état de moment orbital  $l$  donné, on discute le cas d'un état deux fois dégénéré d'orbite avec deux orbitales  $|1\rangle$  et  $|2\rangle$ . Ces orbitales peuvent être par exemple un doublet de composantes du moment orbital  $l_z = +1$  et  $l_z = -1$ , ce qui représente le cas d'un état  $p$  dans un fort champ cristallin quadratique. Dans ce cas doublement dégénéré et dans l'approximation de Hartree-Fock à laquelle on se limite, on a une seule intégrale de Coulomb  $U$  et une seule intégrale d'échange  $J$ . Le système d'équations est alors :

$$\Delta \cotg \pi n_{m\sigma} = E_{OF} + U(n_{1-\sigma} + n_{2-\sigma}) + (U - J)n_{m,\sigma} \quad (\text{avec } m' \neq m) \quad (17)$$

On étudie les solutions des équations (17) en faisant varier  $E_{OF}$ . On étudie d'abord le cas doublement dégénéré avec  $J = 0$ , puis le cas avec  $J \neq 0$  et enfin on discute le cas réel d'un état de  $l$  donné.

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

Dans ce cas, le système d'équations (17) s'écrit :

$$\psi(n_{m\sigma}) = \cotg \pi n_{m\sigma} + \frac{U}{\Delta} n_{m\sigma} = \frac{E_{OF} + UN}{\Delta} \quad (18)$$

où  $N$  est le nombre total d'électrons. Il est facile de faire une discussion graphique : les valeurs  $n_{m\sigma}$  des nombres d'électrons sont données par l'intersection de la courbe  $\psi(n)$  et de la droite d'ordonnée  $(E_{OF} + UN)/\Delta$  (figure 2).

3.1.1. - Apparition de magnétisme de spin et d'orbite.

Quand  $E_{OF}$  est très grand, les quatre orbitales sont presque vides et les nombres d'électrons  $n_{m\sigma}$  égaux entre eux (position (I) sur la figure 2) : la solution est non magnétique.

Quand  $E_{OF}$  diminue, on atteint la condition de découplage ou d'apparition