§ 3. - ETUDE DU CAS DEGENERE 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 $\ell_z = +1$ et $\ell_z = -1$, 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 :

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

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 ≠ 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 :

$$\varphi(n_{m\sigma}) = \cot g\, \pi\, n_{m\sigma} + \frac{U}{\Delta} n_{m\sigma} = \frac{E_{oF} + U N}{\Delta} \qquad (18)$$

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 $\varphi(n)$ 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