

du moment magnétique, où on sépare les orbitales de différentes valeurs de  $m$  et  $\sigma$ . Cette condition s'écrit :

$$\frac{\pi}{\sin^2 \pi n_0} = \frac{U}{\Delta} \quad \text{ou} \quad U\rho(E_F) = 1 \quad (19)$$

où  $n_0$  est le nombre d'électrons dans chaque orbitale et  $\rho(E_F)$  la densité d'états d'une orbitale pour une direction de spin. Cette condition de découplage correspond au minimum  $\alpha$  de la fonction  $\Psi(n)$  sur la figure 2 et au point A sur la figure 3.a représentant le nombre total d'électrons  $N$  en fonction de  $E_{OF}$ . Au voisinage de cette condition, la solution des équations est obtenue en calculant les variations  $\delta n_{m\sigma} = n_{m\sigma} - n_0$  des nombres d'électrons. Le système d'équations donne, en plus des solutions non magnétique ( $n_{1+}=n_{2+}=n_{1-}=n_{2-}$ ) et magnétique de spin ( $n_{1+}=n_{2+} \neq n_{1-}=n_{2-}$ ) une troisième solution :

$$\delta n_{1+} = \varepsilon \quad \delta n_{1-} = \delta n_{2+} = \delta n_{2-} = -\varepsilon \quad (20)$$

Cette solution permet de séparer un état de  $m$  et  $\sigma$  bien déterminés des trois autres et il apparaît donc un moment magnétique de spin et d'orbite. Nous vérifierons par le calcul de l'énergie que cette solution est la plus stable. Au voisinage de cette condition,  $n_{1+}$  augmente,  $n_{2+}$  diminue, le nombre total d'électrons diminue et par suite  $E_{OF}$  augmente, quelle que soit la valeur de  $U/\Delta$  à condition de prendre  $U > \pi\Delta$  : on a donc un changement dans le sens de variation de  $E_{OF}$  à la condition de découplage.

Après la condition de découplage,  $n_{1+}$  augmente en suivant la courbe de la figure 2 de  $\alpha$  jusqu'à  $\delta$ , tandis que  $n_{2+}$  diminue en suivant la courbe de  $\alpha$  à  $\delta'$  : le nombre total d'électrons  $N$  varie en suivant la courbe AKCE''D de la figure 3.a, alors que  $E_{OF}$  augmente d'abord de A à C puis diminue de C à D. Le point D de la figure 3.a correspond à la position (II) de la figure 2 ( $n_{1+}$  en  $\delta$  et  $n_{2+}$  en  $\delta'$ ) et pour ce point, l'orbitale  $|1+\rangle$  est presque remplie, alors que les trois autres orbitales sont pratiquement vides.