

3.1.2. - Energie et ordre de la transition.

L'énergie totale définie en 2.3. est :

$$\mathcal{G} = E_{OF} N + 3U n_{2+} (n_{1+} + n_{2+}) - \frac{\Delta}{\pi} \text{Log sin } \pi n_{1+} - \frac{3\Delta}{\pi} \text{Log sin } \pi n_{2+} \quad (21)$$

dont la dérivée par rapport à E_{OF} est égale au nombre total d'électrons N .

La courbe de l'énergie en fonction de E_{OF} est tracée sur la figure 3.b ; cette courbe a deux points de rebroussement en A et C, correspondant aux changements du sens de variation de E_{OF} . Le point E sur la figure 3.b est repéré sur la courbe 3.a du nombre total d'électrons par les deux points E' et E". Les énergies des points E' et E" étant égales, on peut écrire :

$$\int_{E'AKCE''} d\mathcal{G} = \int_{E'AKCE''} N dE_{OF} = 0 \quad (22)$$

et les deux aires limitées par la courbe E'AK et la droite E'K d'une part et par la courbe KCE" et la droite KE" d'autre part sont donc égales (aires hachurées sur la figure 3.a). Cette propriété est déjà bien connue dans le diagramme de Clapeyron pour l'équilibre liquide-vapeur.

Pour les valeurs de E_{OF} plus grandes que la valeur de E_{OF} du point E, la solution non magnétique est la plus stable ; pour les valeurs plus petites de E_{OF} , la solution magnétique de spin et d'orbite est la plus stable. Le nombre total d'électrons N et le moment magnétique sont discontinus au point E ; on a donc une transition du 1er ordre au point E, quelle que soit la valeur de U , à condition de prendre $U > \pi\Delta$. De plus, on voit facilement que cette solution est la plus stable des solutions de Hartree-Fock : son énergie est, en effet, inférieure à l'énergie de la solution non magnétique et de la solution magnétique de spin.

Enfin, il est intéressant de calculer dans l'approximation où $U \gg \Delta$ le saut du nombre total d'électrons à la transition. Dans ce cas, le nombre total d'électrons passe d'une valeur voisine de zéro à une valeur voisine de 1, ce qui correspond au remplissage de l'orbitale $|1+\rangle$, les autres orbitales restant pratiquement vides. Dans cette approximation, le nombre total avant la transition