

est égal à :

$$N = 4n_{1+} \sim \frac{4}{\sqrt{3\pi\left(\frac{U}{\Delta}\right)}} \quad (23)$$

tandis qu'après la transition, le nombre total est égal à :

$$N \sim n_{1+} \sim 1 - \frac{1}{\text{Log} \frac{U}{9\Delta}} \quad (24)$$

et le saut du nombre total d'électrons tend vers 1 pour $\frac{U}{\Delta}$ très grand.

Sur les figures 3.a et 3.b, on a tracé le nombre total et l'énergie totale en fonction de E_{OF} pour une grande valeur de U : $U = 250 \Delta$.

Dans l'approximation de Hartree-Fock, on ne peut calculer que la composante M du moment magnétique le long de l'axe Oz :

$$M = \mu_B \langle l_z + 2s_z \rangle \quad (25)$$

ce qui donne ici :

$$M = 2\mu_B (n_{1+} - n_{2-}) \quad (26)$$

Le moment magnétique M est donné en fonction de E_{OF} pour $U = 250 \Delta$ sur la figure 4.

3.1.3. - Solution des équations self-consistentes après la première transition.

Quand E_{OF} diminue après la transition, n_{1+} augmente en suivant la courbe de la figure 2 de δ à α' et n_{2+} augmente en suivant la courbe de δ' à α , jusqu'à ce que n_{2+} atteigne la deuxième condition de découplage donnée par :

$$\frac{\pi}{\sin^2 \pi n_{2+}} = \frac{U}{\Delta} \quad (27)$$

Cette deuxième condition de découplage correspond encore au minimum α de la courbe sur la figure 2 (position III) et permet de séparer l'orbitale $|2+\rangle$