

spin ou des solutions magnétiques de spin et d'orbite ; d'autre part l'ordre des transitions dépend des valeurs respectives de U et de J. La discussion de ce cas est basée sur le système d'équations (17).

Nous étudions d'abord le cas où U et J sont très grands par rapport à  $\Delta$  et  $U > J$ .

Quand  $E_{OF}$  est très grand, on a encore une solution non magnétique avec les quatre nombres  $n_{m\sigma}$  d'électrons égaux. Au contraire, quand  $E_{OF}$  diminue, on a deux conditions de découplage distinctes. On atteint d'abord, en diminuant  $E_{OF}$ , la condition d'apparition d'un moment magnétique de spin où on sépare les orbitales de spin + ( $n_{1+} = n_{2+}$ ) des orbitales de spin - ( $n_{1-} = n_{2-}$ ) ; cette condition est donnée par :

$$\frac{\pi}{\sin^2 \pi n_s} = \frac{U + J}{\Delta} \quad \text{ou } (U + J) \rho(E_F) = 1 \quad (29)$$

$n_s$  est le nombre d'électrons dans chaque orbitale et  $\rho(E_F)$  la densité d'états d'une orbitale pour une direction de spin (point A sur les figures 7). Après cette condition de découplage,  $E_{OF}$  continue à diminuer, comme le montrent les calculs de l'appendice I.a ; il y a donc augmentation continue du moment magnétique et du nombre total d'électrons. La transition du cas non magnétique au cas magnétique de spin est une transition du 2ème ordre et la solution est ensuite magnétique de spin.

Quand  $E_{OF}$  diminue encore, on atteint une autre condition qui permet de séparer les orbitales  $|1+\rangle$  et  $|2+\rangle$  de même spin et il apparaît une contribution orbitale au moment magnétique : on a alors  $n_{1+} \neq n_{2+} \neq n_{1-} = n_{2-}$ . Cette condition de découplage orbitale s'écrit alors :

$$\frac{\pi}{\sin^2 \pi n_{o+}} = \frac{U - J}{\Delta} \quad \text{ou } (U - J) \rho_+(E_F) = 1 \quad (30)$$

où  $n_{o+}$  est le nombre d'électrons dans les orbitales de spin + et  $\rho_+(E_F)$  la densité d'états d'une orbitale pour la direction de spin + (point B sur les figures 7).