

Dans le cas étudié ici ($U > J \gg \Delta$), E_{OF} change de sens de variation à la condition de découplage et la transition est du 1er ordre, comme le montrent les calculs de l'appendice I.b. Après cette condition, N varie avec E_{OF} en suivant la courbe BKCE''D de la figure 7.a. (Les coordonnées des points caractéristiques des courbes 7 sont données dans l'appendice I.c).

L'énergie totale est égale à :

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = E_{OF} \cdot N + (U - J)(n_{1+} n_{2+} + n_-^2) + 2 U n_- (n_{1+} + n_{2+}) - \frac{\Delta}{\pi} \text{Log sin } \pi n_{1+} \\ - \frac{\Delta}{\pi} \text{Log sin } \pi n_{2+} - \frac{2\Delta}{\pi} \text{Log sin } \pi n_- \end{aligned} \quad (31)$$

$$\text{et } \frac{d\mathcal{E}}{d E_{OF}} = N \quad (32)$$

La variation de l'énergie \mathcal{E} avec E_{OF} est qualitativement la même que dans la partie précédente et la valeur de E_{OF} à la transition est encore déterminée par l'égalité des énergies des solutions magnétique et non magnétique (figure 7.b). On a de même l'égalité des aires hachurées de la figure 7.a.

La transition du 1er ordre fait passer le nombre total d'électrons d'une valeur presque nulle à une valeur voisine de l'unité, ce qui correspond au remplissage de l'orbitale $|1+\rangle$, les autres orbitales restant pratiquement vides.

Il est intéressant de calculer, dans la limite où U et J sont grands par rapport à Δ , le nombre total d'électrons en E' et E'' . Le nombre total en E' est égal à :

$$N = 4n_{1+} \approx \frac{4}{\sqrt{\pi \left(\frac{3U - J}{\Delta} \right)}} \quad (33)$$

tandis que le nombre total en E'' est égal à :

$$N \approx n_{1+} \approx 1 - \frac{1}{\text{Log} \left[\frac{U^2(U - J)}{(3U - J)^2 \Delta} \right]} \quad (34)$$