Dans le cas étudié ici ($U > J >> \Delta$), E_{oF} change de sens de variation à la condition de découplage et la transition est du ler 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 :

$$\mathcal{E} = E_{oF} . N + (U - J)(n_{1+} n_{2+} + n_-^2) + 2 U n_-(n_{1+} + n_{2+}) - \frac{\Delta}{\pi} \mathrm{Log} \sin \pi n_{1+} - \frac{\Delta}{\pi} \mathrm{Log} \sin \pi n_{2+} - \frac{2\Delta}{\pi} \mathrm{Log} \sin \pi n_- \tag{31}$$

$$\text{et} \qquad \frac{d\mathcal{E}}{d E_{oF}} = N \tag{32}$$

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 ler 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 $|1+>$, 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 :

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

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

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