

Finalement, on étudie la solution des équations self-consistentes après la première transition dans l'approximation où U et J sont très grands par rapport à Δ (région (I) de la figure 11). Le nombre total d'électrons N reste pratiquement constant et égal à 1 pendant un grand intervalle en énergie de l'ordre de U - J ; l'impureté reste alors dans une configuration bien déterminée avec un nombre total d'électrons pratiquement entier. La seconde transition correspondant au remplissage de l'orbitale $|2+\rangle$ est du 1er ordre quand U est nettement supérieur à J et devient du 2ème ordre quand J se rapproche de U . Cependant, même dans ce dernier cas, le nombre total d'électrons N augmente d'une unité dans un intervalle en énergie de l'ordre de quelques Δ . Après cette seconde transition, il ne subsiste qu'un magnétisme de spin pendant un grand intervalle de l'ordre de U + J. Enfin, la symétrie entre les électrons et les trous permet d'obtenir les solutions des équations après cette deuxième transition. La figure 12 montre la variation de N avec E_{OF} pour U = 250 Δ et J = 150 Δ .

3.3. - DEGENERESCENCE ORBITALE REELLE.

Dans cette partie, nous généralisons les résultats précédents pour le cas réel d'un état de l donné, puis nous étudions l'influence du couplage spin-orbite. Pour un état de l donné, la composante $m = l_z$ varie de $-l$ à $+l$ et la dégénérescence totale est $2(2l+1)$. La discussion est basée sur le système d'équations self-consistentes :

$$\Delta \cot \sigma \pi n_{m\sigma} = E_{OF} + \sum_{\substack{m'=-l \\ (m' \neq m)}}^{+l} (U_{mm'} - J_{mm'}) n_{m'\sigma} + \sum_{m'=-l}^{+l} U_{mm'} n_{m'-\sigma} \quad (36)$$

3.3.1. - Approximations pour $U_{mm'}$ et $J_{mm'}$.

Les intégrales de Coulomb $U_{mm'}$ et d'échange $J_{mm'}$ s'écrivent (J.C. Slater 1960) :

$$U_{mm'} = F_0 + \sum_{k=1}^{k=l} a_{2k}(m,m') F_{2k} \quad (37.a)$$

$$J_{mm'} = \sum_{k=1}^{k=l} b_{2k}(m,m') F_{2k} \quad (37.b)$$