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 = 250Δ 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 $m = \ell_z$ varie de $-\ell$ à $+\ell$ et la dégénérescence totale est $2(2\ell+1)$. La discussion est basée sur le système d'équations self-consistentes :

$$\Delta \cot g\, \pi\, n_{m\sigma} = E_{oF} + \sum_{\substack{m'=-\ell \\ (m'\neq m)}}^{+\ell} (U_{mm'} - J_{mm'})\, n_{m'\sigma} + \sum_{m'=-\ell}^{+\ell} U_{mm'}\, n_{m'-\sigma} \tag{36}$$

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) :

$$U_{mm'} = F_o + \sum_{k=1}^{k=\ell} a_{2k}(m,m')\, F_{2k} \tag{37.a}$$

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