

groupe du fer (J.C. Slater, 1960) et de terres rares (A.J. Freeman et al., 1962) dans l'approximation de Hartree-Fock par une méthode variationnelle ; nous avons calculé de plus l'intégrale F_0 pour les terres rares et les valeurs de F_{2k} des terres rares sont données dans l'appendice II.

3.3.2. - Discussion des équations self-consistentes.

La discussion des équations self-consistentes (36) en fonction de F_0 et F_2 est semblable à la discussion des équations⁽¹⁷⁾ en fonction de U et J. Quand E_{OF} diminue, on retrouve successivement une solution non magnétique, puis une solution magnétique de spin et enfin une solution magnétique de spin et d'orbite.

La condition de découplage de spin analogue à la condition (29) s'écrit maintenant :

$$\text{pour un état p } (\ell = 1) \quad \left(F_0 + \frac{2F_2}{5}\right) \rho(E_F) = 1 \quad (39.a)$$

$$\text{pour un état d } (\ell = 2) \quad \left(F_0 + \frac{2F_2}{7}\right) \rho(E_F) = 1 \quad (39.b)$$

$$\text{pour un état f } (\ell = 3) \quad \left(F_0 + \frac{4F_2}{15}\right) \rho(E_F) = 1 \quad (39.c)$$

La condition de découplage d'orbite analogue à la condition (30) s'écrit maintenant :

$$\text{pour un état p } (\ell = 1) \quad \left(F_0 - \frac{F_2}{5}\right) \rho_+(E_F) = 1 \quad (40.a)$$

$$\text{pour un état d } (\ell = 2) \quad \left(F_0 + \frac{F_2}{7}\right) \rho_+(E_F) = 1 \quad (40.b)$$

$$\text{pour un état f } (\ell = 3) \quad \left(F_0 + \frac{F_2}{5}\right) \rho_+(E_F) = 1 \quad (40.c)$$

On peut encore déterminer la solution la plus stable en fonction de E_{OF} et discuter l'ordre des transitions ; les résultats de la discussion sont portés concernant la première transition en fonction de F_0 et F_2 sur la figure 13 (tracée pour le cas $\ell = 1$) analogue de la figure 11 du cas doublement dégénéré d'orbite :

- La région (I) correspond au cas magnétique de spin et d'orbite avec une transition du 1er ordre.