

Cependant par analogie avec le cas atomique, on a encore deux méthodes approchées pour traiter le couplage spin-orbite :

(1) La première méthode consiste à prendre la représentation décrite dans la partie 2.2. On ne peut étudier en toute rigueur l'interaction de couplage spin-orbite définie par l'Hamiltonien (42) ; on ne discute donc que la partie diagonale de l'Hamiltonien (42) :

$$H'_{SO} = \lambda \ell_z s_z \quad (46)$$

Cette méthode qui est l'équivalent pour une impureté métallique du couplage L S est très imparfaite, car elle ne conserve pas l'invariance rotationnelle du système. Ce modèle est facile à traiter, car le système d'équations self-consistentes est égal à :

$$\Delta \cotg \pi n_{m\sigma} = E_{OF} + \lambda_{m\sigma} + \sum_{\substack{m' \\ (m' \neq m)}} (U_{mm'} - J_{mm'}) n_{m'\sigma} + \sum_{m'} U_{mm'} n_{m'-\sigma} \quad (47)$$

$$\text{où : } \lambda_{m\sigma} = \lambda \langle m\sigma | \ell_z s_z | m\sigma \rangle = \lambda m \sigma \quad (47')$$

Dans les équations (47), on a utilisé la même approximation de Hartree-Fock que dans la partie 2.2. en prenant les valeurs moyennes $n_{m\sigma}$ des opérateurs $\hat{n}_{m\sigma}$. On peut résoudre ce système d'équations (47) de la même façon que le système (36) et en particulier étudier le cas deux fois dégénéré d'orbite des sections 3.1 et 3.2. Les équations (47) ne donnent jamais de solution magnétique de spin et les transitions correspondent au remplissage d'états de $j_z = \ell_z + s_z$ donné ; en particulier, lors de la première transition du cas non magnétique au cas magnétique, il ne subsiste qu'une condition de découplage séparant les orbitales de j_z opposés, au lieu des deux conditions de découplage de spin et d'orbite.

(2) La deuxième méthode est analogue au couplage j-j pour l'atome libre. On introduit dans l'Hamiltonien le terme supplémentaire (42) et on utilise la représentation dans laquelle le moment angulaire total j de chaque électron est un bon nombre quantique.

On peut alors étudier le couplage spin-orbite dans cette nouvelle