

représentation et en particulier écrire le système d'équations self-consistentes donnant les nombres d'électrons n_{jj_z} dans chaque orbitale de j et j_z donnés en fonction des valeurs respectives de F_0 , F_2 et de la constante ξ de couplage spin-orbite par rapport à la largeur de l'état lié virtuel ; ce système s'écrit :

$$\Delta \cotg \pi n_{jj_z} = E_{jj_z} - E_F \quad (48)$$

où

$$E_{jj_z} = E_0 + \xi_{jj} + \sum_{\substack{j'j'_z \\ (\neq jj_z)}} A_{jj_z, j'j'_z} n_{j'j'_z} \quad (49)$$

Dans les expressions (48) et (49) :

- E_{jj_z} représente la position du niveau lié virtuel de j et de j_z donnés.

$$\xi_{jj} = \frac{\ell}{2} \xi \quad \text{si } j = \ell + \frac{1}{2} \quad (50)$$

$$\xi_{jj} = -\frac{\ell + 1}{2} \xi \quad \text{si } j = \ell - \frac{1}{2}$$

- Les coefficients $A_{jj_z, j'j'_z}$ représentent les énergies d'interaction sur l'impureté entre les deux états de j, j_z et de j', j'_z . Leur forme générale est :

$$\begin{aligned} A_{jj_z, jj_z} &= 0 \\ A_{jj_z, j'j'_z} &= F_0 + a_{jj_z, j'j'_z} F_2 \quad (\text{si } jj_z \neq j'j'_z) \end{aligned} \quad (51)$$

Le calcul détaillé de ce cas avec couplage spin-orbite et la dérivation des équations self-consistentes sont faits dans l'appendice (III). Il est à noter que l'approximation de Hartree-Fock utilisée pour obtenir le système (49) est différente de celle utilisée dans le cas précédent : on prend en effet les valeurs moyennes des opérateurs $\tilde{n}_{jj_z}$, alors qu'on prend les valeurs moyennes des opérateurs différents $\tilde{n}_{m\sigma}$ dans le cas sans couplage spin-orbite.

Les solutions des équations self-consistentes (49) sont différentes