APPENDICE I

ETUDE DU CAS DOUBLEMENT DEGENERE D'ORBITE

I.a - ETUDE DE L'ORDRE DE LA TRANSITION A LA CONDITION DE DECOUPLAGE DE SPIN.

Le système d'équations (17) s'écrit dans le cas magnétique de spin :

$$\phi_1(n_+) = \phi_1(n_-) \tag{91}$$

avec :

$$\phi_1(n) = \operatorname{cotg} \pi n + \left(\frac{U + J}{\Delta}\right) n \tag{92}$$

et la condition de découplage de spin correspond au minimum de $\phi_1(n)$. Soit n_s la valeur de n pour ce minimum. Il est facile de faire une discussion graphique comme l'indique la figure 34.a. Pour déterminer le sens de variation de E_{oF} au voisinage de la condition de découplage, on fait un développement limité près de n_s en fonction de l'infiniment petit ε défini par :

$$\phi_1(n_+) = \phi_1(n_-) = \phi_1(n_s) + \varepsilon^2 \tag{93}$$

et on trouve pour les variations de n_+, n_-, du nombre total d'électrons $N = 2(n_+ + n_-)$ et de E_{oF} :

$$\begin{aligned}
\Delta n_+ &= n_+ - n_s = \frac{\varepsilon}{a} + \frac{b}{2a^4}\,\varepsilon^2 \\
\Delta n_- &= n_- - n_s = -\frac{\varepsilon}{a} + \frac{b}{2a^4}\,\varepsilon^2 \\
\Delta N &= \frac{2b}{a^4}\,\varepsilon^2 \\
\Delta E_{oF} &= \varepsilon^2\left[1 - \frac{2b}{a^4}\,\frac{U}{\Delta}\right]\Delta
\end{aligned} \tag{94}$$

en fonction des deux quantités :