

A P P E N D I C E I

ETUDE DU CAS DOUBLEMENT DEGENERÉ 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 :

$$\phi_1(n_+) = \phi_1(n_-) \quad (91)$$

avec :

$$\phi_1(n) = \cot \rho \pi n + \left(\frac{U + J}{\Delta} \right) n \quad (92)$$

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 :

$$\phi_1(n_+) = \phi_1(n_-) = \phi_1(n_s) + \epsilon^2 \quad (93)$$

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

$$\begin{aligned} \Delta n_+ &= n_+ - n_s = \frac{\epsilon}{a} + \frac{b}{2a^4} \epsilon^2 \\ \Delta n_- &= n_- - n_s = -\frac{\epsilon}{a} + \frac{b}{2a^4} \epsilon^2 \\ \Delta N &= \frac{2b}{a^4} \epsilon^2 \\ \Delta E_{OF} &= \epsilon^2 \left[1 - \frac{2b}{a^4} \frac{U}{\Delta} \right] \Delta \end{aligned} \quad (94)$$

en fonction des deux quantités :