

$$\begin{aligned}\phi''_1(n_s) &= 2a^2 \\ \phi'''_1(n_s) &= -6b\end{aligned}\tag{95}$$

On calcule ces quantités a^2 et b en fonction de $\frac{U}{\Delta}$ et $\frac{J}{\Delta}$ et on trouve, tous calculs faits, que ΔE_{OF} est négatif : E_{OF} ne change donc pas de sens de variation à la condition de découplage. Ce résultat ne dépend pas de la forme de la densité d'états, pour des formes usuelles de densité d'états. Comme il n'y a pas de changement du sens de variation de E_{OF} à la condition de découplage, la transition est du 2ème ordre. En fait, ce résultat n'est pas suffisant pour affirmer en toute rigueur que la transition est du 2ème ordre ; il se pourrait que E_{OF} change de sens de variation après la condition de découplage, mais une telle éventualité ne s'est jamais présentée dans le calcul numérique des solutions des équations self-consistantes.

I.b - ETUDE DE L'ORDRE DE LA TRANSITION A LA CONDITION DE DECOUPLAGE D'ORBITE.

Le calcul est formellement identique à celui de l'appendice I.a. Le système d'équations self-consistantes s'écrit dans le cas magnétique de spin et d'orbite :

$$\frac{\phi_1(n_{1+}) + \phi_1(n_{2+})}{2} = \phi_1(n_-)\tag{96}$$

$$\phi_2(n_{1+}) = \phi_2(n_{2+})$$

avec :

$$\begin{aligned}\phi_1(n) &= \cotg \pi n + \left(\frac{U+J}{\Delta}\right) n \\ \phi_2(n) &= \cotg \pi n + \left(\frac{U-J}{\Delta}\right) n\end{aligned}\tag{97}$$

Il est encore possible de faire une discussion graphique comme l'indique la figure 34 b. On appelle n_{0+} et n_{0-} les nombres d'électrons de