

spin + et de spin - à la condition de découplage d'orbite ; cette condition correspond au minimum de la courbe $\phi_2(n)$ et on suppose encore une petite variation de $\phi_2(n)$ au voisinage de son minimum :

$$\phi_2(n_{1+}) = \phi_2(n_{2+}) = \phi_2(n_{0+}) + \epsilon^2 \quad (98)$$

On calcule les variations correspondantes de n_{1+} , n_{2+} , n_- , du nombre total d'électrons $N = n_{1+} + n_{2+} + 2n_-$ et de E_{OF} :

$$\begin{aligned} \Delta n_{1+} &= n_{1+} - n_{0+} = \frac{\epsilon}{a} + \frac{b}{2a^4} \epsilon^2 \\ \Delta n_{2+} &= n_{2+} - n_{0+} = -\frac{\epsilon}{a} + \frac{b}{2a^4} \epsilon^2 \\ \Delta n_- &= n_- - n_{0-} = -\epsilon^2 \left[\frac{b}{2a^4} \frac{c^2}{d^2} + \frac{1}{d^2} \right] \\ \Delta N &= \epsilon^2 \left[\frac{b}{a^4} - \frac{b}{a^4} \frac{c^2}{d^2} - \frac{2}{d^2} \right] \\ \Delta E_{OF} &= \epsilon^2 \left[1 + \frac{2}{d^2} \left(\frac{bc^2}{2a^4} + 1 \right) \frac{U}{\Delta} - \left(\frac{U-J}{\Delta} \right) \frac{b}{a^4} \right] \Delta \end{aligned} \quad (99)$$

en fonction de :

$$\begin{aligned} \phi''_1(n_{0+}) &= \phi''_2(n_{0+}) = 2a^2 \\ \phi'''_1(n_{0+}) &= \phi'''_2(n_{0+}) = -6b \\ \phi'_1(n_{0+}) &= c^2 \\ \phi'_1(n_{0-}) &= -d^2 \end{aligned} \quad (100)$$

Ce calcul n'est valable que si $J \neq 0$; dans ce cas, on calcule ΔE_{OF} en fonction de U/Δ et J/Δ . Quand ΔE_{OF} est positif, E_{OF} change de sens de variation à la condition de découplage et la transition est certainement du 1er ordre. Quand ΔE_{OF} est négatif, E_{OF} ne change pas de sens de variation et la