A P P E N D I C E III

FORMALISME AVEC COUPLAGE SPIN-ORBITE

Sans couplage spin-orbite, l'état localisé est décrit par les fonctions d'onde $Y_\ell^m|\sigma>$ où $m = \ell_z$ et $\sigma = s_z$. Avec couplage spin-orbite, on peut définir de nouvelles fonctions $\mathcal{Y}_{jj_z}$, fonctions propres du moment angulaire total j et de sa composante sur l'axe Oz $j_z = m + \sigma$:

$$\mathcal{Y}_{jjz} = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \sum_{\sigma=-s}^{+s} C_{\ell s}(jj_z, m\sigma) \; Y_\ell^m|\sigma> \tag{101}$$

où les $C_{\ell s}(jj_z, m\sigma)$ sont les coefficients de Clesh-Gordan faisant passer de la représentation $(\ell s, m\sigma)$ à la représentation $(\ell s, jj_z)$. On peut alors définir des opérateurs $C^*_{jj_z}$ qui obéissent aux règles usuelles de commutation et qu'on peut obtenir à partir des opérateurs $C^*_{m\sigma}$ par les mêmes transformations(101) que les fonctions d'onde $\mathcal{Y}_{jj_z}$ à partir des fonctions d'onde $Y_\ell^m|\sigma>$.

Le terme caractérisant les électrons localisés avec le couplage spin-orbite correspondant aux second, quatrième et cinquième termes de (6) et au terme (42) s'écrit après transformation des opérateurs $C^*_{m\sigma}$ en opérateurs $C^*_{jj_z}$:

$$H_\ell = \sum_{j,j_z} (E_o + \xi_{jj}) \tilde{n}_{jj_z} + \frac{1}{2} \sum_{jj_z, j'j'_z} A_{jj_z, j'j'_z} \tilde{n}_{jj_z} \tilde{n}_{j'j'_z} \tag{102}$$

Dans l'expression (102):

- $\tilde{n}_{jj_z}$ désigne l'opérateur nombre d'électrons $\tilde{n}_{jj_z} = C^*_{jj_z} C_{jj_z}$

$$\begin{aligned} - \xi_{jj} &= \xi \frac{\ell}{2} && \text{si } j = \ell + \frac{1}{2} \\ \xi_{jj} &= - \xi \frac{\ell + 1}{2} && \text{si } j = \ell - \frac{1}{2} \end{aligned} \tag{103}$$