

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 $Y_{\ell}^m | \sigma \rangle$ où $m = \ell_z$ et $\sigma = s_z$. Avec couplage spin-orbite, on peut définir de nouvelles fonctions ψ_{jj_z} , fonctions propres du moment angulaire total j et de sa composante sur l'axe z $j_z = m + \sigma$:

$$\psi_{jj_z} = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \sum_{\sigma=-s}^{+s} C_{\ell s}(jj_z, m\sigma) Y_{\ell}^m | \sigma \rangle \quad (101)$$

où les $C_{\ell s}(jj_z, m\sigma)$ sont les coefficients de Clebsch-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 ψ_{jj_z} à partir des fonctions d'onde $Y_{\ell}^m | \sigma \rangle$.

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 $C_{jj_z}^*$:

$$H_{\ell} = \sum_{j, j_z} (E_0 + \xi_{jj}) \tilde{n}_{jj_z} + \frac{1}{2} \sum_{jj_z, j'j'_z} A_{jj_z, j'j'_z} \tilde{n}_{jj_z} \tilde{n}_{j'j'_z} \quad (102)$$

Dans l'expression (102) :

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

- $\xi_{jj} = \xi \frac{\ell}{2}$ si $j = \ell + \frac{1}{2}$

$\xi_{jj} = -\xi \frac{\ell + 1}{2}$ si $j = \ell - \frac{1}{2}$

(103)