

1 Le paramagnétisme et le ferromagnétisme des électrons d'un cristal

Un cristal métallique est placé dans un champ magnétique uniforme d'induction \vec{B} orienté suivant Oz . On néglige l'effet du champ sur les orbitales que l'on traitera comme si l'on avait des électrons libres. Le seul effet magnétique considéré concerne le spin des électrons. On désigne par μ le moment magnétique de l'électron dans l'état de spin $s_z = +\frac{\hbar}{2}$, par N_0 le nombre total d'électrons du cristal et par V_0 son volume. Dans cet exercice, **on suppose le métal au zéro absolu**. On appelle E_F l'énergie de Fermi habituelle en l'absence de champ magnétique et p_F l'impulsion de Fermi correspondante. Enfin, on désigne par N_+ le nombre d'électrons dont le spin est orienté dans le sens de l'axe Oz et par N_- le nombre de ceux dont le spin pointe dans la direction opposée. On définit la quantité ξ par $N_+ = \frac{N_0}{2} (1 + \xi)$.

1. On suppose d'abord que le nombre N_+ est fixé. Calculer l'impulsion maximale p_{max} de la population de spin $+\hbar/2$.
2. Dans les mêmes conditions (N_+ fixé), calculer l'énergie totale U_+ de la même population électronique. Cette énergie inclut l'énergie cinétique de translation et l'énergie potentielle magnétique due au spin. Montrer que l'on a :

$$U_+ = \frac{3}{10} N_0 E_F (1 + \xi)^{\frac{5}{3}} - \frac{N_0 \mu B}{2} (1 + \xi) .$$

En déduire sans calcul l'énergie U_- correspondant à l'autre population d'électrons.

3. On pose $U = U_+ + U_-$ qui est une fonction de ξ . Comment cette expression permet-elle de calculer la valeur de ξ au zéro absolu ? Calculer cette valeur en fonction de μ , B , E_F , en supposant $\xi \ll 1$. Vérifier *a posteriori* la validité de cette approximation ; on donne $B = 1$ Tesla et $\mu = 5,8 \times 10^{-5}$ eV/Tesla. En déduire l'intensité d'aimantation M (moment magnétique du système) due au paramagnétisme des électrons libres (*paramagnétisme de Pauli*).
4. On introduit maintenant une interaction entre électrons qu'on modélise schématiquement de la façon suivante :
 - Chaque couple d'électrons à spins anti-parallèles ne donne lieu à aucune interaction.
 - Chaque couple d'électrons à spins parallèles introduit une énergie potentielle $-W_S$ avec $W_S > 0$.

Montrer que l'énergie locale U calculée plus haut est modifiée par l'adjonction du terme $-(W_S N_0^2 / 4) (1 + \xi^2)$. Toujours dans l'approximation $\xi \ll 1$, trouver les nouvelles formules donnant ξ et l'intensité d'aimantation M au zéro absolu. Montrer que ce résultat n'a de sens que pour $W_S < 4E_F / (3N_0)$; que se passe-t-il dans le cas contraire ?

2 Paramètre d'ordre dans un alliage binaire

On considère un alliage binaire composé pour moitié d'atomes A et B . Au zéro absolu, les atomes A sont aux nœuds (ou sites (a)) d'un réseau cubique et les atomes B se placent aux centres des mailles correspondantes (sites (b)). On appelle N_0 le nombre d'atomes A (aussi égal au nombre d'atomes B). À température non nulle, certains atomes A migrent sur des sites (b) et des atomes B sur des sites (a) . On définit le **paramètre d'ordre** P en posant égal à $\frac{N_0}{2}(1 + P)$ le nombre d'atomes A restant sur (a) ; ($0 \leq P \leq 1$).

1. Indiquer les nombres d'atomes A et d'atomes B sur chaque site **pour une valeur donnée de P** . Toujours en supposant P fixé, calculer le nombre de configurations microscopiques d'atomes, soit Ω_P , en fonction de N_0 et de P . En déduire l'entropie de l'alliage S_P à P fixé.
2. On néglige ici les énergies cinétiques des atomes et on ne prend en compte que leurs énergies potentielles d'interaction mutuelle. Chacun d'eux est supposé n'interagir qu'avec ses 8 voisins formant un cube dont il est le centre. On désigne par $-V_{AA}$, $-V_{BB}$, $-V_{AB}$ (avec V_{AA} , V_{BB} , V_{AB} positifs) les énergies potentielles d'interaction entre deux atomes A , deux atomes B et deux atomes différents respectivement. On pourra poser $W = 2V_{AB} - V_{AA} - V_{BB}$ et l'on supposera W positif. Pour P fixé, combien de voisins A et de voisins B un atome A sur un site (a) a-t-il en moyenne? Même question pour un atome B sur un site (a) . Montrer que l'énergie moyenne \bar{U}_P (toujours pour P fixé) vaut $\bar{U}_P = -2N_0(V_{AA} + V_{BB} + 2V_{AB} + WP^2)$.
3. Calculer l'énergie libre F_P à P fixé pour la température T_0 . Trouver une relation implicite entre la valeur la plus probable de P (c'est-à-dire sa valeur « macroscopique »), T_0 et W . Vérifier qu'on a bien $P = 1$ au zéro absolu et que P s'annule pour une température critique T_c que l'on précisera. Qu'en est-il pour $T > T_c$?