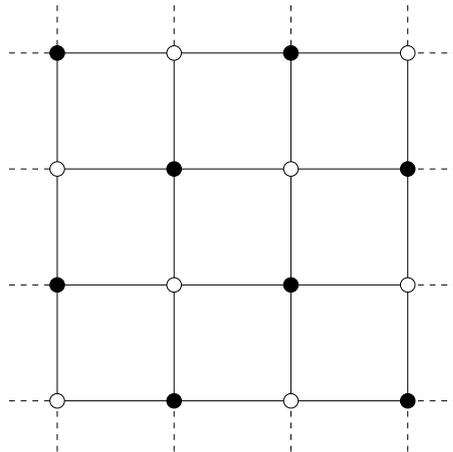


### TD n° 3: Transition ordre-désordre dans les alliages binaires

Mars 2015

Certains alliages binaires (par exemple CuZn à 465°C) présentent une transition de phase au sein de leur phase solide : à température nulle les deux types d'atomes sont répartis périodiquement au sein du réseau, alors qu'à plus haute température le réseau existe toujours mais les deux types d'atomes le remplissent aléatoirement. On va voir que cette transition est en fait très proche de celle (ferromagnétique) du modèle d'Ising.

On considère un réseau cubique en dimension  $d$ , de longueur  $L$  supposée paire, avec des conditions périodiques, et l'on note  $N = L^d$  le nombre de sites du réseau. On divise le réseau en deux sous-réseaux  $\alpha$  et  $\beta$  alternés, comme schématisé sur la figure pour  $d = 2$  :



Le réseau est rempli par  $N$  atomes de type  $A$  et  $B$  en quantités égales,  $N_A = N_B = N/2$ . On ne tient compte que des interactions entre sites plus proches voisins, et l'on note  $\epsilon_{ij}$  l'énergie de liaison entre deux sites occupés par des atomes de type  $i$  et  $j$  ( $i$  et  $j$  prennent les valeurs  $A$  ou  $B$ ).

- 1) Quel est, en fonction de la dimension  $d$ , le nombre  $z$  de plus proches voisins d'un site ? Quel est le nombre total de liaisons au sein du réseau ?
- 2) On note  $N_{ij}$  le nombre de liaisons entre deux sites occupés par des atomes de type  $i$  et  $j$ . Exprimer  $N_{AA}$  et  $N_{BB}$  en fonction de  $N_{AB}$ . En déduire que l'énergie totale du cristal s'écrit

$$E = \frac{zN}{4}(\epsilon_{AA} + \epsilon_{BB}) + N_{AB} \left( \epsilon_{AB} - \frac{\epsilon_{AA} + \epsilon_{BB}}{2} \right). \quad (1)$$

Établir une condition sur  $v = (\epsilon_{AA} + \epsilon_{BB})/2 - \epsilon_{AB}$  pour qu'à température nulle les atomes d'un type soient tous sur un des deux sous-réseaux (on parle alors de cristal ordonné). Que se passe-t-il, à température nulle, si cette condition n'est pas vérifiée ?

- 3) Pour chaque site  $l$  du réseau on introduit une variable  $S_l = \pm 1$ , telle que  $S_l = +1$  si  $l$  est dans le sous-réseau  $\alpha$  et occupé par un atome de type  $A$ , ou dans le sous-réseau  $\beta$  et occupé par un atome de type  $B$ . Montrer que l'on peut écrire l'énergie sous la forme

$$E_0 - J \sum_{\langle l,m \rangle} S_l S_m, \quad (2)$$

où la somme porte sur les paires de sites plus proches voisins. On exprimera  $E_0$  et  $J$  en fonction des données du problème.

- 4) Quelle condition sur l'aimantation des deux sous-réseaux découle de la conservation du nombre de particules de chaque type ? Cette condition est-elle contraignante dans la limite thermodynamique ?
- 5) À quelle condition sur la dimension  $d$  le modèle défini par l'énergie (2) présente-t-il une transition de phase ? On note  $T_c^I(J)$  sa température critique. Quelle est la forme de sa dépendance en  $J$  ? En déduire la forme de la température critique du modèle d'alliage binaire.
- 6) Rappeler le comportement du paramètre d'ordre  $\langle S_l \rangle$  du modèle (2) en fonction de la température. Quel est le paramètre d'ordre correspondant pour le modèle d'alliage binaire ?