

MODELE DE DRUDE-SOMMERFELD

I Modèle de Drude

Parmi l'ensemble des propriétés physiques et mécaniques des matériaux solides, la conductivité thermique et électrique des métaux a été très largement étudiée. Le point de départ de ces études a été la découverte de la notion d'électron par J.J. Thomson en 1897. En effet, trois ans plus tard, P. Drude développait une théorie de la conduction dans les métaux. Cette théorie aura un succès très important. Elle est encore utilisée aujourd'hui lorsque l'on veut obtenir rapidement des ordres de grandeurs, avant de passer à des modèles plus sophistiqués prenant en compte les effets quantiques dans les solides.

I-1 Description du modèle

a) Le gaz d'électrons

Dans le modèle de Drude, un métal est formé d'un réseau d'ions et d'un *gaz d'électrons*. Les électrons mis à la disposition du gaz par chaque atome sont au nombre de Z_c . Ce sont ceux situés sur les couches électroniques externes. Ils sont appelés électrons de conduction.

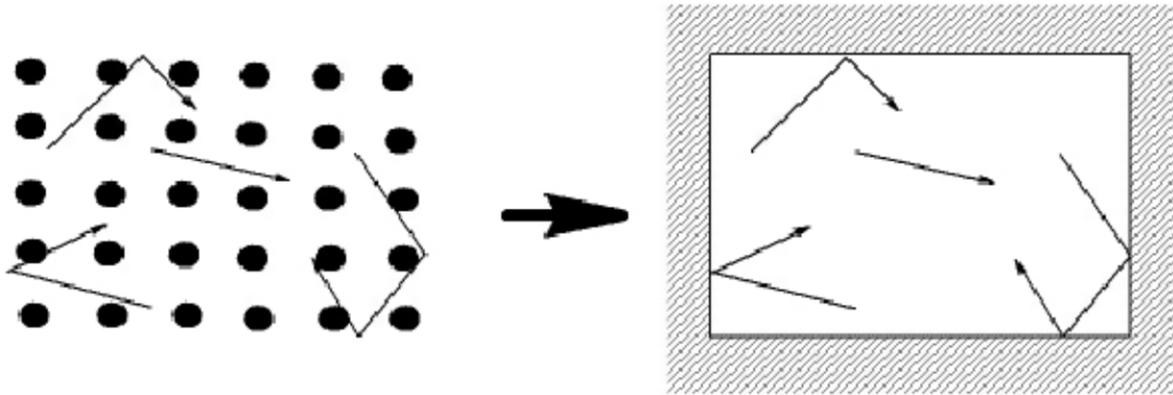
On peut estimer le nombre d'électrons de conduction par unité de volume de métal. En effet, une mole de matériau contient $6,022 \cdot 10^{23}$ atomes (nombre d'Avogadro). Ainsi, si ρ est sa densité et A sa masse atomique, alors le nombre n d'électrons de conduction par unité de volume du matériau est :

$$n = 6,022 \cdot 10^{23} \cdot \frac{Z_c \rho}{A}$$

On obtient par exemple à température ambiante $2,65 \cdot 10^{22}$ électrons de conduction par centimètre cube dans le sodium (avec une valence de 1), et $18,1 \cdot 10^{22}$ dans l'aluminium (avec une valence de 3).

Dans le modèle de Drude, l'interaction d'un électron de conduction avec les autres électrons est négligée « *approximation des électrons indépendants* », ainsi que l'interaction d'un électron de conduction avec les ions « *approximation des électrons libres* ».

En fait, l'interaction de chacun des électrons de conduction avec les ions est schématisée par un potentiel attractif constant dans le métal, de sorte que les électrons sont piégés dans une boîte de potentiel.

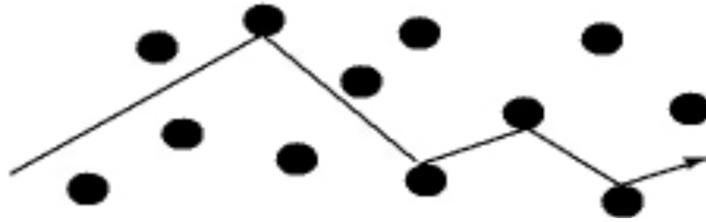


Dans ce modèle, on considère que le potentiel est suffisamment important pour que les électrons restent confinés dans le matériau. Les surfaces du métal constituent donc des parois rigides d'une boîte à l'intérieur de laquelle évoluent les électrons.

b) Les collisions

L'application d'un champ électrique \vec{E} constant dans le temps, alors chaque électron est soumis à une force électrostatique $-e\vec{E}$. Les lois de la mécanique conduisent à une accélération constante des électrons dans le sens opposé à ce champ, et donc à une vitesse croissant linéairement dans ce sens pour atteindre une valeur infinie. Ce simple raisonnement nous montre qu'il est nécessaire d'introduire dans le modèle de Drude une force de freinage des électrons. Cette force est schématisée par des *collisions* au sein du matériau.

Comme dans une théorie cinétique classique, des collisions sont donc considérées à l'intérieur de la boîte. Ce sont des événements instantanés qui modifient brutalement la vitesse des électrons. Ces collisions ont une probabilité de $1/\tau$ par unité de temps. Le terme τ est appelé *temps de relaxation*. Il joue un rôle fondamental dans la théorie de la conduction des métaux. Ce temps signifie qu'un électron sélectionné de façon aléatoire à un instant donné, d'une part voyagera en moyenne pendant un temps τ avant d'avoir une collision, et d'autre part a en moyenne déjà voyagé pendant un temps τ depuis sa dernière collision.



Dans le modèle de Drude, le temps de relaxation est indépendant de la position et de la vitesse de l'électron. Une schématisation simpliste conduirait à imaginer que les collisions sont des chocs entre les électrons et les ions de la structure, ce qui conduirait à un temps de relaxation τ de l'ordre de grandeur du temps de déplacement d'un électron entre deux ions. Dans le modèle de Drude, les collisions sont également supposées être le seul mécanisme à participer à l'équilibre thermique du matériau.

I-2 Quelques propriétés physiques

a) Conductivité électrique

La loi d'Ohm stipule que l'application d'un champ électrique \vec{E} dans un matériau produit au même endroit une densité de courant \vec{J} proportionnelle à ce champ : $\vec{J} = \sigma \vec{E}$ ou $\vec{J} = 1/\rho \vec{E}$, où σ est la conductivité électrique et ρ la résistivité du matériau.

S'il y a n électrons se déplaçant dans le matériau à une vitesse \vec{v} , alors : $\vec{J} = -ne\vec{v}$

En chaque point du matériau, les électrons se déplacent dans des directions différentes, avec des vitesses différentes correspondant à leur énergie thermique. La densité de courant dans le matériau sera donc obtenue en utilisant la vitesse moyenne de ces électrons en ce point. En l'absence de champ extérieur appliqué, cette vitesse moyenne sera nulle et aucune densité de courant n'est créée. Si un champ électrique \vec{E} est appliqué, chaque électron est soumis à une force additionnelle $\vec{F} = -e\vec{E}$.

En écrivant simplement que cette force peut s'exprimer sous la forme $\vec{F} = m\vec{\gamma}$, on en déduit que, à un instant t suivant sa dernière collision, la vitesse de l'électron sera $\vec{v} = -\left(\frac{et}{m}\right)\vec{E}$. La vitesse moyenne des électrons dans le matériau ne sera alors plus nulle, mais donnée sous la forme $\vec{v} = -\left(\frac{e\tau}{m}\right)\vec{E}$, où τ est le temps de relaxation.

On en déduit que la relation entre la densité de courant et le champ appliqué s'écrit sous la forme :

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{J} &= \sigma \vec{E} \text{ avec } \sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \\ \vec{E} &= \rho \vec{J} \text{ avec } \rho = \frac{m}{ne^2\tau} \end{aligned}}$$

cette expression permet, en mesurant expérimentalement la conductivité σ ou la résistivité ρ d'un métal, d'estimer le temps de relaxation τ .

b) Conductivité thermique

La loi de Fourier stipule qu'un gradient de température dans un matériau provoque localement une densité de flux de chaleur proportionnelle : $\vec{\phi} = -\lambda \overrightarrow{\text{grad}}(T)$

où λ est la conductivité thermique du matériau.

Dans le modèle de Drude, on fait l'hypothèse que les électrons sont également les éléments caloporteurs du matériau; la densité de flux thermique suivante dans la direction x :

$$\phi_x = -nv_x^2 \tau \frac{dE}{dT} \frac{dT}{dx}$$

avec E l'énergie d'un électron à la température T , le terme $n \frac{dE}{dT}$ représente la capacité

calorifique du matériau C_v . On a alors l'expression de la conductivité thermique en 3

dimensions : $\vec{\phi} = -\lambda \overrightarrow{\text{grad}}(T)$ avec $\lambda = \frac{1}{3} v^2 \tau C_v = \frac{1}{3} l v C_v$

Dans cette équation, v est la vitesse quadratique moyenne des électrons dans le gaz, et l leur libre parcours moyen. Malheureusement, l'expression contient à nouveau le temps de relaxation τ , qui est très difficile à estimer.

c) Interaction avec un rayonnement électromagnétique

Nous pouvons utiliser le modèle de Drude pour étudier la propagation d'un rayonnement électromagnétique dans le gaz d'électrons de densité n (nombre d'électrons de conduction par unité de volume). Dans ce modèle *le comportement d'un électron est supposé celui d'une particule de masse m* . Sous l'effet d'un champ électrique \vec{E} et d'une induction magnétique \vec{B} , la densité de courant étant donnée sous la forme :

$$\vec{J} = \sigma_{\omega} \vec{E} \quad \text{avec} \quad \sigma_{\omega} = \frac{\sigma}{1 - i\omega\tau} : \text{conductivité complexe}$$

En supposant que la longueur d'onde du rayonnement est grande devant le libre parcours moyen des électrons de conduction dans le métal, on peut utiliser la relation précédente pour résoudre les équations de Maxwell :

On obtient :

$$\vec{\text{rot}}(\vec{B}) = -\frac{1}{i\omega} \vec{\text{div}}(\text{grad}(\vec{E}))$$

loi de Maxwell-Gauss	$\text{div}(\vec{E}) = 0$
loi de Biot et Savart	$\text{div}(\vec{B}) = 0$
loi de Maxwell-Faraday	$\vec{\text{rot}}(\vec{E}) = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$
loi de Maxwell-Ampère	$\vec{\text{rot}}(\vec{B}) = \mu_0 \vec{J} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$

et
$$\vec{\text{div}}(\text{grad}(\vec{E})) = -\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon \vec{E} \quad \text{avec} \quad \epsilon = 1 - \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0 (i + \omega\tau)}$$

ϵ constante diélectrique. On a utilisé ici la relation $\epsilon_0 \mu_0 c^2 = 1$, où c est la vitesse de la lumière, μ_0 la perméabilité magnétique et ϵ_0 la permittivité du vide.

Dans le cas d'un rayonnement avec une pulsation élevée, pour les quelles $\omega\tau \gg 1$, la constante diélectrique décrivant le gaz d'électrons s'écrit sous la forme :

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \times (-1) \quad \text{avec} \quad \omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m}$$

La fréquence $\nu_p = \frac{\omega_p}{2\pi}$, associée à la pulsation ω_p , est appelée **fréquence de plasmon**. Si la fréquence de l'onde électromagnétique est inférieure à cette fréquence de plasmon, alors le constant diélectrique ϵ est positif. Dans ce cas, la solution de l'équation de propagation donnant le champ électrique est une onde s'amortissant dans le solide. Inversement, pour des fréquences supérieures, l'onde solution se propage dans le gaz d'électrons

On met ainsi en évidence une longueur d'onde $\lambda_p = \frac{c}{\nu_p}$ au-dessus de laquelle les métaux sont opaques, et en dessous de laquelle ils sont transparents. Cette longueur d'onde, dite

longueur d'onde de plasmon, est donnée sous la forme :

$$\lambda_p = \frac{c}{e} \sqrt{\frac{\pi m}{n}}$$

Le tableau ci-joint donne une comparaison entre les longueurs d'onde de plasmon mesurées, λ_0 , et calculées avec le modèle de Drude, λ_p . L'accord est relativement bon.

métal	λ_p (nm)	λ_0 (nm)
Li	150	≈200
Na	200	≈210
K	280	≈310
Ag	140	≈160

II Modèle de Sommerfeld

Le modèle de Drude a été développé bien avant la physique quantique. Il était donc difficile dans ce modèle de traiter correctement le gaz d'électrons. En particulier, la distribution des vitesses des électrons était supposée suivre une statistique issue de la théorie cinétique des gaz. Or, les électrons ne peuvent pas être traités simplement comme des particules massiques ayant une cinétique donnée. En effet, les électrons étaient des fermions, c'est-à-dire possédaient un nombre quantique de spin demi-entier, et surtout obéissaient au principe de Pauli.

Le modèle de Sommerfeld repose sur l'approximation des électrons libres, comme le modèle de Drude. Cependant, la nature quantique des électrons est prise en compte, conduisant à une meilleure estimation de certaines quantités en jeu dans ce type de modèle. Ceci est expliqué dans le premier paragraphe de ce chapitre. Ensuite, les propriétés des matériaux sont à nouveau analysées à l'aide de ce modèle.

I-1 Description du modèle

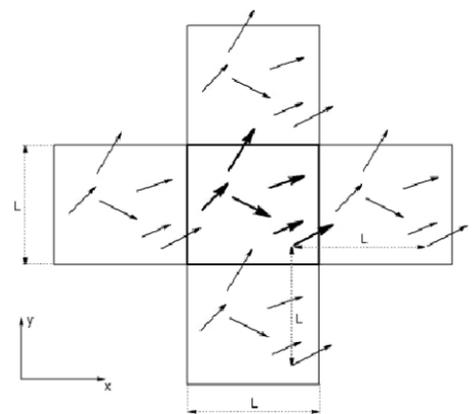
a) Approximation des électrons libres

Dans ce modèle nous allons en fait utiliser une boîte en forme de cube de côté L , soit $V=L^3$. Ce cube constitue un élément de volume représentatif du matériau, et non une boîte dans laquelle sont confinés les électrons. En fait, lorsqu'un électron sort de cette boîte, un autre est supposé arriver avec les mêmes caractéristiques par le côté opposé. Comme illustré en 2D dans la figure ci-joint, ceci revient à utiliser les conditions aux limites *périodiques CLP*, sur la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ décrivant l'état d'un électron :

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L)$$

En choisissant une référence telle que le potentiel soit constant et nul dans le matériau, et donc dans la boîte, l'équation de Schrödinger correspondant aux états stationnaires de chaque électron s'écrit :

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) = \mathcal{E}\psi(\vec{r})$$

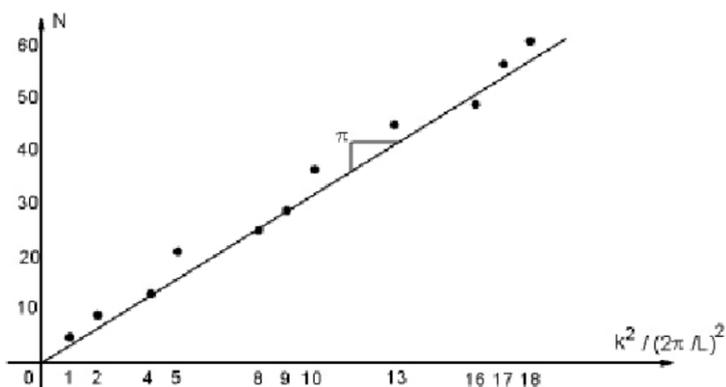
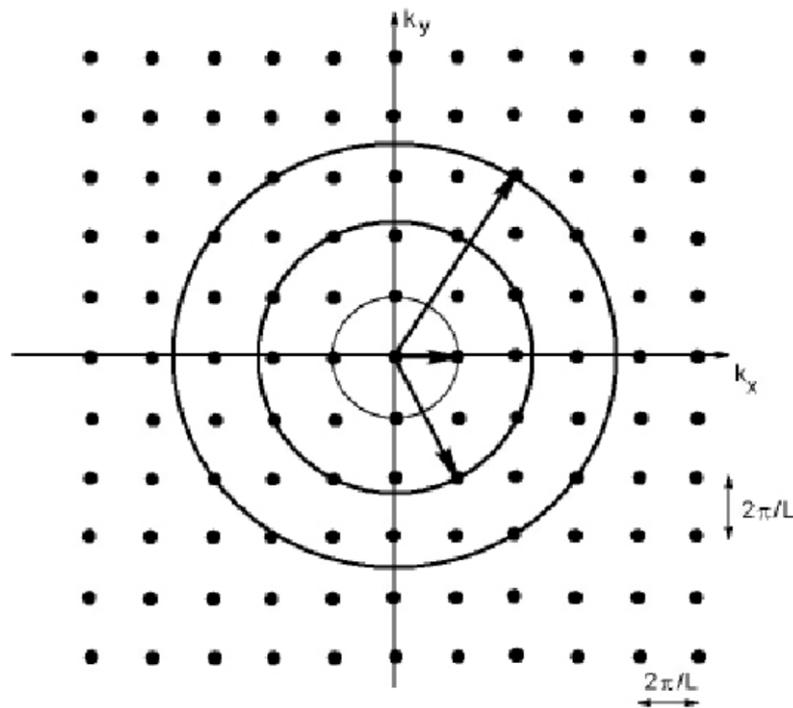


les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger ψ_n et leur énergie E_n sous la forme suivante :

$$\psi_n(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} \text{ avec } \vec{k}_n = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z)$$

$$\mathcal{E}_n = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}_n \cdot \vec{k}_n = \mathcal{E}_0 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \text{ avec } \mathcal{E}_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2$$

Dans ces équations, on voit que l'énergie des électrons dans la boîte (cube de côté L) est dégénérée en bandes d'énergie. En effet, les entiers n_x , n_y et n_z prennent des valeurs discrètes. Par exemple, pour $n_x = 1$, $n_y = 0$ et $n_z = 0$, on a $E = E_0$. On parle de l'état (100). On remarque que les états (010), (001), (100), (010) et (001) sont tous au niveau énergétique E_0 . On peut ensuite traiter le niveau d'énergie $2E_0$, par exemple pour l'état (110), etc. . .



La figure illustre en 2D que les niveaux de même énergie sont tous situés sur un même cercle (une même sphère en 3D) d'après l'équation. Chaque état possible correspond à un

point sur cette figure. Ainsi, pour chaque niveau d'énergie, on peut compter le nombre d'états possibles. Cette même figure donne l'évolution du nombre d'états possibles à niveau d'énergie égal ou inférieur à celui donné par un vecteur d'onde \vec{k} , de norme k . En abscisse, nous avons porté la quantité k^2 divisée par la surface d'une cellule élémentaire dans l'espace des \vec{k} , soit $(2\pi/L)^2$. On trouve approximativement une droite de pente π . En fait, le nombre d'état peut être estimé en 2D par le rapport entre la surface du cercle de rayon k et celle d'une cellule élémentaire. Cette estimation sera d'autant plus valide lorsque k augmentera. En effet, cette estimation revient à supposer qu'il existe un état possible (un point) par cellule élémentaire. En 3D, le même raisonnement conduit au nombre suivant d'états possibles N_s , en utilisant des volumes au lieu de surfaces :

$$N_s = \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{k^3}{6\pi^2} L^3$$

b) Distribution de Fermi-Dirac

Chaque état illustré dans la figure correspond à un état électronique particulier, pour chaque état, on peut associer deux électrons, un avec un spin parallèle ($s = 1/2$) et un avec un spin anti-parallèle ($s = -1/2$). Le nombre d'électrons possibles est donc le double du nombre d'états possibles.

On note k_F le rayon de la sphère correspondant au niveau d'énergie maximum des électrons dans le matériau au $T = 0K$. A cette température, on peut donner sa densité électronique, c'est-à-dire le nombre d'électrons par unité de volume, sous la forme (N est le nombre d'électrons, V est le volume de l'élément représentatif utilisé) :

$$\boxed{n = \frac{N}{V} = 2 \frac{N_s}{L^3} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}}$$

Le vecteur d'onde k_F est appelé *vecteur d'onde de Fermi*. On peut lui associer une énergie E_F , appelée *énergie de Fermi*, et une vitesse v_F , appelée *vitesse de Fermi*, sous la forme :

$$\mathcal{E}_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

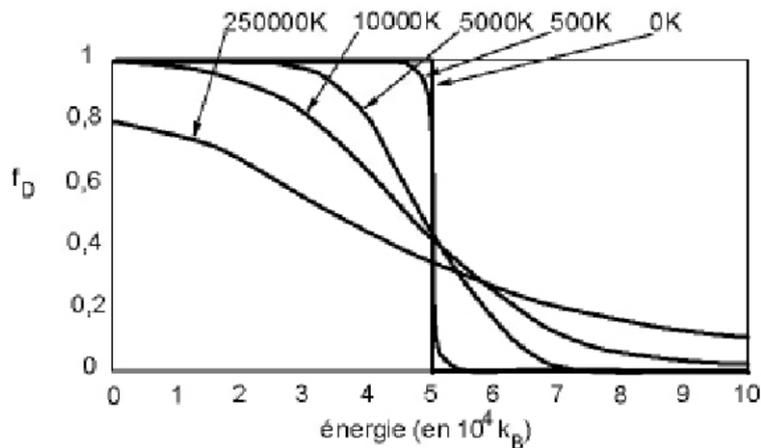
$$v_F = \frac{\hbar}{m} k_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3}$$

La surface délimitant dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k} les états énergétiques possibles des autres est celle de rayon k_F . On l'appelle **surface de Fermi**. Dans l'approximation des électrons libres, cette surface est celle d'une sphère.

Lorsque la température augmente, l'énergie cinétique du gaz d'électrons augmente. Certains niveaux d'énergie, vides au zéro absolu, deviennent occupés, tandis que d'autres, remplis au zéro absolu, deviennent libres. La *fonction de distribution de Fermi-Dirac* donne la probabilité qu'une orbitale d'énergie E soit occupée, dans le cas d'un gaz électronique idéal en équilibre thermique :

$$f_D(\mathcal{E}) = \frac{1}{e^{(\mathcal{E}-\mu)/k_B T} + 1}$$

μ : *potentiel chimique* doit être telle que le nombre de particules (d'électrons dans notre cas) N soit constant. A $T = 0$ K, $\mu = E_F$, car lorsque $T = 0$ la distribution de Fermi-Dirac passe de façon discontinue de la valeur 1 (niveau rempli) à la valeur 0 (niveau vide) pour $E=E_F=\mu$.



Lorsque l'énergie devient supérieure au niveau de Fermi, on a $E - \mu \gg k_B T$, et dans la fonction f_D : le terme en exponentielle devient prépondérant. Cette fonction s'approche alors de la fonction de distribution suivante, qui est la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann :

$$f_B(\mathcal{E}) = e^{(\mu-\mathcal{E})/k_B T}$$

II-2 Quelques propriétés physiques

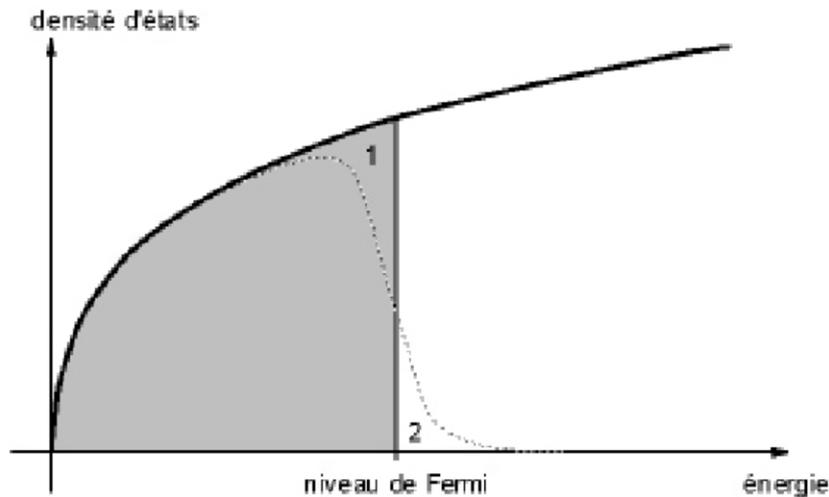
a) Capacité calorifique des électrons

La capacité calorifique d'un métal est estimée à l'aide de la contribution des phonons, c'est-à-dire celle du réseau cristallin. Or, le gaz d'électrons a également une contribution à cette propriété thermique. Cette contribution est surtout forte à basse température.

Pour la calculer, on utilise la densité d'états $D(E)$, qui donne le nombre d'électrons de conduction par unité d'énergie dans un volume unité. En utilisant les relations précédentes, on peut calculer le nombre d'électrons à un niveau d'énergie inférieur à E sous la forme :

$$n(\mathcal{E}) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

$$\Rightarrow \boxed{D(\mathcal{E}) = \frac{dn}{d\mathcal{E}} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \mathcal{E}^{1/2} = \frac{3n}{2\mathcal{E}}}$$



La figure donne en trait plein l'évolution de la densité d'états d'un métal en fonction de l'énergie. En pointillés, on a tracé la fonction $f_D(E)D(E)$, qui donne la densité des états remplis par niveau d'énergie, à une température T telle que $k_B T \ll E_F$. La partie ombrée donne les états remplis au zéro absolu. Lorsque la température augmente, les électrons passent par agitation thermique de la région marquée 1 à la région marquée 2.

$$\Delta U = \int_0^\infty f_D(\mathcal{E})D(\mathcal{E})(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F)d\mathcal{E} - \int_0^{\mathcal{E}_F} D(\mathcal{E})(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F)d\mathcal{E}$$

$$\boxed{C_v = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \Delta U}{\partial T} = \int_0^\infty \frac{\partial f_D(\mathcal{E})}{\partial T} D(\mathcal{E})(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F)d\mathcal{E}}$$

Aux basses températures, $k_B T \ll E_F$. On fait les hypothèses successives suivantes :

– le potentiel chimique $\mu = E_F = C^{te}$. On obtient :

$$\frac{\partial f_D(\mathcal{E})}{\partial T} = \frac{1}{T} x^2 \frac{e^x}{(1 + e^x)^2} \text{ avec } x = \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B T}$$

– Le terme $(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F) \frac{\partial f_D(\mathcal{E})}{\partial T}$ ne prend de valeurs importantes que pour des énergies proches du niveau de Fermi. On peut donc sortir le terme $D(E)$ de l'intégrale en l'estimant à E_F et écrire en utilisant l'équation précédente :

$$C_v \approx k_B^2 T D(\mathcal{E}_F) \int_{-\mathcal{E}_F/k_B T}^{\infty} x^2 \frac{e^x}{(1+e^x)^2} dx$$

– La borne inférieure de l'intégrale précédente peut être remplacée par $-\infty$ aux basses températures. Ceci conduit à estimer l'intégrale suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \frac{e^x}{(1+e^x)^2} dx = \frac{\pi^2}{3}$$

L'ensemble de ces hypothèses nous conduit à écrire la contribution aux basses températures des électrons à la capacité calorifique des matériaux ($E_F = k_B \cdot T_F$):

$$C_v = \frac{\pi^2}{3} D(\mathcal{E}_F) k_B^2 T = \frac{\pi^2}{3} \frac{n k_B^2 T}{\mathcal{E}_F} = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{T_F}$$

Aux basses températures, la contribution des électrons à la capacité calorifique d'un cristal est linéaire en température. Nous avons vu au chapitre précédent que la contribution du réseau à cette propriété était une fonction en T^3 (modèle de Debye). En pratique, on écrit

souvent :

$$C_v = \gamma T + \alpha T^3$$

Pour obtenir les coefficients γ et α , on trace la quantité C_v/T mesurée en fonction de T^2 . On obtient ainsi une droite. L'ordonnée à l'origine fournit γ , tandis que la pente donne α . La comparaison entre les valeurs mesurées et celles prédites par le modèle n'est pas toujours bonne. Ceci vient des phénomènes suivants qui sont négligés :

- approximation des électrons libres : utilisation d'un potentiel constant pour représenter le matériau comme une boîte, et interactions électron-phonon négligées.
- approximation des électrons indépendants : interactions électron-électron négligées.

b) Conductibilité électrique

Dans un champ électrique \vec{E} et un champ magnétique \vec{B} , la force \vec{F} exercée sur un électron de charge $-e$ se déplaçant à la vitesse \vec{v} est :

$$\vec{F} = -e (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$$

La force exercée sur l'électron peut être reliée à la variation dans le temps de sa quantité de mouvement. Or, cette quantité de mouvement s'écrit $m\vec{v}$ dans le cadre de la mécanique classique et $\hbar\vec{k}$ dans le cadre de la mécanique ondulatoire. On peut donc écrire :

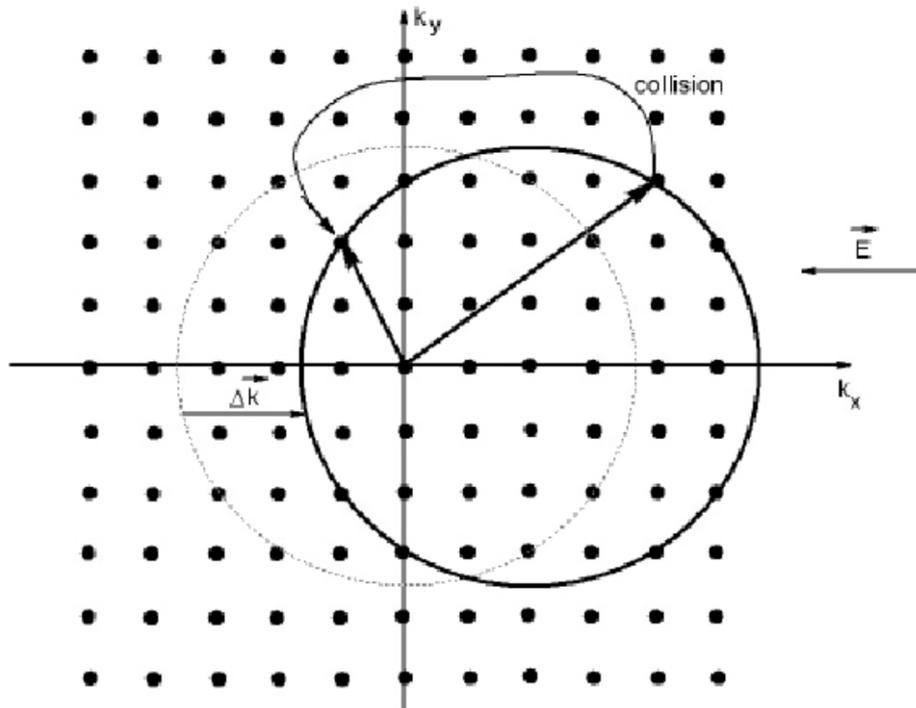
$$\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$$

$$\Delta \vec{k} = -\frac{e\Delta t}{\hbar} \vec{E}$$

après avoir négligé l'effet du champ magnétique.

On peut donc imaginer que l'ensemble des électrons situés dans la sphère de Fermi subissent une translation identique de vecteur d'onde $\Delta \vec{k}$ donnée par cette relation. La sphère de Fermi serait donc déplacée dans son ensemble d'une quantité proportionnelle au champ appliqué et au temps d'application, et dans la direction opposée à ce champ.

Des collisions ont lieu entre les électrons et les impuretés, les défauts du réseau et les phonons. Elles permettent à la sphère de Fermi de rester dans une position stationnaire sous l'effet d'un champ électrique.



Évolution de la surface de Fermi d'un métal soumis à un champ électrique

Il s'en suit que la surface de Fermi n'est déplacée que de la quantité constante $\Delta \vec{k} = -\frac{e\Delta t}{\hbar} \vec{E}$,

et que la vitesse moyenne des électrons est $\vec{v} = (\hbar/m)\Delta \vec{k} = -(\epsilon\tau/m)\vec{E}$. Pour obtenir maintenant une estimation de la conductibilité électrique, il suffit d'estimer le nombre d'électrons en jeu, n , avec : $\vec{J} = \sigma \vec{E}$ et $\vec{J} = -ne\vec{v}$

Donc :

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau}{m}$$

Une conclusion importante de ce modèle est que seuls les électrons de Fermi contribuent à la conduction électrique.

c) Loi de Wiedemann-Franz

Précédemment, les conductivités thermique et électrique ont été écrites sous la forme suivante :

$$\lambda = \frac{1}{3} C_v v l \quad (\text{conductivité thermique})$$

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau}{m} \quad (\text{conductivité électrique})$$

La loi de Wiedemann-Franz stipule que, pour les métaux et à température pas trop basse, le rapport entre les conductibilités thermique λ et électrique σ est directement proportionnel à la température, la valeur de la constante de proportionnalité, où *nombre de Lorentz L*, étant indépendante du métal considéré. Le tableau ci-dessous donne quelques valeurs mesurées du nombre de Lorentz à 273K et à 373K pour différents métaux. On constate que cette loi est vérifiée à ces températures, et dans un domaine relativement large de variation des quantités λ et σ .

métal	273K		373K	
	λ	$\lambda/\sigma T$	λ	$\lambda/\sigma T$
Li	0,71	2,22	0,73	2,43
Na	1,38	2,12	liq.	
K	1,00	2,23	liq.	
Rb	0,60	2,42	liq.	
Cu	3,85	2,20	3,82	2,29
Ag	4,18	2,31	4,17	2,38
Au	3,10	2,32	3,10	2,36
Be	2,30	2,36	1,70	2,42
Mg	1,50	2,14	1,50	2,25
Nb	0,52	2,90	0,54	2,78
Fe	0,80	2,61	0,73	2,88
Zn	1,13	2,28	1,10	2,30
Al	2,38	2,14	2,30	2,19
In	0,88	2,58	0,80	2,60
Tl	0,50	2,75	0,45	2,75
Sn	0,64	2,48	0,60	2,54
Pb	0,38	2,64	0,35	2,53
Bi	0,09	3,53	0,08	3,35
Sb	0,18	2,57	0,17	2,69

Dans le cadre du modèle de Sommerfeld, également appelé modèle du gaz de Fermi ou modèle des électrons libres, la capacité calorifique du cristal aux basses températures est

donnée par la relation
$$C_v = \frac{\pi^2}{3} D(\mathcal{E}_F) k_B^2 T = \frac{\pi^2}{3} \frac{nk_B^2 T}{\mathcal{E}_F} = \frac{\pi^2}{2} nk_B \frac{T}{T_F}$$

Dans cette relation, on peut remplacer l'énergie de Fermi E_F par l'énergie cinétique des électrons correspondants, soit $\frac{1}{2} m v_F^2$, où v_F est la vitesse des électrons au niveau de Fermi.

De plus, on peut considérer que ce sont ces électrons, provenant des couches les plus élevées, qui contribuent à la conduction, de sorte que v_F est aussi la vitesse moyenne des électrons de conduction et que leur libre parcours moyen vaut $l = v_F \cdot \tau$. Il s'en suit que les expressions de λ et σ deviennent :

$$\lambda = \frac{\pi^2 k_B^2 n \tau}{3m} T \quad (\text{conductivité thermique})$$

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau}{m} \quad (\text{conductivité électrique})$$

Le rapport entre λ et σT donne le nombre de Lorentz :

$$L = \frac{\lambda}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \approx 2,45 \cdot 10^{-8} W \Omega / K^2$$

On constate que la valeur obtenue est bien indépendante de la température et des métaux considérés, et qu'elle est en bon accord avec celle obtenue expérimentalement. Ce résultat est très important car il fut l'un des premiers à prouver la validité des modèles de gaz d'électrons.