

Cours

Les limites du modèle de Drude

Le modèle de Drude a été conçu en 1900, trois ans après la découverte de l'électron.

Le métal est décrit comme un réseau d'ions fixes baignés par un gaz d'électrons libres, de masse m , de charge $-e$ et de densité particulaire n .

Hypothèses

- les électrons sont indépendants et libres. Entre deux chocs, ils ne sont soumis qu'au champ \vec{E} appliqué;
- les collisions avec les ions du métal sont instantanées;
- la probabilité par unité de temps qu'un électron subisse une collision est $1/\tau$, où τ , appelé « temps de collision », dépend de la température T ;
- on adopte l'hypothèse du chaos moléculaire; la direction de la vitesse \vec{v} d'un électron après un choc est aléatoire.

Temps de libre parcours moyen

La probabilité qu'un électron subisse une collision pendant la durée dt , entre les instants t et $t + dt$, est $\frac{dt}{\tau}$.

Soit $P(t)$ la probabilité qu'un électron ne subisse pas de collision pendant une durée t .

On peut donc écrire

$$P(t + dt) = P(t) \times \text{probabilité qu'il ne subisse pas de collision pendant } dt$$

soit

$$P(t + dt) = P(t) \times \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right).$$

On a donc $P(t + dt) - P(t) = \frac{dP}{dt} dt = -P(t) \frac{dt}{\tau}$, d'où $\frac{dP}{P} = -\frac{dt}{\tau}$.

On en déduit $P(t) = A e^{-t/\tau}$. La probabilité qu'un électron subisse une collision pendant une durée nulle étant nulle, on a $\lim_{t \rightarrow 0} P(t) = 1$, d'où $A = 1$.

La probabilité d'un électron ne subisse pas de collision pendant une durée t vaut $P(t) = e^{-t/\tau}$.

Soit $P_c(t)$ la probabilité qu'un électron :

- ne subisse pas de collision jusqu'à l'instant t (à partir de l'instant $t' = 0$);
- subisse une collision entre t et $t + dt$.

On a

$$P_c(t) = P(t) \times \frac{dt}{\tau} = e^{-t/\tau} \frac{dt}{\tau}.$$

La probabilité $P_c(t)$ représente la probabilité que la « durée de vie » (sans collision) d'un électron soit égale à t .

La durée de vie moyenne τ , appelée temps de libre parcours moyen, d'un électron est donc donnée par

$$\tau = \int_0^{+\infty} t P_c(t) dt = \frac{1}{\tau} \int_0^{+\infty} t e^{-t/\tau} dt.$$

Intégrons par parties :

$$\tau = \frac{1}{\tau} \left(\left[-\tau t e^{-t/\tau} \right]_0^{+\infty} + \tau \int_0^{+\infty} e^{-t/\tau} dt \right) = \int_0^{+\infty} e^{-t/\tau} dt = \left[-\tau e^{-t/\tau} \right]_0^{+\infty} = \tau.$$

Le temps de libre parcours moyen d'un électron, durée moyenne entre deux chocs, est donné par τ .

Équation du mouvement

Entre deux collisions, l'électron n'est soumis qu'au champ électrique \vec{E} . Le principe fondamental de la dynamique s'écrit alors

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E}.$$

Nous allons raisonner en moyenne sur N électrons, en notant $\langle \vec{v}(t) \rangle$ leur vitesse moyenne à l'instant t . À partir de l'instant t :

- une proportion $1 - \frac{dt}{\tau}$ d'électrons ne subit pas de collision entre t et $t + dt$;
- une proportion $\frac{dt}{\tau}$ subit une collision « à l'instant t » (en fait, ils subissent une collision entre t et $t + dt$, mais dans la limite $dt \rightarrow 0$ on considère qu'ils subissent une collision à l'instant t).

Considérons un électron n'ayant pas subi de collision à l'instant t . En notant $d\vec{v} = \vec{v}(t + dt) - \vec{v}(t)$, on peut écrire sa vitesse à l'instant $t + dt$ à partir du PFD :

$$m \vec{v}_{\text{n.c.}}(t + dt) = m \vec{v}(t) - e\vec{E} dt,$$

soit en valeur moyenne sur les électrons ne subissant pas de collision

$$m \langle \vec{v}_{\text{n.c.}}(t + dt) \rangle = \left[m \langle \vec{v}(t) \rangle - e\vec{E} dt \right].$$

Considérons les électrons ayant subi une collision à l'instant t . Comme précédemment, le PFD peut s'écrire

$$m \vec{v}_{\text{col}}(t + dt) = m \vec{v}(t) - e\vec{E} dt,$$

soit en valeur moyenne sur les électrons subissant une collision

$$m \langle \vec{v}_{\text{col}}(t + dt) \rangle = \frac{dt}{\tau} \left(m \langle \vec{v}(t) \rangle - e\vec{E} dt \right).$$

D'après l'hypothèse du chaos moléculaire, la direction de la vitesse est aléatoire juste après le choc ; on a donc en moyenne pour ces électrons $\langle \vec{v}(t) \rangle = \vec{0}$, d'où

$$m \langle \vec{v}_{\text{col}}(t + dt) \rangle = -e\vec{E} dt.$$

La vitesse moyenne de tous les électrons en $t + dt$ est donc donnée, compte tenue des proportions respectives des deux populations étudiées précédemment, par

$$\begin{aligned} \langle \vec{v}(t + dt) \rangle &= \left(1 - \frac{dt}{\tau} \right) \langle \vec{v}_{\text{n.c.}}(t + dt) \rangle + \frac{dt}{\tau} \langle \vec{v}_{\text{col}}(t + dt) \rangle \\ &= \left(1 - \frac{dt}{\tau} \right) \left[\langle \vec{v}(t) \rangle - \frac{e}{m} \vec{E} dt \right] + \frac{dt}{\tau} \left[-\frac{e}{m} \vec{E} dt \right] \\ &= \left(1 - \frac{dt}{\tau} \right) \langle \vec{v}(t) \rangle - \frac{e}{m} \vec{E} dt. \end{aligned}$$

Notons $\vec{u}(t) = \langle \vec{v}(t) \rangle$ la vitesse moyenne, ou *vitesse de dérive* des électrons. La relation précédente s'écrit

$$m \vec{u}(t + dt) = m \left(1 - \frac{dt}{\tau} \right) \vec{u}(t) - e\vec{E} dt$$

soit

$$m [\vec{u}(t + dt) - \vec{u}(t)] = -\frac{m}{\tau} \vec{u}(t) dt - e\vec{E} dt.$$

On en déduit l'équation différentielle vérifiée par la vitesse de dérive des électrons :

$$m \frac{d\vec{u}}{dt} = -\frac{m}{\tau} \vec{u} - e\vec{E}.$$

- On retrouve l'interprétation mécanique, où les interactions des électrons avec les ions est modélisée par une force de frottement fluide $-\frac{m}{\tau} \vec{u}$.

Loi d'Ohm locale

En régime établi, l'équation différentielle précédent conduit à une vitesse de dérive constante

$$\vec{v}_\infty = -\frac{e\tau}{m}\vec{E}.$$

Le vecteur densité de courant de charge est donné par $\vec{j} = -ne\vec{v}_\infty$, d'où la loi d'Ohm locale

$$\vec{j} = \sigma\vec{E} = \frac{ne^2\tau}{m}\vec{E}.$$

Limite du modèle

Dans le cas du cuivre, le paramètre de maille du réseau de cations métalliques est de l'ordre de $a \approx 3 \text{ \AA}$, d'où $n \approx \frac{1}{a^3} \approx 10^{28} \text{ m}^{-3}$.

On mesure expérimentalement une résistivité $\rho = \frac{1}{\sigma} \approx 2 \mu\Omega \cdot \text{cm}$ à 300 K, d'où $\tau \approx 10^{-14} \text{ s}$.

Le libre parcours moyen ℓ , distante moyenne entre deux chocs, est la distance moyenne parcourue par un électron pendant la durée moyenne τ entre deux chocs, soit $\ell = \bar{v}_{\text{th}}\tau$ où \bar{v}_{th} est la vitesse moyenne d'agitation thermique¹.

Avec la loi de distribution de Boltzmann, on peut écrire $\frac{1}{2}m\bar{v}_{\text{th}}^2 = \frac{3}{2}k_{\text{B}}T$, d'où $\bar{v}_{\text{th}} \approx 6 \times 10^4 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ à 300 K.

On en déduit une estimation du libre parcours moyen : $\ell \approx 20 \text{ \AA}$, de l'ordre de la distance a entre deux atomes voisins, ce qui semble correct.

Cependant, un examen plus attentif des résultats montre les limites du modèle de Drude :

- à 77 K, on trouve $\ell \approx 130 \text{ \AA}$, ce qui est nettement plus grand que a ;
- la distribution de Boltzmann ne convient pas pour décrire la vitesse moyenne des électrons dans le métal; il faut prendre en fait $\bar{v}_{\text{th}} \approx 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, ce qui donne $\ell \approx 3400 \text{ \AA}$ à 77 K.

Le libre parcours moyen est en fait bien plus grand que la distance entre deux ions voisins du métal, ce qui met à mal le modèle de collisions des électrons avec les ions.

En fait, il faut adopter une description basée sur la physique quantique; on trouve alors que les électrons ont peu d'interactions avec les ions qui ont une structure périodique, mais interagissent plutôt les défauts de la structure cristalline (impuretés, dislocations).

1. La distance parcourue par un électron entre deux chocs dépend du module de sa vitesse, qui peut s'approximer par le module de son agitation thermique car $\bar{v}_{\text{th}} \gg \|\vec{u}\|$.