



HAL
open science

Enseigner la Physique du Solide : un exemple d'initiation à la modélisation en Physique

Christophe Durand, C. Darie

► To cite this version:

Christophe Durand, C. Darie. Enseigner la Physique du Solide : un exemple d'initiation à la modélisation en Physique. 2023. <hal-04145132v3>

HAL Id: hal-04145132

<https://hal.science/hal-04145132v3>

Preprint submitted on 14 Jul 2025

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons CC BY-NC-SA 4.0 - Attribution - Non-commercial use - ShareAlike - International License

Enseigner la Physique du Solide : un exemple d'initiation à la modélisation en Physique

Christophe Durand & Céline Darie

Abstract. Since electrons determine most of the electronic, optical and thermal properties of matter, the challenge is to model them in order to explain and predict the properties of new materials. This modeling is highly complex, since it must take into account the infinitely small via quantum physics, and the infinitely large scale considering all the electrons in matter. Since the exact calculation is limited to just a few electrons, it is necessary to introduce strong approximations. In laboratories, this modeling is based on complex *ab initio* or semi-empirical methods. This raises the question of how to teach electron modeling. To address this issue, we have made several choices. First, an epistemological choice by introducing a gradual approach starting from 2 atoms up to 10^{22} . We show that the formalism established for a few atoms becomes unusable in the face of very large numbers, and *in fine* to understand the need to introduce new concepts. Second, a pedagogical choice using Problem-Based Learning (PBL). Third, a methodological choice by moving from one model to another that is more complex, but more realistic. This gradual approach "from one model to the next" allows us to reflect on the notion of models, their links with reality and their limits. This experience is an opportunity to think more generally about model learning in physics, and to suggest ways of involving students in modeling activities.

Keywords. Modeling in Physics, Solid-State Physics, Problem-Based Learning (PBL).

Résumé. Comme les électrons sont à l'origine de l'essentiel des propriétés électroniques, optiques et thermiques de la matière, l'enjeu est de savoir les modéliser pour expliquer et prévoir les propriétés des nouveaux matériaux. Cette modélisation est très complexe car elle doit tenir compte de l'infiniment petit *via* la physique quantique et de l'infiniment grand en considérant tous les électrons de la matière. Le calcul exact étant limité à seulement quelques électrons, il est nécessaire d'introduire de fortes approximations. Dans les laboratoires, cette modélisation se base sur des méthodes *ab initio* ou semi-empiriques complexes. Dans ce contexte se pose la question de comment enseigner cette modélisation des électrons. Pour aborder cette problématique, nous avons fait plusieurs choix. Premièrement, un choix épistémologique en introduisant une approche graduelle en partant de 2 jusqu'à 10^{22} atomes. Nous montrons que le formalisme établi pour quelques atomes devient inutilisable face aux très grands nombres, et *in fine* de comprendre la nécessité d'introduire de nouveaux concepts. Deuxièmement, un choix pédagogique en utilisant l'Apprentissage Par Problème (APP). Troisièmement, un choix méthodologique en passant d'un modèle à un autre plus complexe, mais plus réaliste. Cette approche graduelle « d'un modèle à l'autre » permet de réfléchir sur la notion de modèles, de leur lien avec le réel et de leurs limites. Cette expérience est l'occasion de réfléchir plus généralement sur l'apprentissage des modèles en physique en proposant des pistes pour engager les étudiants dans des activités autour de la modélisation.

Mots-clés. Modélisation en Physique, Physique du Solide, Apprentissage Par Problème (APP).

Table des matières

1.	Comment modéliser les électrons dans la matière ?	3
1.A.	La physique quantique appliquée aux électrons d'un seul atome.....	3
1.B.	La physique quantique appliquée aux électrons de N atomes : un problème extraordinairement complexe	4
1.C.	Les différentes méthodes de modélisation des électrons dans la matière.....	6
2.	L'enseignement de la modélisation des électrons dans la matière	7
2.A.	Les obstacles épistémologiques	7
2.B.	Les 3 manières d'enseigner la physique du solide.....	8
3.	Notre approche didactique et pédagogique.....	9
3.A.	Notre choix didactique : une approche graduelle de 2 jusqu'à 10^{24} atomes.....	10
3.B.	Notre choix pédagogique : Apprentissage Par Problème (APP)	11
3.C.	Notre choix méthodologique : d'un modèle à l'autre	13
4.	Bilan et discussion sur la modélisation.....	14
4.A.	Analyse du dispositif	14
4.B.	Travail sur la notion de modèle en physique	14
4.C.	Activités d'apprentissage pour initier à la modélisation.....	15
4.D.	Pistes pour initier les étudiants à la modélisation	16
	Références.....	17

La physique du solide est une matière essentielle pour décrire et comprendre les propriétés physiques de très nombreux matériaux : les métaux, les semiconducteurs, les isolants, les matériaux magnétiques, les supraconducteurs, les matériaux bidimensionnels comme le graphène, etc. Bien que la Physique du Solide soit considérée comme l'une des matières les plus intéressantes à enseigner en Physique, il faut reconnaître qu'elle est particulièrement difficile à transmettre, d'autant plus qu'il n'existe pas vraiment de réflexion pédagogique et épistémologique sur l'enseignement de cette matière. Par conséquent, les enseignants construisent leur cours « à leur manière » en perpétuant des méthodes issues de précédent cours ou de leurs propres études. La plupart du temps, les étudiants se retrouvent en grande difficulté face à la nouveauté de cette matière et à la complexité des modèles. Pourtant, la Physique du Solide peut être une formidable initiation à la modélisation en physique. L'enjeu est d'être capable de modéliser des électrons dans la matière pour être capable de comprendre les propriétés des matériaux. Se pose alors la question suivante : comment enseigner la physique du solide et rendre accessible ces modèles si complexes qui décrivent les comportements des électrons dans la matière ? Cet article propose un premier travail réflexif sur l'enseignement de la Physique du Solide. Pour cela, nous identifierons d'abord l'origine des difficultés des étudiants et les différentes approches utilisées par les enseignants. Ensuite, nous proposerons des pistes pour enseigner la

physique du Solide afin de donner une vision complète de cette matière sans éluder les difficultés. Enfin, nous dresserons un bilan et discuterons d'une manière plus générale sur des différentes méthodes possible pour initier les étudiants à la modélisation en physique.

1. Comment modéliser les électrons dans la matière ?

Les propriétés thermiques, électriques et optiques des matériaux sont directement issues du comportement des électrons dans la matière. Cependant, la modélisation de ces électrons en interaction est un problème singulièrement difficile, car il fait intervenir d'un côté l'infiniment petit lié à la taille des atomes (de l'ordre de 10^{-10} m) qui nécessite d'appliquer la physique quantique, et de l'autre côté l'infiniment grand lié au très nombre d'atomes dans les solides (env. 10^{22} atomes/cm³). Dans cette partie, nous proposons de présenter les grands principes de la physique quantique appliqués à ce très grand nombre d'atomes pour décrire les électrons dans les solides. Pour cela, nous décrirons d'abord le comportement des électrons pour un seul atome. Ensuite, nous décrirons comment évolue cette description des électrons en considérant N atomes. Enfin, nous expliquerons brièvement les méthodes classiquement utilisées pour résoudre le problème des électrons dans la matière, lorsque N devient extrêmement grand.

1.A. La physique quantique appliquée aux électrons d'un seul atome

Nous proposons d'abord de donner les grands principes de la physique quantique à travers l'exemple simple de la description d'un atome. Ces principes sont à la base des modèles que nous allons ensuite développer pour enseigner la physique du solide.

Comme montré à la Figure 1, l'atome peut être simplement décrit comme un système orbital avec au centre le noyau (composé de protons et de neutrons) et des électrons qui gravitent autour de celui-ci selon des niveaux d'énergies définis (appelés 1s, 2s, 2p, 3s, etc.). Les électrons, dont le nombre est égal à celui des protons pour assurer la neutralité électrique, se répartissent sur chacun des niveaux. Ce modèle est appelé « Modèle de Bohr ».

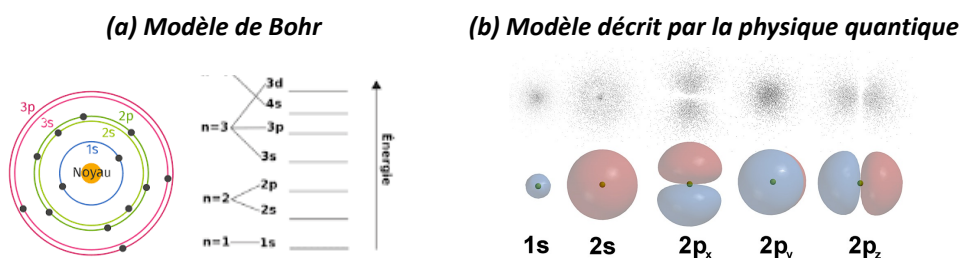


Figure 1 – Représentation des niveaux d'énergie des électrons dans un atome : (a) selon le modèle de Bohr et (b) selon le modèle obtenu en physique quantique, où les niveaux d'énergie sont représentés par des nuages de points, correspondant à une probabilité de présence des électrons.

Le développement de la physique quantique dans les années 30 a profondément fait évoluer cette vision simpliste de l'atome en introduisant les 3 concepts-clés suivants :

- **Dualité onde-corpuscule de De Broglie** : ce concept s'applique aux électrons qui sont alors considérés comme des ondes décrites mathématiquement par des fonctions d'onde
- **Équation de Schrödinger** : cette équation fondamentale de la physique quantique donne accès à la fonction d'onde et au niveau d'énergie de chaque électron
- **Principe d'incertitude d'Heisenberg** : Les électrons sont soumis à ce principe d'incertitude, qui impose de ne pas savoir avec certitude la position exacte des électrons. On définit alors une probabilité de présence de l'électron en fonction de la position dans l'espace.

En appliquant ces nouveaux principes de la physique quantiques, la description des électrons de l'atome est radicalement différente, comme le montre la Figure 1. Chaque électron est alors décrit comme une fonction d'onde et les niveaux d'énergie sont alors représentés par des nuages électroniques correspondant aux probabilités de présence des électrons.

A partir de cette vision de l'atome, on se pose la question de comment décrire les électrons dans le cas où plusieurs atomes sont en interaction. Il s'agit une question très complexe, mais fondamentale car elle est au cœur de la construction des molécules ou des solides.

1.B. La physique quantique appliquée aux électrons de N atomes : un problème extraordinairement complexe

Nous verrons que la résolution de ce problème à N atomes est d'une grande complexité et nécessite de mettre en place différents modèles simplificateurs selon la valeur de N. Sans rentrer dans les détails des modèles et des calculs, la Figure 2 montre comment évolue la description des niveaux d'énergie des électrons quand le nombre d'atomes N augmente. Comme nous venons de le voir, pour un seul atome, les électrons se répartissent par deux sur chaque niveau de l'atome isolé (1s, 2s, 2p, etc.). Quand on passe à 2 atomes, chacun des niveaux se dédouble et l'ensemble des électrons des 2 atomes se répartit sur ces niveaux d'énergie. Quand on passe à 3 atomes, chaque niveau triple et ainsi de suite. Dans le cas de plusieurs atomes, les électrons de tous les atomes sont mis au « pot commun » pour ensuite être répartis sur l'ensemble des niveaux communs d'énergie créés. Cette mise en commun des électrons est à l'origine des liaisons chimiques entre les atomes pour former les molécules et les solides.

Dans le cas des solides où un très grand nombre d'atomes est à considérer (typiquement 10^{22} at./cm³), le nombre de niveaux d'énergie et le nombre d'électrons à répartir sont gigantesques. Comme l'écart entre les niveaux d'énergie est donné par $2\pi/L$ selon l'axe des abscisses (pour des conditions aux limites périodiques, appelées conditions de Born-Von Karman), où L est la dimension du cristal, plus le cristal sera grand et plus l'écart entre niveaux d'énergie sera petit, voire insignifiant, pour former *in fine* un continuum de niveaux organisé sous forme de bandes d'énergie larges, comme le montre la Figure 2. Dans le cas particulier des solides, il y a une organisation spatiale des atomes sous la forme d'un réseau périodique pour former des cristaux. Dans ce cas, le nombre d'atomes « vus » par la fonction d'onde des électrons va varier selon la direction considérée au sein du cristal. Ainsi, la description de ces bandes d'énergie va dépendre de la direction au sein du cristal. Pour décrire cette dépendance directionnelle, le diagramme d'énergie des électrons intègre une abscisse correspondant à la direction de propagation de la fonction d'onde des électrons (appelé vecteur d'onde

des électrons, noté k). Ainsi, on va décrire le diagramme d'énergie pour différentes directions privilégiées du cristal, liées à ses axes de symétrie. Ces directions sont désignées par des lettres caractéristiques définissant des directions connues (Kittel, 2007).

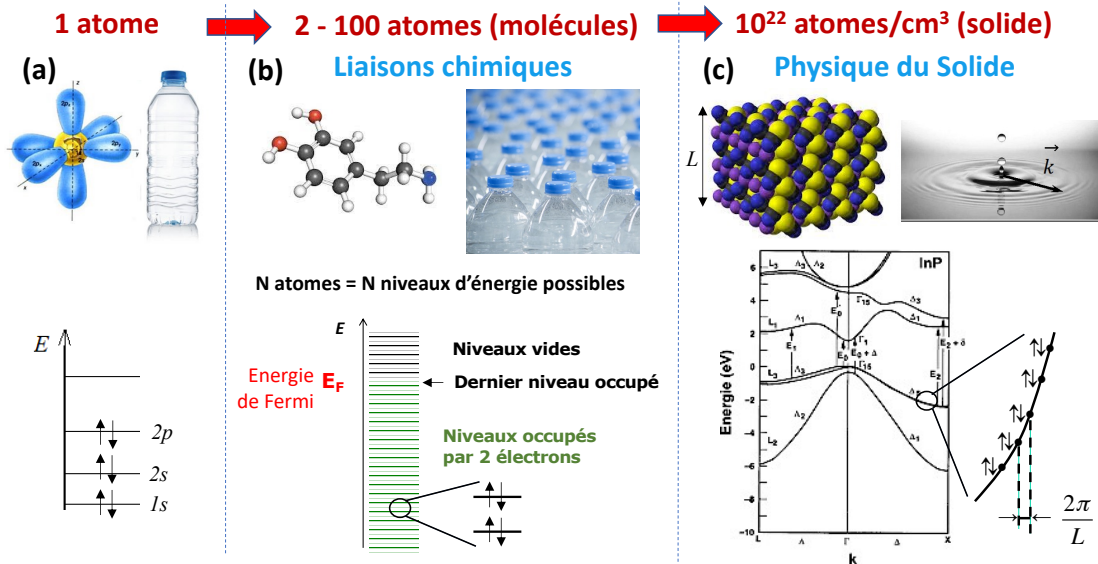


Figure 2 – Evolution du diagramme d'énergie des électrons en fonction du nombre d'atomes : (a) pour 1 atome avec les niveaux d'énergie atomiques connus ($1s$, $2s$, $2p$, etc.), (b) pour quelques dizaines d'atomes avec un nombre de niveau d'énergie qui augmente avec le nombre d'atomes, (c) pour les solides où le diagramme d'énergie devient un continuum d'énergie et varie en fonction du vecteur d'onde k , correspondant à la direction de propagation des électrons.

Comme illustré dans la Figure 2, si on prend l'image de l'eau pour les électrons, l'atome isolé est représenté par une bouteille d'eau, plusieurs atomes (2-100 atomes) formant une molécule correspondent alors à plusieurs bouteilles d'eau qui s'auto-organisent et les 10^{22} atomes/cm³ correspondant au nombre d'atomes dans les solides devient une *mer* tellement le nombre de bouteille d'eau à considérer est grand (le Physicien parle alors de *mer de Fermi* formée par l'ensemble des électrons du solide). Dans ce dernier cas spécifique, il n'y a plus de raison de considérer un ensemble de bouteilles d'eau, mais au contraire, il faut considérer l'ensemble de la mer parcourue par des ondes, telles des vagues qui vont se propager différemment selon la direction considérée.

L'enjeu de l'enseignement de la physique du solide est de transmettre cette vision où tous les électrons et tous les niveaux d'énergie sont partagés et mis ensemble dans un pot commun, le tout avec une dépendance directionnelle. Pour autant, notre objectif va plus loin, car nous souhaitons montrer par le calcul et par la résolution de modèles que ces propriétés des électrons sont directement issues de la mise en œuvre des principes de la physique quantique appliqués à un très grand nombre d'atomes.

1.C. Les différentes méthodes de modélisation des électrons dans la matière

Pour résoudre ce problème complexe de description des électrons dans le cas de plusieurs atomes, plusieurs modèles ont été développés et c'est même toujours un objet d'étude important pour nombre de théoriciens en physique. Nous allons donner les principales familles de modèle et nous verrons les limites associées à chacune de ces approches.

Nous pouvons distinguer les 4 grandes familles de méthodes suivantes pour traiter le cas à N atomes (Ashcroft & Mermin, 2002) :

- **le calcul exact** : le problème se résout de manière analytique pour la molécule la plus simple ayant un seul électron : H_2^+ . Grâce aux ordinateurs, le calcul exact peut être réalisé pour une centaine d'électrons, c'est-à-dire pour une dizaine d'atomes au maximum.¹ Au-delà, le problème est parfaitement insoluble par le calcul exact.
- **les modèles *ab-initio*** (Blase, 2003) : Ces modèles se définissent comme des modèles purement théoriques sans aucun « *a priori* », c'est-à-dire sans faire intervenir des données expérimentales. On distingue les approches du champs moyen développé entre 1930 et 1990, dont les modèles les plus connus sont : approximation de Hartree-Fock, modèle de Thomas-Fermi, méthode de la DFT (Théorie de la fonctionnelle de la densité). Cette dernière a même donné lieu à l'attribution du Prix Nobel de Chimie à Walter Kohn en 1998. Ces méthodes consistent à réaliser le calcul pour 1 seul électron, en considérant que les autres électrons forment un potentiel moyen V . Dans ce cas, on peut réaliser le calcul pour des systèmes jusqu'à 1000 atomes avec un temps de calcul en N^3 . A partir des années 90, d'autres méthodes dites perturbatives à partir de la fonction de Green G^0 ont été mises en place pour gagner en précision, avec notamment l'approximation dite GW. Là encore, on peut calculer pour des systèmes jusqu'à 1000 atomes, mais ici avec un temps de calcul en N^4 .
- **les modèles semi-empiriques** : Ces méthodes combinent la théorie et certaines données expérimentales bien choisies afin de décrire au mieux les propriétés réelles des matériaux. La théorie dite « $k \cdot p$ » est la plus usitée et se base sur une méthode de calcul par perturbation corrigée par des données empiriques. En particulier, dans cette méthode, la masse des électrons est ici volontairement modifiée pour tenir compte du potentiel des atomes selon les directions au sein du cristal. Cette méthode semi-empirique est aujourd'hui intégrée dans des logiciels commerciaux (tel que « Nextnano ») facilement utilisables par des chercheurs non-experts de la modélisation.
- **La méthode des liaisons fortes** : cette méthode est basée sur une solution de la fonction d'onde correspondant à une combinaison linéaire des fonctions d'onde pour un niveau donné de tous les atomes du cristal. Généralement, l'approximation de Hückel est employée pour simplifier les calculs, c'est-à-dire que seules les interactions avec les atomes premiers voisins sont prises en compte. Cette méthode permet d'obtenir des calculs relativement précis pour décrire les niveaux de cœur pour les solides (notamment les niveaux s et p).

Le tableau 1 ci-dessous propose une synthèse pour chacune des 4 méthodes en spécifiant la taille du système calculé, la précision et le type d'utilisateur. On peut noter que les modèles semi-

¹ A titre d'exemple, pour $N=10$ électrons qui occupent un volume de 10 \AA^3 divisé en $10 \times 10 \times 10$ petits cubes, il y a environ $1000^N = 10^{30}$ configurations à calculer.

empiriques font aujourd'hui référence, car ils permettent de réaliser des calculs précis pour des solides tout en restant à portée de main d'un chercheur non-expert. Néanmoins, ces approches semi-empiriques ont des limites importantes, notamment pour les systèmes de petite taille. Dans ce cas, il faut utiliser des méthodes *ab-initio* qui sont particulièrement performantes pour des systèmes inférieurs à 1000 atomes. Par ailleurs, les approches du type liaisons fortes sont très bien adaptées aux atomes légers et sont importantes pour décrire une nouvelle classe de matériaux, appelé « matériaux 2D » correspondant à des systèmes bidimensionnels d'une épaisseur typique d'une couche atomique, tel que le graphène.

Méthodes	Calcul exact	Modèles ab-initio	Modèles empiriques	Modèle des Liaisons fortes
Système	10 atomes	1000 atomes	Solide	Solide
Précision	Exact	Précis avec certaines erreurs	Très précis	Très précis pour les niveaux de cœur (s et p)
Chercheur	Expert	Expert	Non-expert	Expert

Tableau 1 – Comparaison des 4 principales méthodes pour modéliser les diagrammes d'énergie et la structure de bande des électrons

2. L'enseignement de la modélisation des électrons dans la matière

Comme nous venons de le voir, la modélisation des électrons dans la matière est un problème difficile. Par conséquent, son enseignement qui intervient généralement en Licence (niveau Bac+3) est délicat, d'autant plus que d'autres facteurs viennent compliquer son apprentissage. Parmi ces facteurs, nous avons identifié plusieurs obstacles épistémologiques (Bachelard, 1938), ainsi que le contexte d'enseignement, qui est fortement dépendant de la formation suivie par les étudiants. Les obstacles épistémologiques et contexte d'enseignement, qui sont à la source des difficultés d'apprentissage de la Physique du Solide sont discutés ci-dessous.

2.A. Les obstacles épistémologiques

La mécanique quantique est réputée difficile à enseigner, car elle repose sur des concepts mathématiques et des principes nouveaux qui diffèrent complètement des fondements de la mécanique classique. Des conceptions erronées peuvent constituer des obstacles à une bonne compréhension de la mécanique quantique (Styer, 1995). De la même manière, les étudiants sont souvent désarçonnés en Physique du Solide, car le contenu est d'abord totalement nouveau, mais il est également en partie déstabilisant, car il remet en cause des connaissances profondément ancrées chez les étudiants. Après avoir enseigné cette matière pendant une dizaine d'années, nous avons justement identifié trois obstacles épistémologiques qui peuvent être à l'origine de conceptions erronées empêchant les étudiants de comprendre le contenu de la Physique du Solide :

- **Obstacle n°1, le modèle de l'atome isolé** : les étudiants sont totalement imprégnés du modèle de l'atome, où les électrons gravitent autour du noyau. Inconsciemment, ils considèrent que les électrons sont « attachés » à l'atome, et ne peuvent pas être partagés, voire encore moins être totalement mis en commun avec d'autres atomes. Ainsi, les solides sont simplement vus comme un assemblage d'atomes isolés, où chacun garde ses électrons. Cette vision naturelle

est en opposition totale avec le contenu de la physique du solide. Comment alors engager les étudiants dans cette physique nouvelle et complexe ? Comment remettre en question la description des électrons, alors qu'ils connaissent si bien le comportement des électrons pour l'atome isolé ? Quand l'atome n'est plus isolé, comment accepter que le modèle de l'atome soit complètement à revoir, après avoir passé tant d'année et avoir fait tant d'efforts à le construire ?

- **Obstacle n°2, le vecteur d'onde k** : la dualité onde-corpuscule est bien connue pour la lumière, notamment en considérant la lumière comme une onde électromagnétique ou un photon. Par contre, ce concept est difficilement concevable pour un électron, alors qu'il s'agit d'une propriété commune à toutes les particules en physique quantique (principe de De Broglie). Par conséquent, les électrons se définissent comme des ondes avec, comme c'est le cas de toute onde, un vecteur définissant la direction de propagation, appelé vecteur d'onde k . C'est une vision totalement nouvelle de l'électron, mais qui est essentielle pour comprendre la physique du solide, puisque les bandes d'énergie vont dépendre directement de la direction de propagation des électrons dans le cristal, c'est-à-dire vont dépendre du vecteur d'onde k .
- **Obstacle n°3, le remplissage des niveaux d'énergie en 3D** : dans une approche classique de l'atome isolé, on définit des niveaux quantifiés d'énergie pour ensuite les remplir par deux électrons en commençant par le niveau le plus bas en énergie, à l'image des barreaux d'une échelle que l'on grimpe. Dans le cas d'un cristal, il y a des atomes dans les 3 dimensions de l'espace, et donc, on définit des niveaux quantifiés d'énergie aussi suivant les 3 dimensions de l'espace pour ensuite les remplir en commençant par le niveau de plus faible énergie correspondant à l'origine, à l'image d'une sphère dans l'espace qui augmente son diamètre. C'est un changement de dimension difficile à appréhender, car dans ce cas, nous avons besoin d'un espace à 4 dimensions, les 3 dimensions de l'espace réciproque pour positionner les niveaux quantifiés d'énergie, et une autre dimension pour indiquer la valeur en énergie. Dans ce cas, on préfère travailler avec des surfaces en iso-énergie, où on relie l'ensemble des niveaux quantifiés qui ont la même énergie.

Ces trois obstacles épistémologiques sont des freins importants qui empêchent les étudiants de donner du sens et donc un intérêt à la physique de solide. Il faut donc bien prendre en compte ces trois obstacles épistémologiques pour démarrer l'enseignement de la Physique du Solide et proposer des activités qui montrent la nécessité et l'importance de ces trois nouveaux concepts.

2.B. Les 3 manières d'enseigner la physique du solide

L'enseignement de la Physique du Solide va dépendre du contexte d'enseignement en lien avec le type de formation suivie par les étudiants. La façon d'aborder la matière, les modèles utilisés, les résultats à retenir ne seront pas les mêmes suivant le contexte de formation ou le profil de l'enseignant. Nous avons identifié les trois approches suivantes pour l'enseignement de la Physique du Solide :

- **Approche du « Chimiste »** : la Physique du Solide est principalement traitée en appliquant une combinaison linéaire des orbitales atomiques en augmentant progressivement le nombre d'atomes considérés (modèle des liaisons fortes), comme cela est fait pour la construction des molécules.

- **Approche du « Physicien »** : la Physique du Solide est ici traitée du point de vue d'un très grand ensemble d'électrons, libres de se déplacer dans une boîte en tenant compte de l'interaction avec des atomes seulement dans des cas spécifiques de valeur de k (modèle des électrons quasi-libres) ou en considérant des barrières de potentiel rectangulaires et périodiques pour le réseau cristallin (modèle de Kronig-Penney).
- **Approche du « Théoricien »** : la Physique du Solide est traitée de manière formelle et mathématique en partant d'abord du système le plus simple H_2^+ (calcul exact), en développant les modèles *ab-initio* valides pour des systèmes d'environ 1000 atomes (Hartree-Fock, DFT, etc.) et en finissant sur les modèles semi-empiriques qui s'appliquent à un très grand nombre d'atomes, notamment aux solides (modèle k -p, modèle de Kane, etc.). Pour chaque modèle, l'équation de Schrödinger est calculée en utilisant un nouvel opérateur hamiltonien.

Chaque approche donne une vision différente de la Physique du Solide et présente, pour chacune d'elles des avantages et des inconvénients, comme cela est décrit dans le Tableau 2 ci-dessous.

	Chimistes	Physiciens	Théoriciens
Avantages	<ul style="list-style-type: none"> - Lien entre orbitales atomiques et bandes - Approche graduelle de 2 à N atomes 	<ul style="list-style-type: none"> - Explique l'origine physique de la bande interdite - Importance du vecteur d'onde k 	<ul style="list-style-type: none"> - Complétude des modèles - Grande précision
Inconvénients	<ul style="list-style-type: none"> - Pas besoin d'introduire le vecteur d'onde k 	<ul style="list-style-type: none"> - Pas de lien entre les orbitales atomiques et les bandes - Précision faible 	<ul style="list-style-type: none"> - Modèles difficiles d'accès aux étudiants

Tableau 2 – Comparaison des approches disciplinaires pour enseigner la Physique du Solide

L'approche du Chimiste a l'avantage de faire le lien entre les orbitales atomiques de l'atome isolé et les bandes en augmentant graduellement le nombre d'atomes en interaction. Cependant, le vecteur d'onde k n'est souvent pas considéré. *A contrario*, l'approche du Physicien est centrée sur k , où la formation des bandes interdites est décrite pour des valeurs de k particulières correspondant aux frontières des zones de Brillouin, où l'influence des atomes du réseau est maximale. Cette approche permet de comprendre l'origine des bandes interdites. Néanmoins, la structure de bande est construite sans aucun lien avec les orbitales atomiques et ces modèles sont bien souvent trop simplistes. A l'inverse, l'approche du Théoricien construit des modèles de plus en plus précis, mais sous une forme mathématique souvent déconnectée des phénomènes physiques mis en jeu, qui reste difficile d'accès aux étudiants. Au final, quelle que soit l'approche choisie, il faut reconnaître que chacune de ces approches donne une vision incomplète de la Physique du Solide.

3. Notre approche didactique et pédagogique

Dans ce contexte, nous nous sommes posé la question de comment enseigner la Physique du Solide pour la rendre accessible en tenant compte des obstacles épistémologiques et en décloisonnant les différentes approches pour donner une vision plus complète de cette discipline. Pour y répondre, nous

avons fait des choix à la fois didactique, pédagogique et méthodologique, détaillés ci-dessous. Pour bien préciser le contexte, cet enseignement s'adresse à un public d'étudiants de L3 en école d'ingénieur (filiale Matériaux) qui découvre la Physique du Solide et qui n'a pas vocation à devenir expert du domaine. Pour suivre cet enseignement, les étudiants doivent avoir un certain nombre de prérequis. Ces étudiants ont préalablement suivi un enseignement de Chimie Quantique qui a permis de donner les bases de la physique quantique et de la physique de l'atome correspondant aux notions exposées dans la partie 1.A. Par ailleurs, les étudiants doivent s'appuyer sur un ensemble de connaissances mathématiques de niveau L3 qui devront être maîtrisées : le calcul matriciel, les formules d'Euler en trigonométrie, les calculs avec des nombres complexes, les séries de Fourier, le calcul intégral, les suites récurrentes et les séries.

3.A. Notre choix didactique : une approche graduelle de 2 jusqu'à 10^{22} atomes

Au lieu de partir d'emblée sur un très grand nombre d'atomes pour introduire la Physique du Solide, nous avons fait le choix d'une approche graduelle en proposant de résoudre des problèmes ciblés en partant de 2 atomes pour aller progressivement vers un nombre infiniment grand d'atomes.

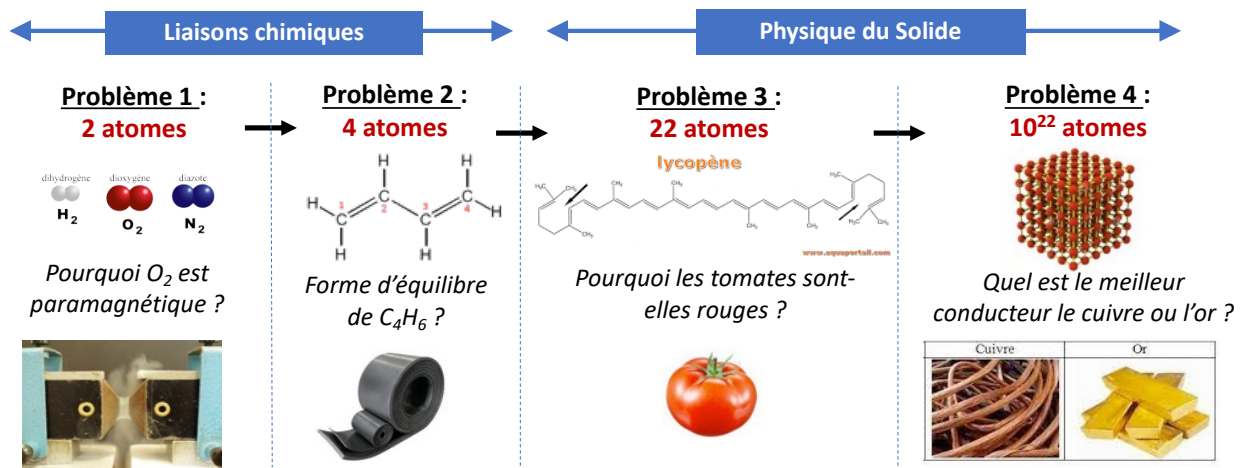


Figure 3 – Description des 4 problèmes que nous proposons pour une approche graduelle du nombre d'atomes en interaction correspondant à la fusion des cours « Liaisons chimiques » (problèmes n°1 et n°2) et « Physique du Solide » (problèmes n°3 et n°4).

La Figure 3 illustre bien le caractère graduel en partant de molécules diatomiques avec seulement 2 atomes (problème n°1) pour ensuite augmenter le nombre d'atomes en interaction : d'abord 4 atomes avec la molécule de butadiène (problème n°2), puis 22 avec le lycopène, et 10 millions avec le polybutadiène (problème n°3) pour enfin finir sur le cristal avec 10^{22} at./cm³ (problème n°4). Ce choix a été possible en fusionnant le cours de chimie « Liaison chimique » expliquant la formation des molécules et le cours de Physique « Physique du Solide ». Nous pensons que cette approche progressive 2, 4, 22, 10^7 et 10^{22} est essentielle pour sortir de la vision de l'atome isolé (obstacle n°1) et pour donner du sens et de l'intérêt à la Physique du Solide. En augmentant le nombre d'atomes à 10^{22} au problème n°4, nous introduisons un autre concept-clé qui est la distribution des atomes dans les 3 dimensions de l'espace pour former un cristal. Ce point permet de travailler l'obstacle n°3,

puisque nous allons obtenir par construction des niveaux d'énergie dans les 3 dimensions de l'espace. Ainsi, l'approche graduelle en partant du « petit » pour aller vers « l'infiniment grand » permet justement de montrer que le formalisme établi pour quelques atomes devient inutilisable face aux très grands nombres, et *in fine* de comprendre la nécessité d'introduire de nouveaux concepts pour opérer ce changement d'échelle, ce qui est l'essence même de la Physique du Solide.

Ce choix graduel s'apparente à l'approche du « Chimiste », mais nous avons fait l'effort d'introduire également l'approche du « Physicien » en ciblant l'importance du vecteur d'onde k et en proposant d'autres modèles que celui des liaisons fortes (problèmes n°3 et 4), pour justement palier l'obstacle épistémologique n°2. A la fin de la séquence, les modèles du chimiste et du physicien sont comparés et discutés pour faire émerger le modèle semi-empirique $k.p$ du théoricien. Par conséquent, au-delà de l'approche graduelle avec le nombre d'atomes, il y a également une autre approche graduelle « chimiste-physicien-théoricien » qui évite de rester exclusivement dans la vision du chimiste choisie au départ de la séquence. Ce choix didactique qui intègre à la fois une vision graduelle du nombre d'atomes et une vision graduelle disciplinaire est un élément essentiel pour lutter contre les obstacles épistémologiques mentionnés précédemment dans la partie 2.A. et pour donner du sens et une vision complète.

3.B. Notre choix pédagogique : Apprentissage Par Problème (APP)

Afin de renforcer la motivation (Galand *et al.*, 2005) pour ce cours théorique et favoriser les apprentissages de ces notions difficiles, nous avons fait le choix de mettre en œuvre une pédagogie active, appelée Approche Par Problème (APP), où l'apprentissage est basé sur la résolution collective d'un problème (Bédard & Raucent, 2015). L'APP est bien connue pour favoriser l'apprentissage sur le long terme et pour améliorer la pensée réflexive et critique (Yew & Goh, 2016). Une étude indonésienne a montré que la mise en place d'un APP dans un cours d'introduction à Physique du solide avait justement renforcé l'esprit critique des étudiants (Liu & Doa, 2023). Ce type de pédagogie en APP s'est particulièrement développé dans les formations d'ingénieurs (Bédard *et al.*, 2010 ; Raucent *et al.*, 2004). L'APP est ici proposée pour obliger les étudiants à affronter la difficulté et à les engager dans les nouveaux modèles et leurs résolutions mathématiques. Les étudiants doivent résoudre les problèmes en ayant accès à des ressources bien spécifiques et en devant franchir les étapes prédéfinies. Même s'ils ont une certaine liberté d'action, les étudiants sont guidés dans leur démarche de résolution. L'organisation standard d'un APP suit un séquençage précis pour favoriser l'implication et l'apprentissage de tous les étudiants : 1) la séance « Aller » en groupe pour découvrir le problème, 2) le « travail personnel » où l'étudiant essaie de résoudre le problème par lui-même en s'appuyant sur des ressources, et 3) la séance « Retour » où une solution est construite collectivement (Raucent & Milgrom, 2013). L'ensemble de la démarche est guidé par l'enseignant qui joue un rôle de tuteur. En se basant sur cette organisation, nous avons construit un séquençage pour notre APP autour de 2 défis à résoudre, comme le montre la Figure 4.

Le 1^{er} défi est axé sur la découverte d'un nouveau concept, alors que le 2^e défi est centré sur la résolution mathématique de l'équation de Schrödinger à l'origine du concept. Ce choix repose sur la double volonté de savoir décrire un nouveau concept avec les mains, mais aussi de manière mathématique pour en comprendre son origine *via* la physique quantique. Chaque défi est réalisé sur une séance de 3h30, qui intègre la séance aller (30 min), le travail personnel (1h30) et la séance retour

(1h30). La séquence se termine par une séance de clôture de 2h durant laquelle l'enseignant fait un bilan des défis (30 min), rappelle les points essentiels du cours (30 min) et corrige des exercices-clés (1h). La séquence APP se termine par un test individuel de 30 min pour vérifier les apprentissages de chaque étudiant avant de passer à la nouvelle séquence de l'APP suivant. Une séquence APP dure au total 9h30. Avec 4 séquences APP, nous avons fait le choix en passant à l'APP de garder le même nombre d'heure que celui que nous avons précédemment en mode standard cours/TD (5x cours magistraux de 2h et 4x TD de 2h pour chacun des 2 enseignements, ce qui correspond à un total de 36h). Ainsi, le même contenu est enseigné dans une durée quasiment identique.

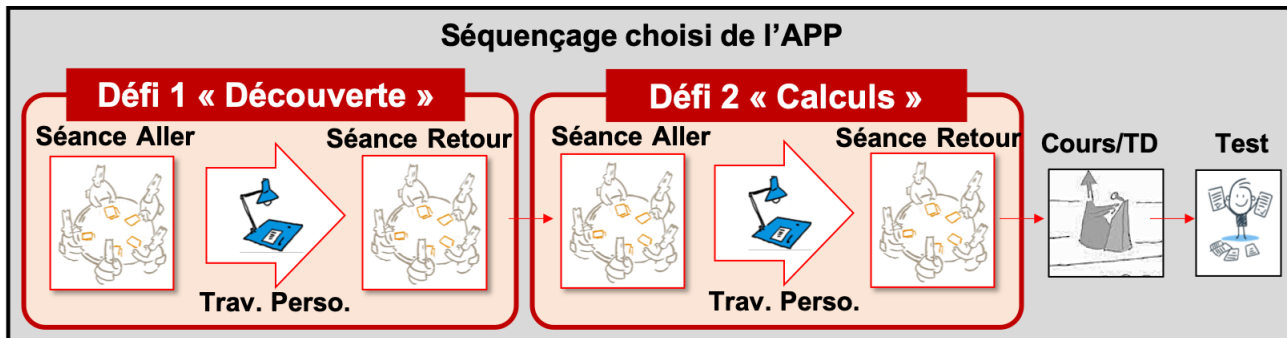


Figure 4 – Description d'une séquence APP qui intègre un 1^{er} défi de découverte, un 2^e défi pour réaliser les calculs, suivi d'une séance de clôture et d'un test individuel.

Comme le montre la Figure 5, pour ce dispositif APP, les groupes sont constitués de 6 étudiants, où chacun a des rôles attribués à chaque défi (animateur, maître du temps, scribes, relecteur). La solution collective est réalisée sous la forme d'un tableau recto-verso à réaliser pendant la séance « Retour » en 1h30 (voir Fig. 5). Ce tableau doit présenter la solution de manière détaillée et pédagogique. Ce dispositif permet donc, au-delà de l'apprentissage de la Physique, de développer des compétences transversales, notamment savoir travailler en groupe de manière coopérative, savoir rechercher des informations pertinentes, développer l'autonomie et la prise d'initiative, renforcer la capacité à faire des choix et savoir gérer le temps et les échéances. Notamment, le rendu sous la forme d'un tableau encourage l'ensemble des étudiants à s'impliquer dans la construction du tableau, même les étudiants les plus timides ou les plus réticents à participer.

Ce dispositif APP est le fruit de trois années de fonctionnement, où nous avons identifié des solutions pratiques qui ont permis d'améliorer concrètement le dispositif :

- Inclure le travail personnel en séance : cela permet à tous les étudiants de réaliser correctement le travail personnel, alors que si ce travail est donné à faire à la maison, il sera fait par moins de 30 % des étudiants
- Produire une solution collective sur la forme de tableau à prendre en photo et à transmettre à l'enseignant, plutôt que faire un compte-rendu sous forme papier. Le rendu au tableau favorise le travail d'équipe et la mise en commun du travail et des idées, alors que le rendu papier est souvent réalisé par un ou deux étudiants du groupe.

- Mettre en place une séance de clôture pour faire le bilan des tableaux rendus par les étudiants, avec synthèse du cours et temps d'exercisation ciblé pour préparer les étudiants à l'examen terminal.

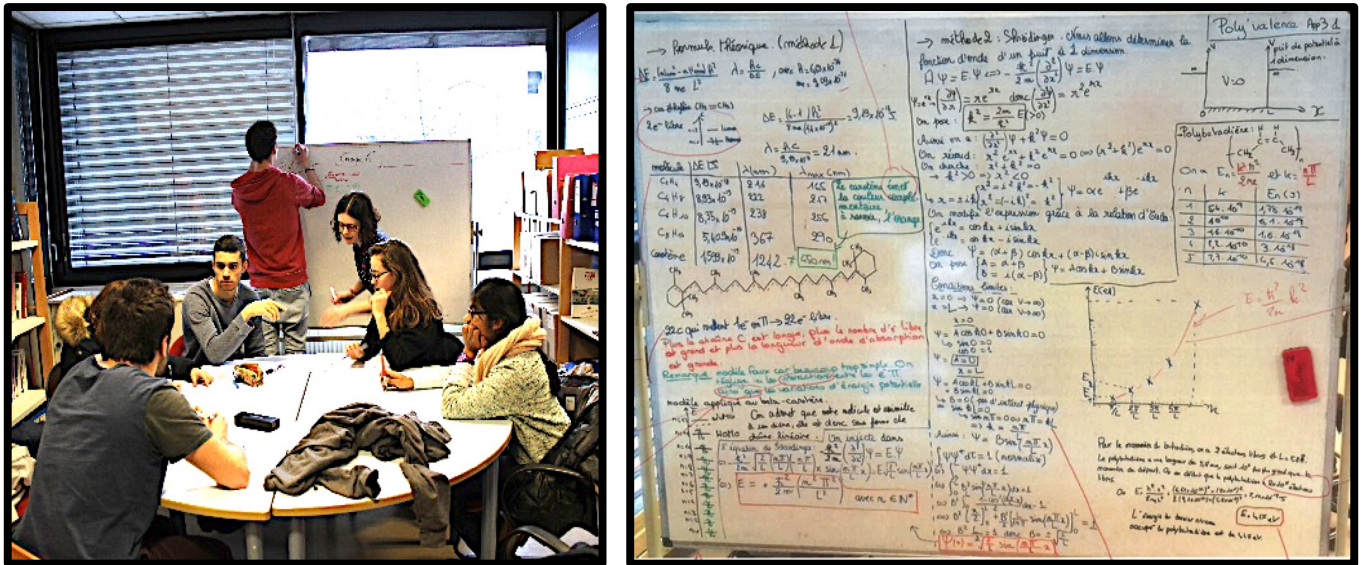


Figure 5 – Organisation de l'APP où les étudiants par groupe de 6 doivent résoudre le problème sous la forme d'un tableau noté.

3.C. Notre choix méthodologique : d'un modèle à l'autre

Au cours de cet enseignement, nous avons fait le choix de passer d'un modèle à l'autre en partant de la résolution exacte de l'équation de Schrödinger seulement possible pour la molécule H_2^+ mettant en jeu un seul électron, jusqu'au modèle semi-empirique considérant une « mer » d'électrons et le concept de la masse effective utilisés en Physique du solide. Pour cela, comme le montre la Figure 6, plusieurs modèles sont étudiés les uns après les autres, du plus simple au plus complexe. Le principe est de mettre en œuvre un nouveau modèle qui va permettre de correctement décrire le système étudié. Une fois que ce modèle a permis de résoudre le problème proposé et qu'il a été bien intégré par les étudiants, on montre alors aux étudiants les limites de ce modèle et les étudiants prennent conscience qu'il devient inadapté pour traiter le nouveau problème. Et ainsi de suite. C'est ainsi que les étudiants vont aborder jusqu'à 9 modèles différents de modélisations des électrons, en partant des modèles pour décrire la formation des molécules pour aller vers la physique des solides selon le processus décrit à la Figure 6 (McQuarrie & Simon, 2000; Kittel, 2007).

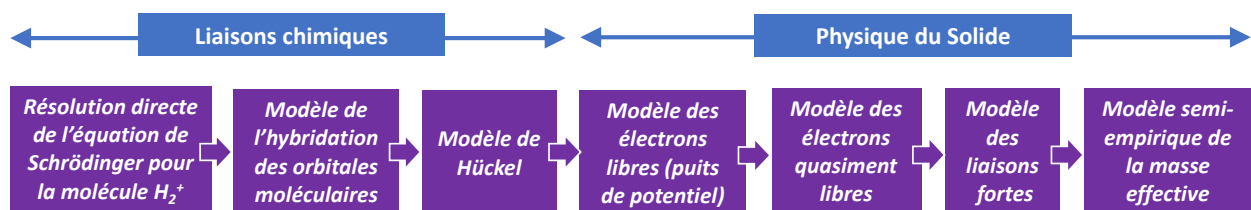


Figure 6 – Liste des modèles étudiés sur l'ensemble des séquences qui intègre le cours de « Liaisons chimiques » et le cours de « Physique du Solide ».

4. Bilan et discussion sur la modélisation

Nous dressons ici un rapide bilan des apprentissages suite à 3 années d'expérimentation et, à partir de cette expérience, nous proposons une liste des activités possibles pour initier les étudiants à la modélisation en Physique.

4.A. Analyse du dispositif

L'analyse du dispositif a fait l'objet d'une précédente publication en se basant sur le taux de satisfaction des étudiants et sur l'évolution des notes de l'examen terminal (Darie & Durand, 2021). Ainsi, après 3 ans d'expérimentation et d'amélioration du dispositif pédagogique, 85% des étudiants se déclarent satisfaits (dont 30% de « Très satisfaits »), avec une note moyenne de 5,1 sur une échelle de 6 à 1 pour un taux de réponse de 90%.

L'analyse de l'évolution des résultats à l'examen final s'est fondée sur les notes recueillies en Liaison Chimique et en Physique du Solide, issues de deux années d'enseignement en mode traditionnel cours/TD et de trois années en mode APP (avec les mêmes enseignants,) représentant un total d'environ 400 notes distinctes. En comparaison avec une approche standard du type cours/TD, nous avons observé en mode APP une amélioration des résultats à l'examen terminal (+0,9 sur la moyenne) et une répartition différente des notes avec notamment une diminution de moitié du nombre d'étudiants ayant une note inférieure à 10/20 (de 34 à 17%) et une augmentation significative d'étudiants ayant des notes supérieures ou égales à 18/20 (de 1 à 8%) (Darie & Durand, 2021). Ce travail se distingue d'une autre étude menée en Inde, où aucune amélioration des résultats n'a été observée en Physique du Solide en comparant une approche classique et la mise en place d'une pédagogie active intégrant un travail collaboratif (Sai Preeti & Vijayanandini, 2019). Il est important de mentionner qu'une meilleure réussite à l'examen ne permet pas de mesurer le changement de modes de raisonnement et de savoir si les obstacles épistémologiques ont pu être réellement surmontés sur une majorité d'étudiants. Une perspective intéressante de ce travail serait de mettre en place une étude spécifique avec un groupe témoin pour voir si de réels changements de ces deux aspects sont effectivement observés chez les étudiants.

4.B. Travail sur la notion de modèle en physique

Ce dispositif autour de la modélisation des électrons dans les molécules et des solides est un système particulièrement bien adapté pour initier les étudiants à la notion de modèle physique. La validité des modèles est au cœur de ce dispositif et permet d'ouvrir des questions fondamentales, comme « un modèle décrit-il la réalité ? », « Quelles sont les limites d'un modèle ? », « Quand doit-on changer de modèle ? ».

Notre dispositif permet d'aborder trois éléments importants autour de la modélisation en physique :

- **Lien d'un modèle avec le réel** : l'étudiant prend conscience qu'un modèle peut ne pas décrire le réel. En physique, certains modèles sont parfaitement prédictifs sans pour autant correspondre au réel. Ici, le modèle de la masse effective en est un exemple emblématique, où la masse de l'électron est modifiée en conscience pour tenir compte des interactions avec les atomes du réseau cristallin. Ce modèle à masse variable pour « coller » au mieux à la réalité

complexe est appliqué dans les modèles semi-empiriques du type **k.p**, connus pour être performants, alors que cette astuce mathématique ne correspond à aucune réalité physique. La modification de la masse de l'électron est un exemple du concept plus général de « Quasi-particule » utilisé en physique de la matière condensée. L'interaction entre deux entités est parfois plus facile à décrire en créant une nouvelle particule (appelé « quasi-particule ») qui n'a pas de réalité physique. On peut citer à titre d'exemple de quasi-particules : les trous, les phonons, les excitons, les polaritons, etc. (Ashroft & Mermin, 2002). Ce point questionne l'équilibre entre la simplicité d'un modèle et la complexité de la réalité physique.

- **Limites d'un modèle** : la construction d'un modèle se base sur des hypothèses simplificatrices qui limitent la portée du modèle utilisé. Une manière de tester la validité d'un modèle est de l'appliquer dans des situations extrêmes pour pouvoir en définir les limites. Ce principe est appliqué à plusieurs reprises dans le dispositif APP, comme par exemple le modèle de l'électron libre qui fonctionne parfaitement pour des molécules de quelques dizaines d'atomes, mais devient faux en augmentant le nombre d'atomes sur une chaîne polymère à cause des interactions coulombiennes entre électrons qui ne sont plus négligeables. Ce point oblige les étudiants à être conscient des limites des modèles.
- **La complexité d'un modèle** : on construit des modèles les plus simples possibles et on les complexifie quand cela est nécessaire pour les rendre les plus prédictifs possibles. Ainsi, il y a cette tendance de partir des modèles les plus simples et de rajouter progressivement de la complexité, seulement quand cela est nécessaire. Cependant, cette approche rationnelle a ses limites, notamment pour aborder des systèmes très complexes. Dans certains cas, le développement de modèles de manière incrémentale n'est plus possible, ce qui nécessite de développer de nouveaux modèles, en rupture avec les précédents. Par exemple, en passant de la molécule au solide, le modèle évolue en considérant une « mer » d'électrons au lieu de quelques électrons. Ce changement de paradigme mène à des modèles totalement différents. Les étudiants doivent être capable de choisir le bon modèle avec le bon niveau de complexité selon le système étudié.

4.C. Activités d'apprentissage pour initier à la modélisation

Au cours des mises en situation APP, nous avons eu recours à différentes activités pour engager les étudiants à comprendre un nouveau modèle. La Figure 7 résume ces différentes activités de la plus simple à la plus complexe à réaliser pour les étudiants :

- **Appliquer un modèle connu** : les étudiants mettent en œuvre un modèle qu'ils connaissent déjà.
- **Comprendre et détailler** : les étudiants lisent une démonstration d'un modèle et ils doivent apporter des commentaires qui expliquent toutes les étapes et la démarche suivie.
- **Transposer** : les étudiants lisent et essaient de comprendre un modèle appliqué à un système donné. Ensuite, ils doivent appliquer ce modèle à un autre système, ce qui implique certains changements du modèle initial. Cela implique de bien comprendre le modèle initial pour pouvoir ensuite le transposer de manière pertinente à un système différent.

- **Comparer** : les étudiants doivent mettre en œuvre deux modèles, pour ensuite les comparer afin de déterminer quel modèle est le mieux adaptée pour décrire un système donné.
- **Trouver les limites du modèle** : les étudiants doivent regarder comment le modèle se comporte dans des conditions extrêmes pour déterminer les limites et le domaine de validité du modèle
- **Comprendre et trouver l'erreur** : les étudiants lisent de manière approfondie la description d'un modèle et ont pour mission de trouver des erreurs volontairement incluses dans la démonstration.
- **Comprendre et compléter** : les étudiants lisent de manière approfondie la description d'un modèle où certaines parties sont manquantes qu'ils doivent alors compléter.
- **Concevoir le modèle *ex-nihilo*** : les étudiants doivent créer un modèle par eux-mêmes à partir de leur observation et de leurs connaissances en étant plus ou moins guidés.

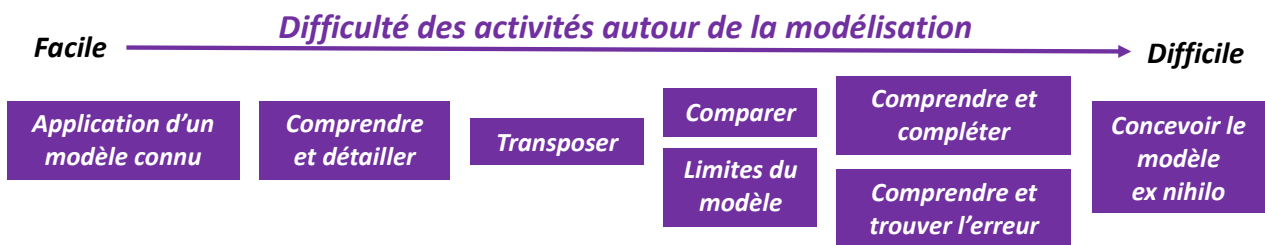


Figure 7 – Exemples d'activités selon le degré de difficulté pour initier à la modélisation

4.D. Pistes pour initier les étudiants à la modélisation

Il faut bien avoir conscience que les activités autour de la modélisation en physique sont des tâches d'apprentissage complexes pour les étudiants. Il convient pour l'enseignant de bien préparer en amont ce type d'activité pour trouver la formule pédagogique qui engage les étudiants dans l'activité de modélisation. Nous préconisons de privilégier les approches suivantes pour mettre en œuvre des activités autour de la modélisation :

- Réaliser une approche graduelle de type « marche d'escalier » permettant d'accéder à la complexité
- Favoriser le travail en groupe qui est plus motivant pour affronter cette complexité
- Encourager l'usage d'un tableau qui est un support idéal pour partager les idées, les calculs et pratiquer l'essai-erreur
- Donner des jalons et des ressources pour accompagner la mise en œuvre de la démarche de modélisation
- Encourager les étudiants à avoir confiance en eux et valoriser leur travail. Comme les étudiants ont tendance à chercher des solutions de facilité, c'est important de valoriser l'effort et le plaisir de la découverte par la modélisation.

Christophe Durand

Polytech Grenoble, Université Grenoble Alpes, Grenoble-INP, Laboratoire PHELIQS/CEA-Grenoble

17 Avenue des Martyrs, 38000 Grenoble

e-mail: christophe.durand@univ-grenoble-alpes.fr

Céline Darie

Polytech Grenoble, Université Grenoble Alpes, Grenoble-INP, Institut Néel/CNRS

25 Avenue des Martyrs, 38000 Grenoble

e-mail: celine.darie@univ-grenoble-alpes.fr

Références

Ashcroft, N. W., Mermin, N. D. (2002). *Physique des Solides*. Les Ulis : Edition EDP Sciences

Bachelard, G. (1938). *La formation de l'esprit scientifique : contribution à une psychanalyse de la connaissance objective*. Paris: Vrin

Bédard, D., Lison, C., Dalle, D., & Boutin, N. (2010). Predictors of student's engagement and persistence in an innovative PBL curriculum: Applications for engineering education. *International journal of engineering education*, 26(3), 511-522.

Bédard, D., & Raucent, B. (2015). Les innovations pédagogiques en enseignement supérieur : pédagogies actives en présentiel et à distance. *Revue internationale de pédagogie de l'enseignement supérieur*, 31(31 (1)).

Blase, X., (2003). Les calculs ab initio en physique du solide. *Images de la Physique*, pp. 11-16.

Darie, C., & Durand, C. (2021). Fusion d'un cours de chimie et de physique par l'apprentissage par problèmes (APP) : mise en place, améliorations et incidences chez les étudiants. *Les Annales de QPES*, 1(3).

Galand, B., Bourgeois, É. et Frenay, M. (2005). The impact of a PBL curriculum on students' motivation and self-regulation. *Les Cah. Rech. du GIRSEF*, 37, pp. 1-16.

Kittel, C. (2007). *Physique de l'état solide*. Paris: Édition Dunod

Liu, A., & Doa, H. (2023). The influence of problem-based learning models on the critical thinking ability of physics students at the university of flores. *Jurnal Pendidikan Fisika*, 11(2), pp. 198-205

McQuarrie, D.A. & Simon, J.D. (2000). *Chimie physique – approche moléculaire*. Paris : Édition Dunod

Raucent, B. & Milgrom, É. (2013). Guide pratique pour une pédagogie active : les apprentissages par problèmes et par projets. INSA Toulouse et École Polytechnique de Louvain.

Raucent, B., Braibant, J., DeTheux, M.-N., Jacqmot, C., Milgrom, É., VanderBorghet, C. & Wouters, P. (2004). Devenir ingénieur par apprentissage actif : compte rendu d'innovation. *Didaskalia*, 24, pp. 1-19.

-
- Sai Preeti, G. & Vijayanandini, K., 2019. Implementing Inquiry Based Collaborative Learning in Solid State Physics Course, IEEE Tenth International Conference on Technology for Education (T4E), pp. 250-251
- Styer, D.F. (1995), Common misconception regarding quantum mechanics. *Am. J. Phys.* 64 (1), pp. 31-34
- Yew, E.H.J. & Goh, K. (2016). Problem-Based Learning: An Overview of its Process and Impact on Learning. *Health Professions Education*, 2, pp. 75–79