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-04145132

HAL Id: hal-04145132

https://hal.science/hal-04145132

Preprint submitted on 28 Jun 2023

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 Attribution - NonCommercial - ShareAlike 4.0 International License

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

Christophe Durand & Céline Darie

Abstract. Since electrons determine 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 range 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. Firstly, an epistemological choice by introducing a gradual approach starting from 2 atoms up to 10^{24}. 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. Secondly, a pedagogical choice using Problem-Based Learning (PBL). Thirdly, a methodological choice by moving from one model to another that is more complex, but more realistic. This gradual approach "from one model to another" allows us to reflect on the notion of models, their links with reality and their limits. This experience is an opportunity to think about more generally on model learning in physics, and to suggest ways of involving students in modeling activities.

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

Résumé. Comme les électrons sont à l'origine les 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^{24} 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, du 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.

Table des matières

1. Comment modéliser les électrons dans la matière ? ... 2
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 ... 5
2. L'enseignement de la modélisation des électrons dans la matière ... 6
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 ... 9
3.B. Notre choix pédagogique : Apprentissage Par Problème (APP) ... 10
3.C. Notre choix méthodologique : d'un modèle à l'autre ... 12
4. Bilan et discussion sur la modélisation ... 12
4.A. Analyse du dispositif ... 12
4.B. Travail sur la notion de modèle en physique ... 13
4.C. Activités d'apprentissage pour initier à la modélisation ... 14
4.D. Pistes pour initier les étudiants à la modélisation ... 14
Références ... 15

La physique du solide est une matière essetielle 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 (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'il s'agit d'une matière particulièrement difficile à transmettre. 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 complexes qui décrivent les comportements des électrons dans la matière ?

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 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^{24} atomes/cm^3). 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 ce fameux problème des électrons dans la matière.

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 un 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 décrit de manière simple 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…). 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 ».

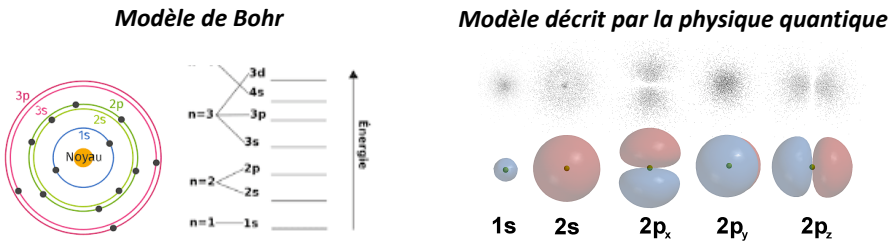

Figure 1 – Représentation de la répartition des électrons dans un atome selon le modèle de Bohr et le modèle obtenu par application de la physique quantique

La découverte 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** : 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
- **Incertitude d'Heisenberg** : Les électron sont soumis à ce principe d'incertitude, qui impose de ne pas savoir avec certitude la position exacte des électrons. On définit alors la probabilité de présence des électrons.

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 la représentation des niveaux d'énergie sont alors décrits comme des nuages électroniques correspondant à la probabilité 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…). Quand on passe à 2 atomes, chacun des niveaux se dédouble et l'ensemble des électrons des 2 atomes se répartissent 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 crées. Cette mise en commun des électrons est à l'origine des liaisons chimiques entre les atomes pour former les molécules et les solides.

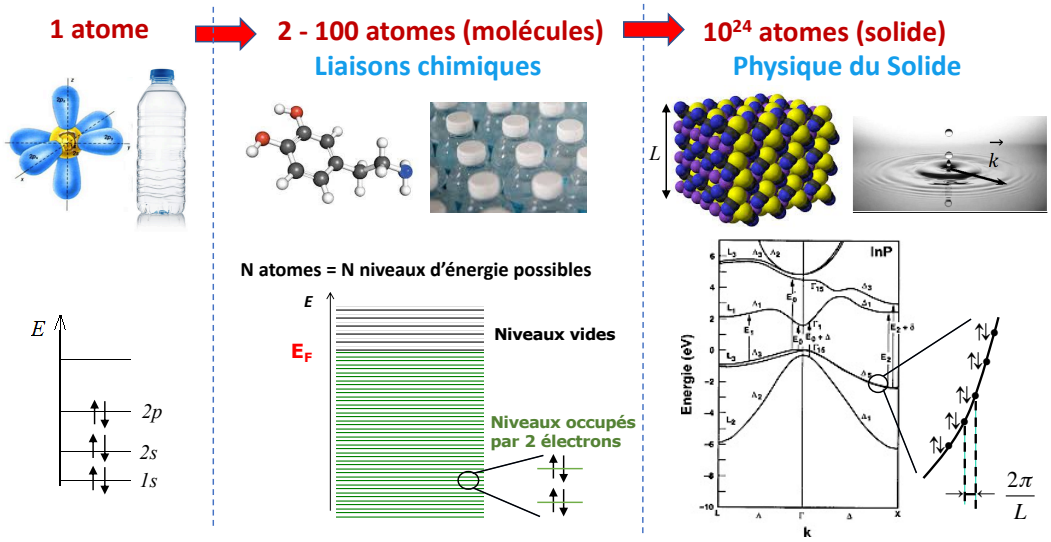

Figure 2 – Evolution du diagramme d'énergie des électrons en fonction du nombre d'atomes.

Dans le cas des solides où un très grand nombre d'atomes est à considérer (typiquement 10^{24} at./cm^3), le nombre de niveau d'énergie et le nombre d'électrons à répartir sont gigantesques. Comme l'écart entre les niveaux d'énergie est donné par $2\pi/L$, où L est la dimension du cristal, plus le cristal sera grand et plus l'écart entre niveau d'énergie sera petit, voire insignifiant, pour former *in fine* des bandes d'énergie larges occupées par des électrons, comme le montre la Figure 2. Dans le cas particulier d'une organisation spatiale des atomes formant des cristaux, comme c'est le cas dans les solides, le nombre d'atomes 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 des électrons (appelé vecteur d'onde k des électrons). Ainsi, on va décrire le

diagramme d'énergie pour différentes directions privilégiées du cristal. Ces directions sont désignées par des lettres caractéristiques définissant des directions connues (à titre d'exemple, la direction ΓX, correspond à l'axe x) (Kittel, C., 2007).

Comme illustré dans la Figure 2, si on prend l'image de l'eau pour les électrons, l'atome isolé correspond à une seule petite bouteille d'eau, la molécule à un ensemble de petites bouteilles qui s'auto-organisent et le solide devient une *mer* tellement le nombre à considérer est grand (le Physicien parle alors de *mer de Fermi*). Dans ce cas spécifique, il n'y a plus de raison de considérer un ensemble de petites 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 les niveaux d'énergie et les électrons sont mis en commun et augmentent drastiquement dans le cas d'un cristal, 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 résolution et nous verrons les limites associées à chacune de ces approches.

Nous pouvons distinguer les 4 grandes familles de méthodes suivantes pour résoudre le problème à N atomes (Aschroft N.W., Mermin N.D., 2002):

- **le calcul exact** : le problème se résoud de manière analytique pour la molécule la plus simple ayant un seul électron : H_2^+. Grace aux ordinateurs, le calcul exact peut être réalisé pour une centaine d'électrons, c'est-à-dire pour une dizaine d'atome maximum.[1] Au-delà, le problème est parfaitement insoluble par le calcul exact.
- **les modèles *ab-initio*** (Blase. X., 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, avec notamment

[1] A titre d'exemple, pour N=10 électrons qui occupent un volume de 10 $Å^3$ divisé en 10x10x10 petits cubes, il y a *grosso modo* $1000^N = 10^{30}$ configurations à calculer.

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 de l'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 1er 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-empiriques font aujourd'hui références, car ils permettent de réaliser des calculs précis pour des solides tout en restant à porter de main d'un chercheur lambda. Néanmoins, ces approches semi-empiriques ont des limites importantes, notamment pour les systèmes de petites tailles. 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 importants 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	Très précis	Assez précis	Très précis	Précis
Utilisateur	Chercheur-expert	Chercheur-expert	Chercheur λ	Chercheur-expert

Tableau 1 – Comparaison des 4 grandes méthodes pour modéliser les diagrammes d'énergie et structure de bande des électrons en Chimie et Physique du solide

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, G. 1938), aussi que le contexte d'enseignement, qui est fortement dépendante de la formation suivie par les étudiants. Ces deux éléments sont à la source des difficultés d'apprentissage de la Physique du Solide.

2.A. Les obstacles épistémologiques

Les étudiants sont souvent désarçonnés devant cet enseignement, 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. Nous avons justement identifié les 3 obstacles épistémologiques suivants :

- **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'effort à le construire ?
- **le vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$** : la dualité onde-corpuscule est bien connue pour la lumière. 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 $\boldsymbol{k}$. C'est une vision totalement nouvelle de l'électron, mais qui est essentielle pour comprendre la physique du solide, puisque les bandes d'énergies vont dépendre directement de la direction de propagation des électrons dans le cristal, c'est-à-dire vont dépendre du vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$.
- **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'énergies aussi selon 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 3 obstacles épistémologies 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 3 obstacles épistémologies pour démarrer l'enseignement de la physique du solide et proposer des activités qui montre la nécessité et l'importance de ces 3 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 formations suivies 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 du profil de l'enseignant. Nous avons identifié les 3 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 boite en tenant compte de l'interaction avec des atomes seulement dans des cas spécifiques de valeur de $\boldsymbol{k}$ (modèle des électrons quasi-libres) ou en considérant un potentiel périodique carré fini 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 (Hardree-Fock, DFT…) 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…). 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'elle des avantages et des inconvénients, comme cela est décrit dans le Tableau 2 ci-dessous.

	Chimistes	**Physiciens**	**Théoriciens**
Avantages	- Lien entre orbitales atomiques et bandes - Approche graduelle de 2 à N atomes	- Explique l'origine physique de la bande interdire - Importance du vecteur d'onde k	- Complétude des modèles - Grandes précisions
Inconvénients	- Pas besoin d'introduire le vecteur d'onde k	- Pas de lien entre orbitales atomiques et les bandes - Précisions faibles	- 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 $\boldsymbol{k}$ n'est souvent pas considéré. *A contrario*, l'approche du Physicien est centrée sur $\boldsymbol{k}$, où la formation de bandes interdites est décrite pour des valeurs de k bien 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 et qui reste difficile d'accès aux étudiants. Au final, quelle que soit l'approche choisie, il faut reconnaitre de chacune des approches donne une vision restreinte de la Physique du Solide.

3. Notre approche didactique et pédagogique

Dans ce contexte, on s'est 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-étudiant de L3 en école d'ingénieur (filière Matériaux) qui découvre la Physique du Solide et qui n'a pas vocation à devenir expert du domaine.

3.A. Notre choix didactique : une approche graduelle de 2 jusqu'à 10^{24} 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.

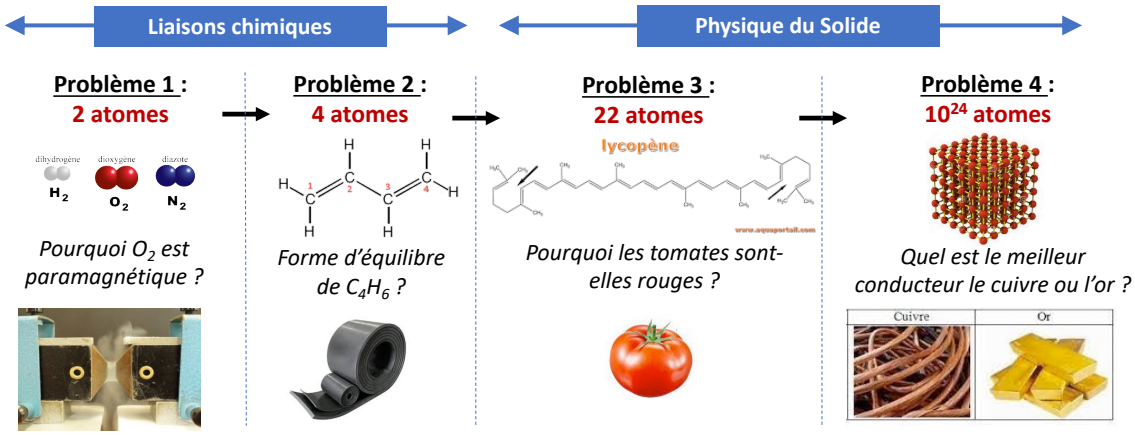

Figure 3 – Description des 4 problèmes qui proposent une approche graduelle du nombre d'atomes en interaction correspondant à la fusion des cours « Liaisons chimiques » et « Physique du Solide ».

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, puis 10 millions avec le polybutadiène (problème n°3) pour enfin finir sur le cristal avec 10^{24} at./cm^3 (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^{24} est essentielle pour sortir de la vision de l'atome isolé et pour donner du sens et de l'intérêt à la Physique du Solide. 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). 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 donner du sens et une vision complète.

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

Afin de renforcer la motivation (Galand, Bourgeois, Frenayet, 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 et Raucent, 2015). Ce type de pédagogie s'est particulièrement développé dans les formations d'ingénieurs (Bédard, D., Lison, C., Dalle, D. et Boutin, N. 2010 ; Raucent, B., Braibant, J., DeTheux, M.-N., Jacqmot, C., Milgrom, É., VanderBorght, C. et Wouters, P., 2004). 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 et 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.

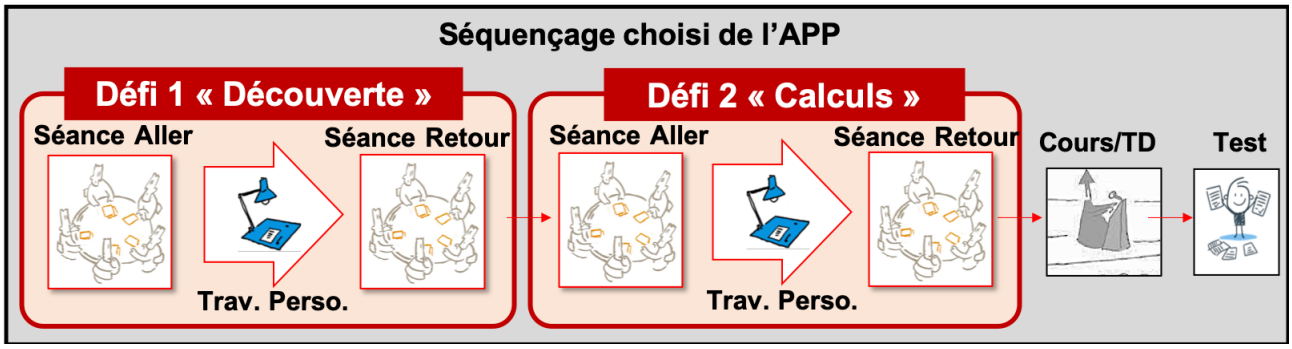

Figure 4 – Description d'une séquence APP qui intègre un 1er défi de découverte, un 2e défi pour réaliser les calculs, suivi d'une séance de clôture et d'un test individuel.

Le 1er défi est axé sur la découverte d'un nouveau concept, alors que le 2e 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 qui 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.

Comme le montre la Figure 5, pour ce dispositif APP, les groupes sont constitués de 6 étudiants, où chacun à 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.

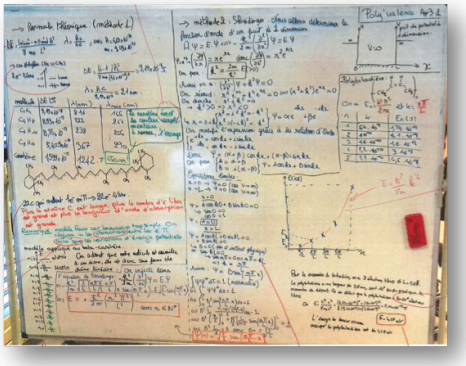

Figure 5 – Organisation de l'APP où les étudiants par groupe de 6 doivent résoudre le problème sous la forme d'un tableau noté.

Ce dispositif APP est le fruit de 3 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 de de 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 1 ou 2 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.

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, alors on montre aux étudiants les limites de ce modèle et les étudiants prennent conscience qu'il devient complètement 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, D.A. et Simon, J.D., 2000; Kittel, C., 2007).

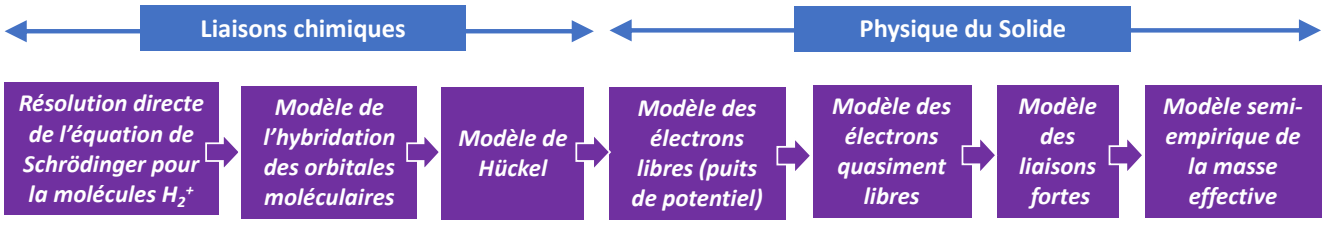

Figure 6 – Liste des modèles étudiés sur l'ensemble des séquences qui intègre le cours de « Liaisons chimiques » et le cours de « Physique du Solide ».

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 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 déclare 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%.

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 égale à 18/20 (de 1 à 8%) (Darie & Durand, 2021).

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

Ce dispositif autour de la modélisation des électrons dans les molécules/solides est un système particulièrement bien adapté pour initier à la notion de modèle en 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 effectif 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 2 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 (Aschroft N.W., Mermin N.D., 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 de polymères 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 mieux prédictifs possibles. Ainsi, il y a cette tendance de partir les modèles les plus simples et de rajouter progressivement de la complexité seulement quand c'est nécessaire. Cependant, cette approche rationnelle a ces limites, notamment pour aborder des systèmes très complexes. Dans certains cas, le développement de modèles incrémentales n'est plus possible, ce qui nécessite de développer de nouveaux modèles en rupture avec le précédent. 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 induit 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 essayer 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 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 démonstration 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.

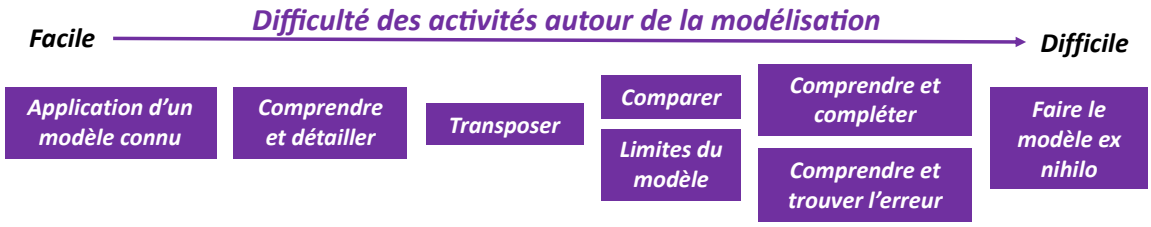

Figure 7 – Exemples d'activités selon le degré de difficulté pour initier à la modélisation

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'apprentissages 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 la 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.

Références

Aschroft, 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: Vrain

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

Bédard, D. et 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(1), pp. 1-3.

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

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

Raucent, B. et 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., VanderBorght, C. et Wouters, P. (2004). Devenir ingénieur par apprentissage actif : compte rendu d'innovation. *Didaskalia*, 24, pp. 1-19.

Christophe Durand
Polytech Grenoble, Laboratoire PHELIQS/CEA-Grenoble
17 Avenue des Martyrs, 38000 Grenoble
e-mail: christophe.durand@univ-grenoble-alpes.fr

Céline Darie
Polytech Grenoble, Institut Néel/CNRS
25 Avenue des Martyrs, 38000 Grenoble

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