

# La physique quantique du laboratoire à la salle de cours : Comment modéliser les électrons dans la matière ?

*Enseigner la Physique du Solide en APP (Apprentissage par Problèmes) : « De la molécule à la physique du solide »*

Christophe Durand

Enseignant-chercheur à l'Université Grenoble Alpes

Polytech Grenoble

Laboratoire Photonique Electronique et Ingénierie Quantiques (PHELIQS)

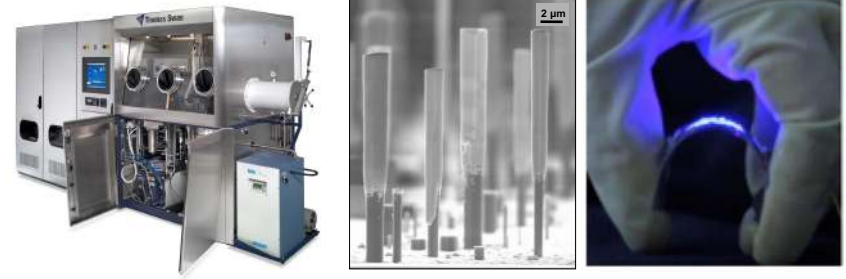
En collaboration avec Céline Darie, Institut Néel, Université Grenoble-Alpes

# Qui suis-je ?

## **Chercheur**

CEA-Grenoble, Lab. Nanophysique et Semiconducteurs

**Physique des semiconducteurs**  
**Croissance cristalline de nanostructures**



## **Enseignant**

Polytech Grenoble, Filière Matériaux

**Physique du solide**  
**Physique des semiconducteurs – composants**

**Pédagogie socio-constructiviste**  
**Expertise en APP (Apprentissage par problèmes)**

## **Conseiller pédagogique**

SUP, Service Universitaire de Pédagogie (2009-2016)



# Préambule

## La physique quantique, c'est quoi ?

Physique non-intuitive ! → modélisation

*Domaine d'applications*

*Dualité onde - corpuscule*

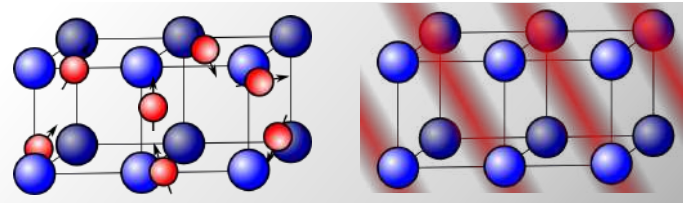
*L'équation fondamentale*

*Principe d'incertitude*

« Dieu ne joue pas aux dés » (Einstein)  
« Cessez de dire à Dieu, ce qu'il doit faire » (Bohr)

*Physique de l'infiniment petit*

*Description de la position, vitesse et énergies des particules élémentaires*



*Equation de Schrödinger*

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \Psi(\vec{x}) = E \Psi(\vec{x})$$



*Principe d'Heisenberg*

$$\Delta \chi \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

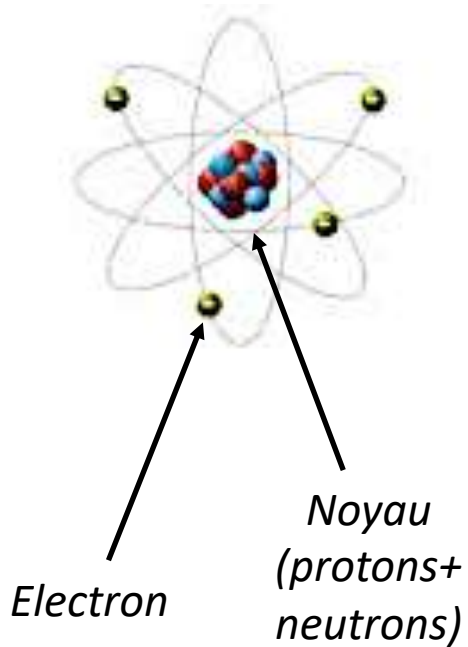
*Probabilité de présence*

$$dP = |\Psi|^2 \cdot d\tau$$

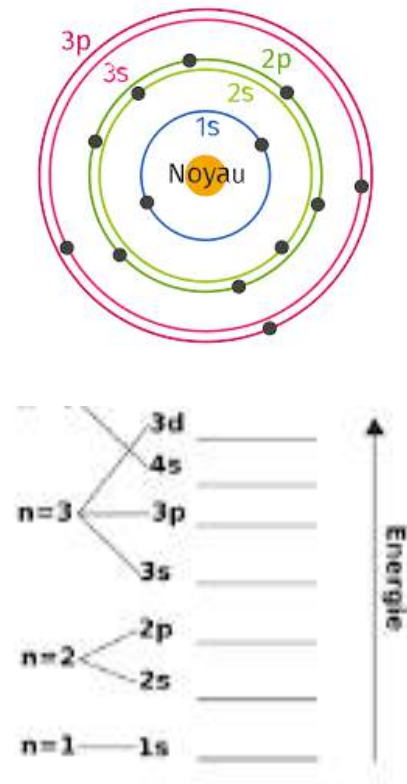
# Préambule

L'atome vu par la physique quantique :  
vive les électrons ! nuages électroniques !

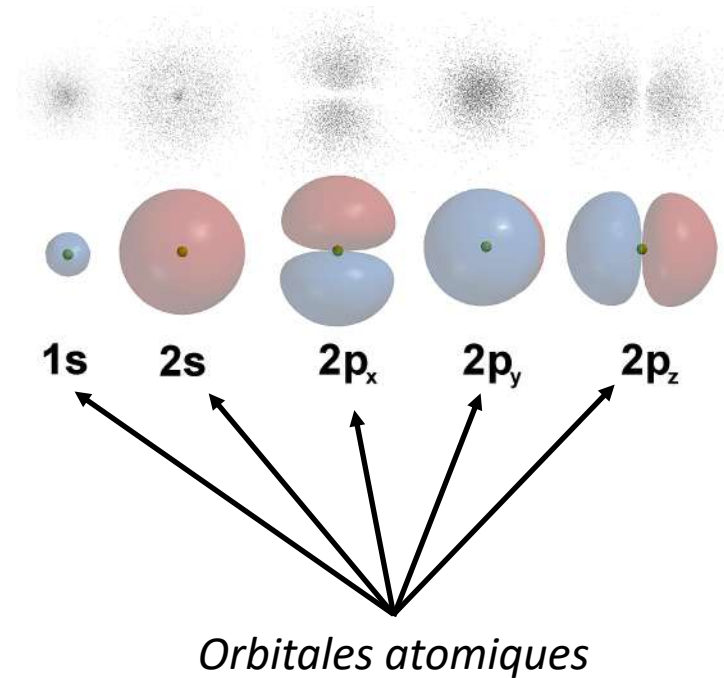
*Modèle de Rutherford*



*Modèle de Bohr*



*Modèle décrit par la physique quantique*



# Préambule

**NOTRE GRANDE QUESTION:  
Comment modéliser les électrons des atomes dans la matière ?**

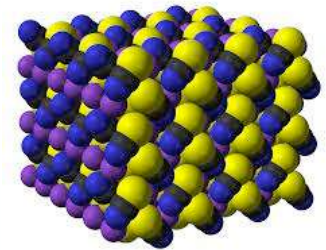
*Physique de l'infiniment petit*

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \Psi(\vec{x}) = E \Psi(\vec{x})$$

$$dP = |\Psi|^2 \cdot d\tau$$

*Physique quantique*

*Physique de l'infiniment grand*



*Matière =  $10^{22}$  atomes/cm<sup>3</sup>*

**Modélisation des électrons dans la matière:  
UN PROBLEME DIFFICILE !**

**→ Physique du Solide**



# Préambule

## Modélisation des électrons dans la matière

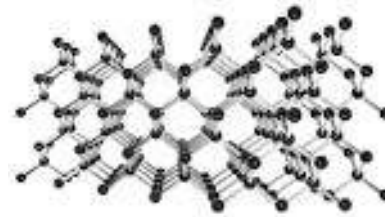
*Propriétés thermiques*



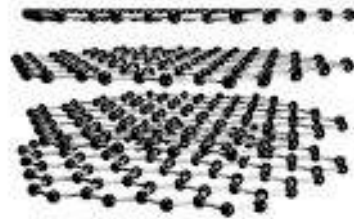
*Propriétés électriques*



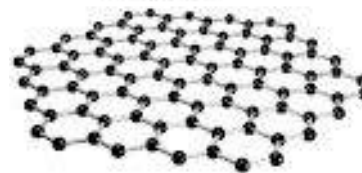
*Propriétés optiques*



Diamant



Graphite



Graphène

# Préambule

Comment modéliser les électrons des atomes dans la matière ?

**Le connu**

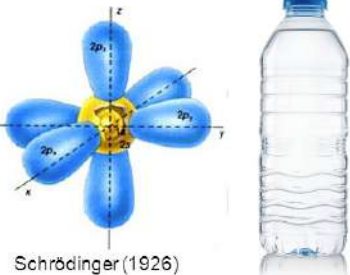
Modèle de l'atome isolé



**Le nouveau**

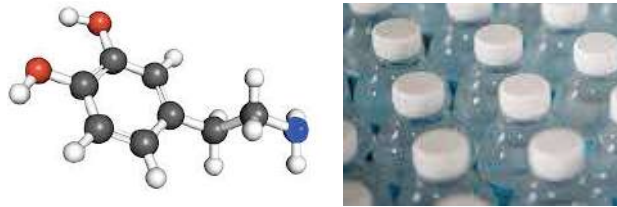
Modèle de l'atome non-isolé

L'atome

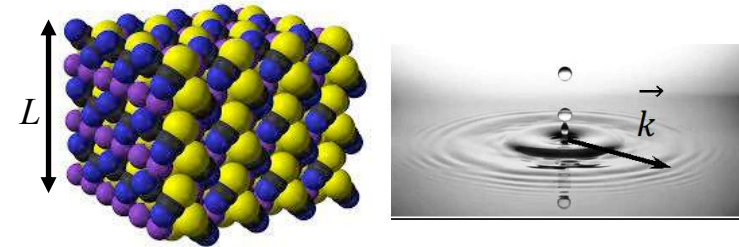


Schrödinger (1926)

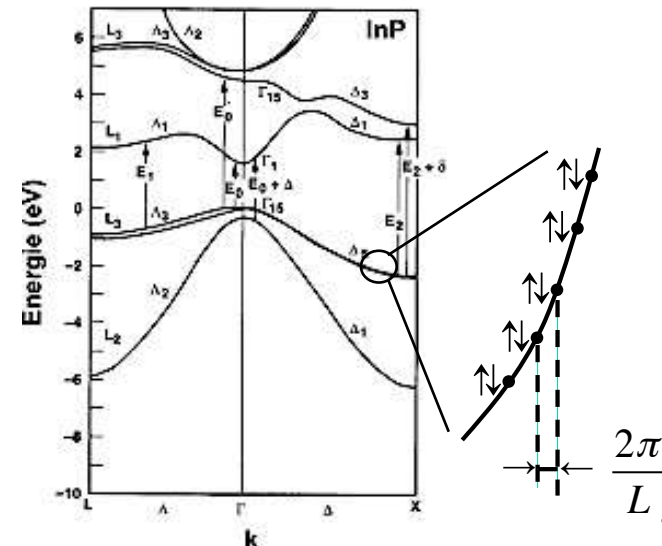
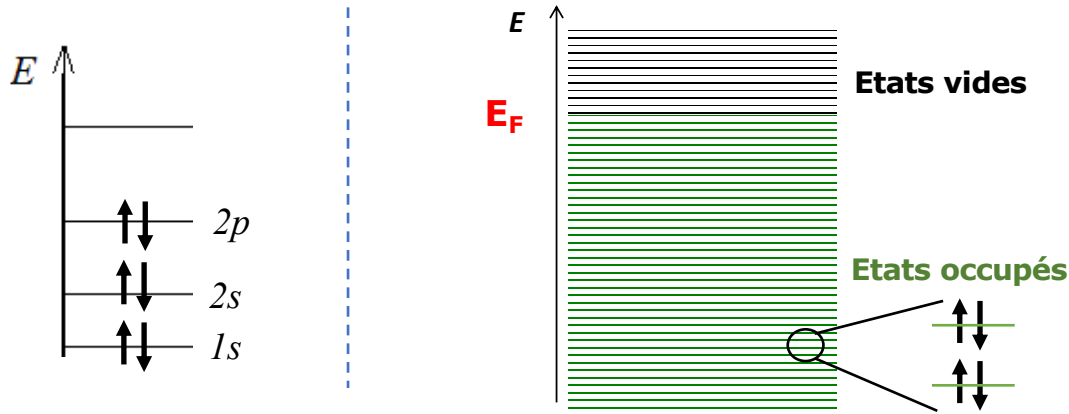
Liaisons Chimiques  
La molécule (qq atomes)



Physique du Solide  
Le solide ( $10^{24}$  atomes)



nb d'atomes = nb de niveaux possibles



*Support d'étude  
pour la modélisation*

**Modélisation des électrons  
dans la matière**

*Propriétés thermiques*

*Propriétés électriques*

*Propriétés optiques*

## Plan de l'exposé

1. La modélisation **des électrons** dans la recherche
2. La modélisation **des électrons** dans l'enseignement supérieur
3. Notre approche pédagogique de la modélisation **des électrons**
4. Analyse du dispositif APP
5. Pistes pour pratiquer la modélisation avec les étudiants



*Support d'étude  
pour la modélisation*

**Modélisation des électrons  
dans la matière**

*Propriétés thermiques*

*Propriétés électriques*

*Propriétés optiques*

## Plan de l'exposé

### 1. La modélisation des électrons dans la recherche

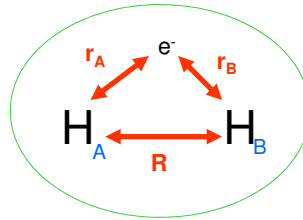
- a. Equation à résoudre : un problème insoluble !*
- b. Les modèles ab-initio*
- c. Les modèles empiriques*
- d. Le modèle des liaisons fortes*
- e. Bilan des méthodes et des usages*

# 1. Recherche – a) Equation à résoudre : un pb insoluble !

## Equation de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi = E \Psi$$

**Molécule  $H_2^+$  à 1 électron**



$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_A} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B}}_{\text{Attraction de l'e- par } H_A \text{ et } H_B} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}}_{\text{Répulsion des deux noyaux}}$$

$\hat{T}$                        $\hat{V}$   
 Terme d'énergie cinétique                      Terme d'énergie potentielle

**Système à N électrons**

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{i,I} \frac{Z_I}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}_i|} + \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|}$$

Ex: N=10 e<sup>-</sup> qui occupe un volume de 10 Å<sup>3</sup> divisé en 10x10x10 petits cubes → grosso modo 1000<sup>N</sup> = 10<sup>30</sup> configurations à calculer

**Le calcul exact possible pour quelques électrons à l'aide de puissants ordinateurs**

→ Problème insoluble au-delà de 100 électrons (quelques atomes) ...

# 1. Recherche – b) Les modèles *ab-initio*

Méthodes « *ab-initio* » sans « *a priori* » (sans donnée expérimentale)

## 1. Approches du champ moyen (1930-1990)

Principe : Calcul pour 1 seul électron en considérant que les autres électrons forme un potentiel moyen  $V^{e-e}$

Approximation de Hartree-Fock

Modèle de Thomas-Fermi

Méthode de la DFT (Théorie de la fonctionnelle de la densité)

...

Prix Nobel de Chimie  
Walter Kohn en 1998



$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{i,I} \frac{Z_I}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}_i|} + \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|}$$
$$H = -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \sum_I \frac{Z_I}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}|} + \tilde{V}^{ee}(\mathbf{r})$$

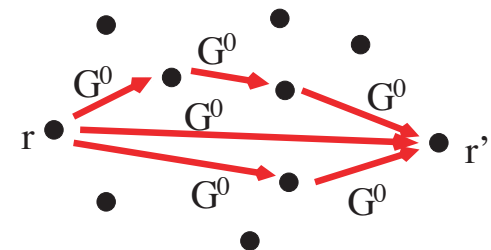
Approche classique permettant le calcul jusqu'à 1000 atomes  
(temps de calcul en  $N^3$ )

## 2. Approches perturbatives (1990 - ...)

Principe : Théorie de la perturbation à N-corps à partir de fonction de Green  $G^0$  (tel un jeu de billard quantique)

Approximation dite GW

(nécessaire pour la précision de la bande interdite)



Approche moderne plus précise permettant le calcul jusqu'à 1000 atomes  
(temps de calcul en  $N^4$ )

# 1. Recherche – c) Les modèles empiriques

Méthodes qui combinent la théorie avec des *données expérimentales*

## Méthode k.p

Principe : Méthode qui combine la théorie de la perturbation et une méthode empirique. Les calculs sont corrigés par des données expérimentales

### Théorie de la perturbation

vecteur d'onde  $\mathbf{k}$       impulsion  $\mathbf{p}$

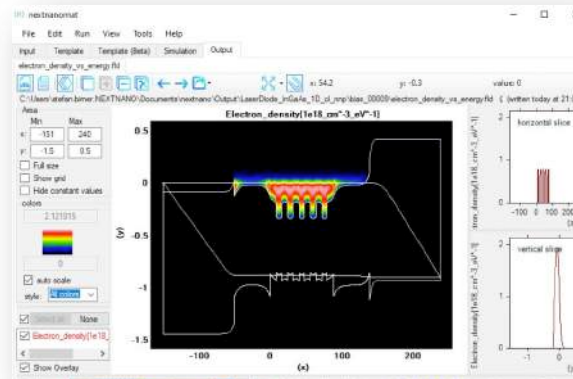
$$H_{\mathbf{k}} = \frac{p^2}{2m} + \underbrace{\frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{\text{Perturbation}} + V$$

### Modèle corrigé par des données empiriques

Masses effectives       $m \rightarrow m^*$

Quasi-particule : la masse de l'électron est modifiée de manière artificielle pour tenir compte du réseau cristallin.  $m^*$  dépend du matériau et de la direction de  $\mathbf{k}$

### Outil pratique de simulation



Approche pratique et précise

Méthode couramment utilisée dans les laboratoires par les non-expert de la modélisation

# 1. Recherche – d) Le modèle des liaisons fortes

## Méthode dite LCAO

Principe : La solution de la fonction d'onde est une combinaison linéaire des orbitales atomiques de tous les atomes

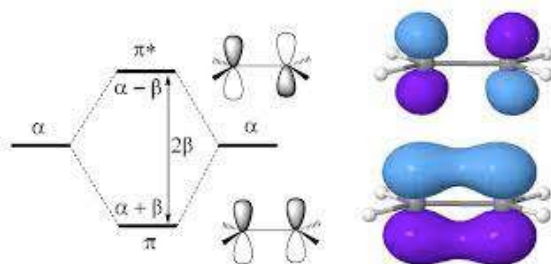
$$\Psi(x) = c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2 + c_3 \phi_3 + \dots$$

$$= \sum_n c_n \phi_n(x)$$

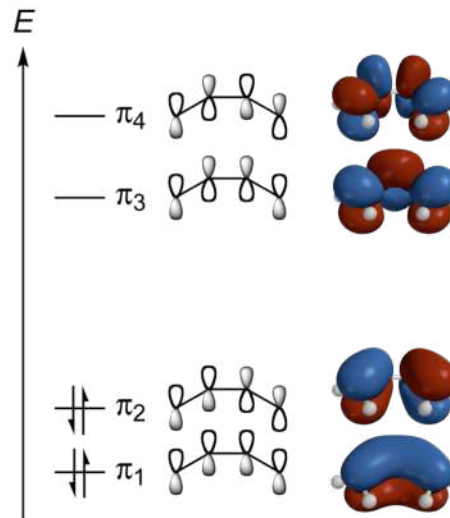
Approximation de Hückel : interactions seulement avec les atomes 1<sup>er</sup> voisins

### *Méthode des liaisons fortes appliquées à la liaison $\pi$ (orbitale atomique $p_z$ )*

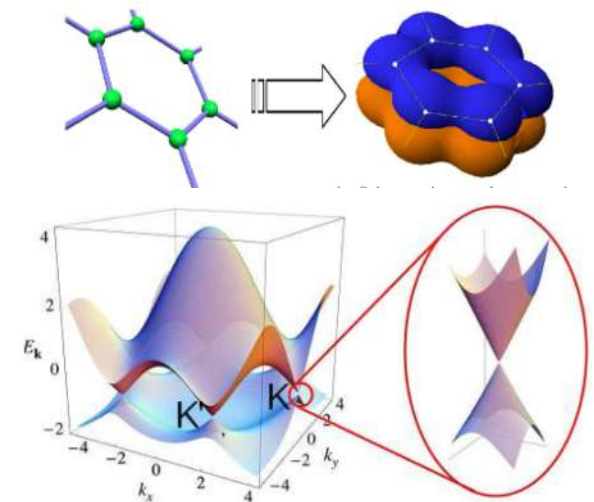
2 atomes



4 atomes



N atomes (graphène)



Approche précise pour décrire les couches s et p qui s'applique à des solides

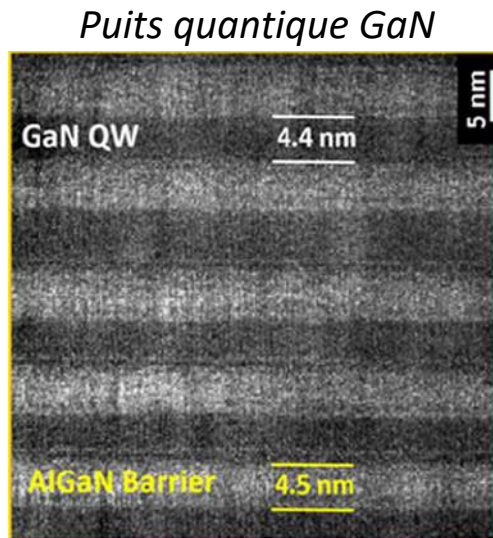


# 1. Recherche – e) Bilan des méthodes et des usages

nextnano  
Software for semiconductor nanodevices

	Calculs exacts	Modèles <i>ab-initio</i>	Modèle empirique k.p	Modèle Liaisons fortes
Quoi ?	10 atomes	1000 atomes	Solide	Solide
Comment ?	Très précis	Assez précis	Très précis	Précis
Qui ?	Chercheur-expert	Chercheur-expert	Tous	Chercheur-expert

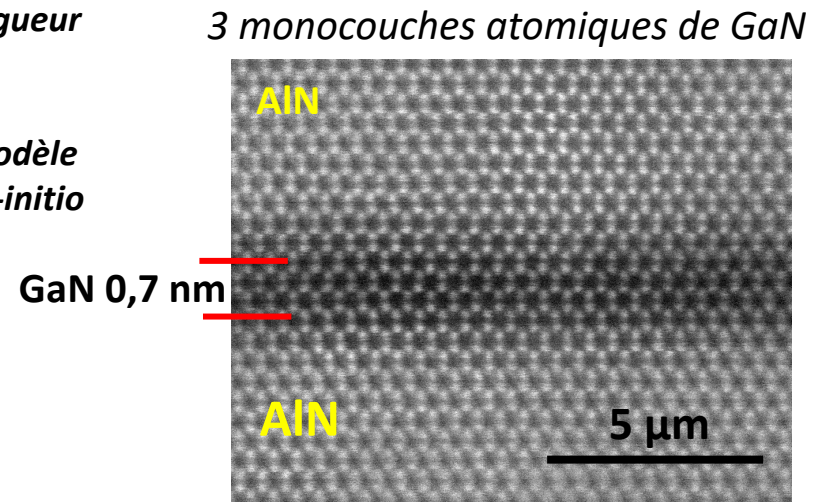
## Exemple sur mon activité de recherche



Pour calculer la longueur d'onde émise

Méthode k.p

Modèle *ab-initio*



Se pose la question : comment enseigner ces modèles et les rendre accessibles ?

*Support d'étude  
pour la modélisation*

**Modélisation des électrons  
dans la matière**



*Propriétés thermiques*

*Propriétés électriques*

*Propriétés optiques*

## Plan de l'exposé

### 2. La modélisation des électrons dans l'enseignement supérieur

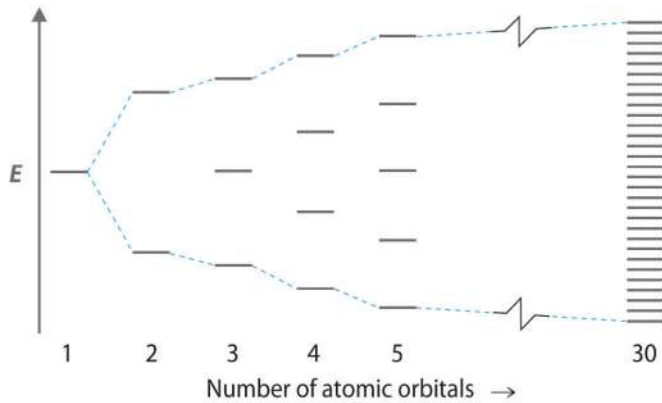
- a. *L'approche du point de vue des « Chimistes »*
- b. *L'approche du point de vue des « Physiciens »*
- c. *L'approche du point de vue des « Théoriciens »*
- d. *Les obstacles épistémologiques*

# 2. Enseignement – a) Approche des « Chimistes »

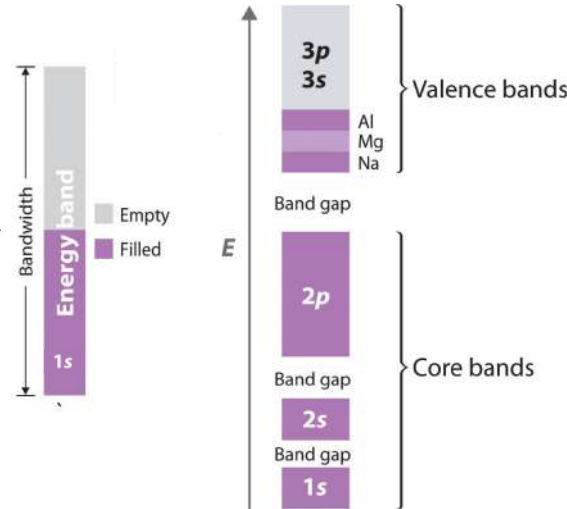
## Le modèle des liaisons fortes

→ Combinaison linéaire des orbitales atomiques des atomes (méthode LCAO)

Exemple d'une chaîne linéaire d'atomes identiques ayant une orbitale atomique 1s

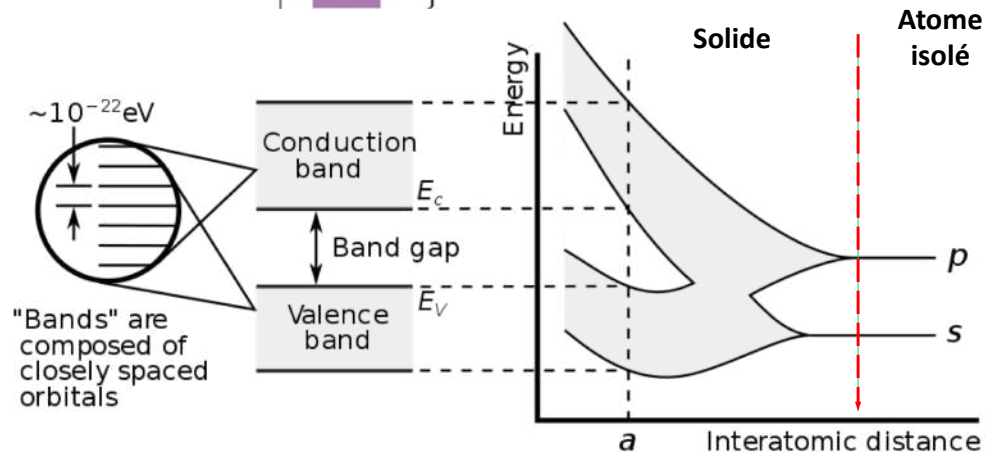


Exemple de métaux (Al, Mg, Na) ayant plusieurs types d'orbitales



LCAO avec quelques atomes et ... hop ! On généralise à  $N$  atomes pour un solide

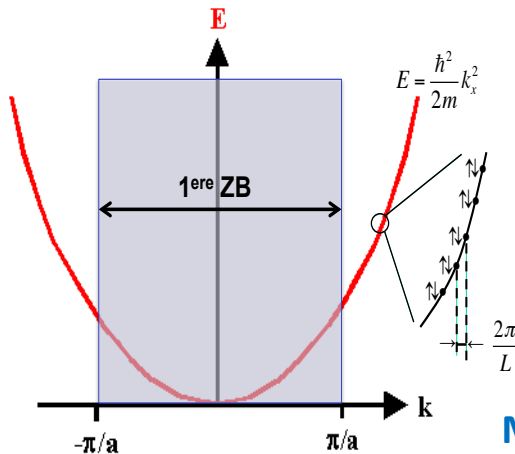
Méthode efficace pour décrire les électrons de cœur (couches s et p)



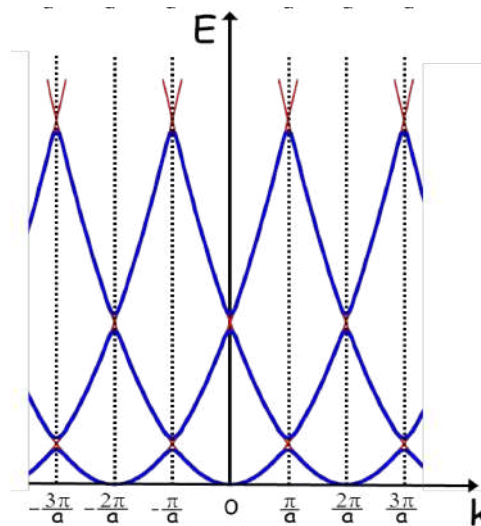
# 2. Enseignement – b) Approches des « Physiciens »

## 1. Modèle des électrons quasi-libres + théorème de Bloch

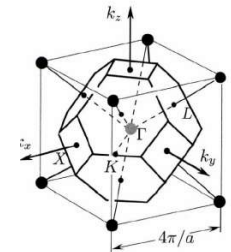
Modèle des électrons libres  
(Modèle de Sommerfeld)



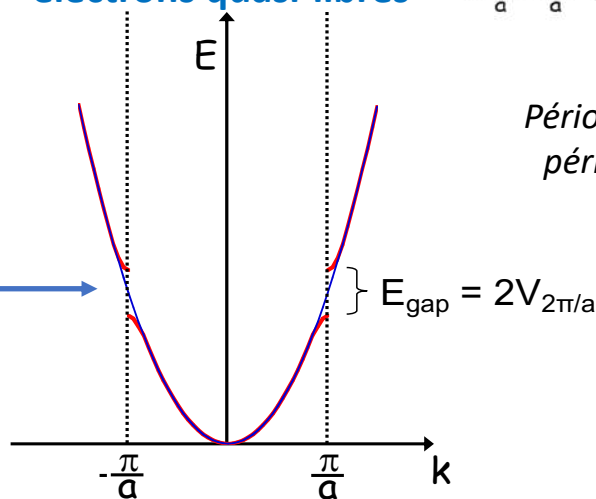
Modèle des électrons quasi-libres avec le théorème de Bloch



Description de la structure de bande réelle

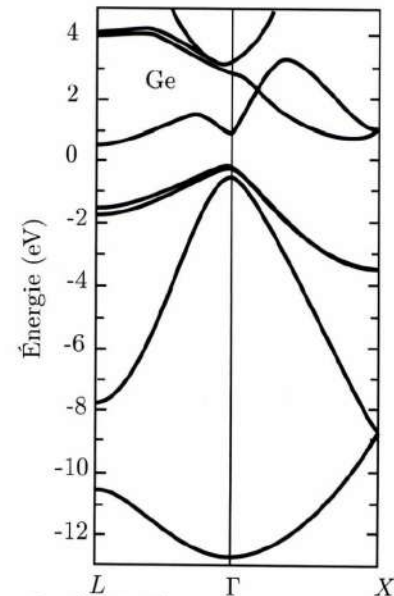


Modèle des électrons quasi-libres



Calcul de perturbation en  $\pi/a$  et  $-\pi/a$

Périodicité de  $E$  liée à la périodicité du réseau cristallin

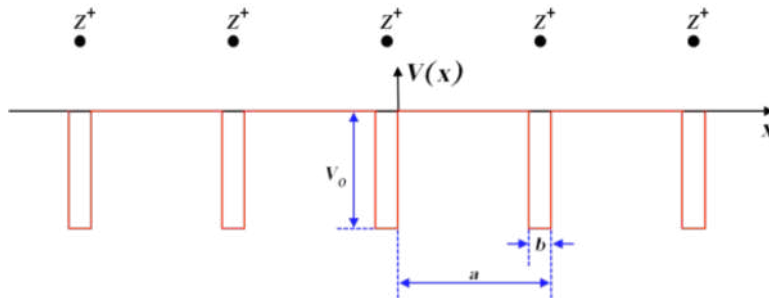


$\frac{2\pi}{a}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$   $(0, 0, 0)$   $\frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$  17

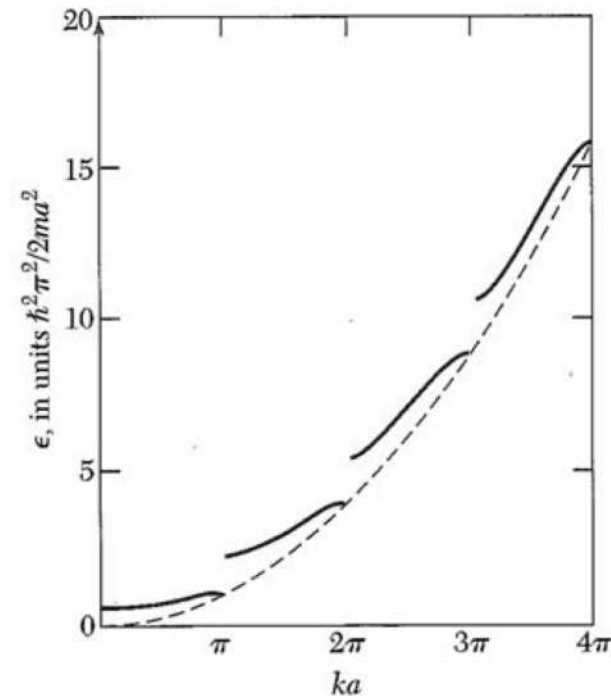
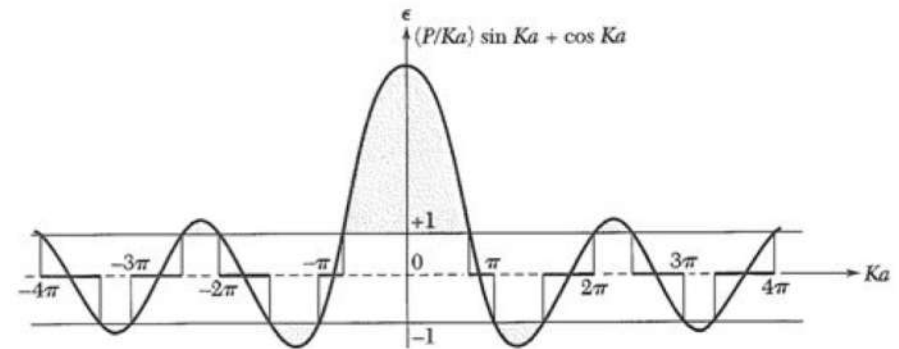
## 2. Enseignement – b) Approches des « Physiciens »

### 2. Modèle de Kronig-Penney

Résolution de Schrödinger en considérant un potentiel périodique carré fini pour le réseau cristallin



Modèle simple avec des calculs assez facile d'accès





## 2. Enseignement – c) Approches des « Théoriciens »

**Modèle 1**

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{i,I} \frac{Z_I}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}_i|} + \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|}$$



**Modèle 2**

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \sum_I \frac{Z_I}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}|} + \tilde{V}^{ee}(\mathbf{r})$$



**Modèle 3**

$$H_{\mathbf{k}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V$$



...

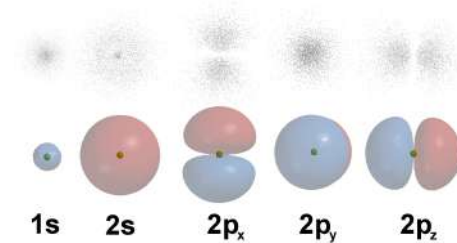
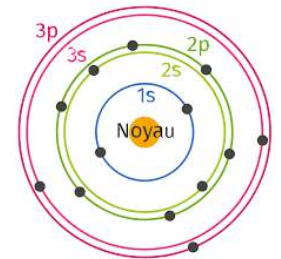
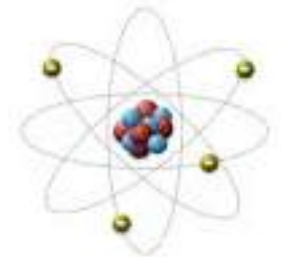
Résolution de Schrödinger détaillée en considérant un hamiltonien différents selon les différents modèles.

## 2. Enseignement – d) Obstacles épistémologiques

Trois grandes difficultés pour comprendre la physique du solide :

### 1. Modèle de l'atome isolé profondément ancré

L'atome isolé



## 2. Enseignement – d) Obstacles épistémologiques

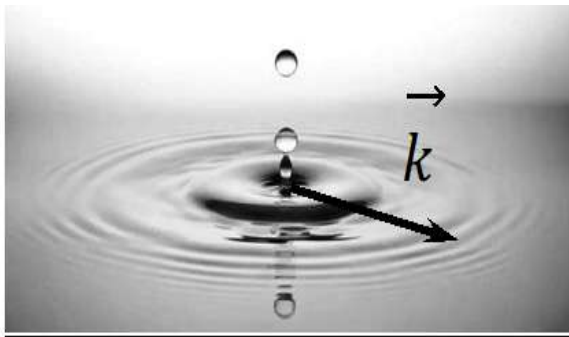
Trois grandes difficultés pour comprendre la physique du solide :

1. Modèle de l'atome isolé profondément ancré

2. Le vecteur d'onde  $k$

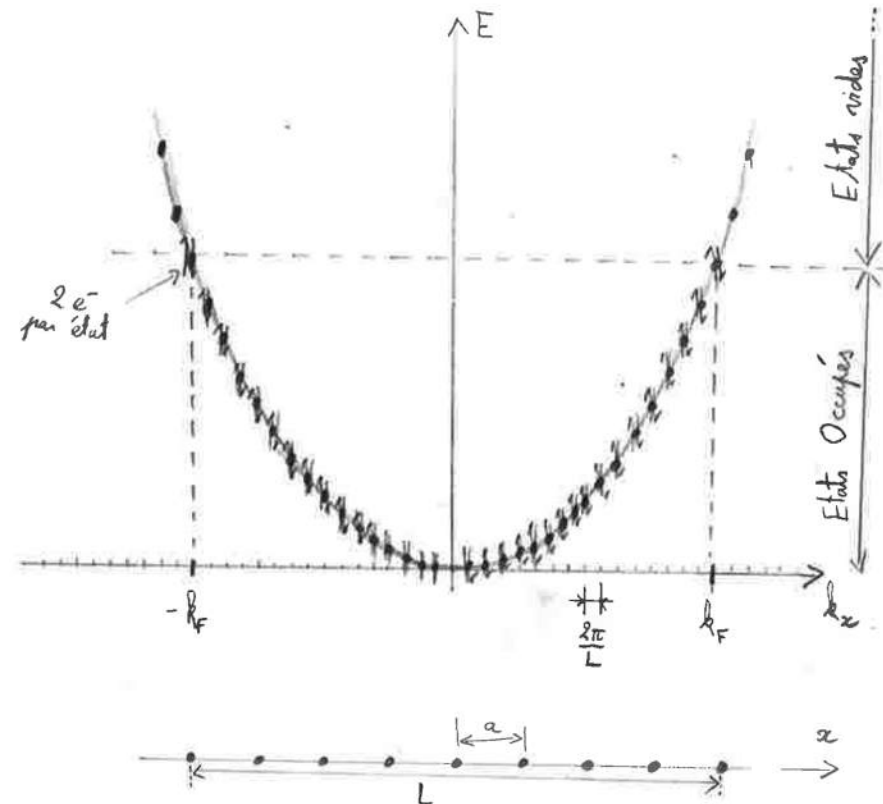
Le vecteur d'onde  $k$

$k$  en 3D



$k$  quantifié

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x \quad \text{avec } n_x \text{ entier relatif } n_x \in \mathbb{Z}$$



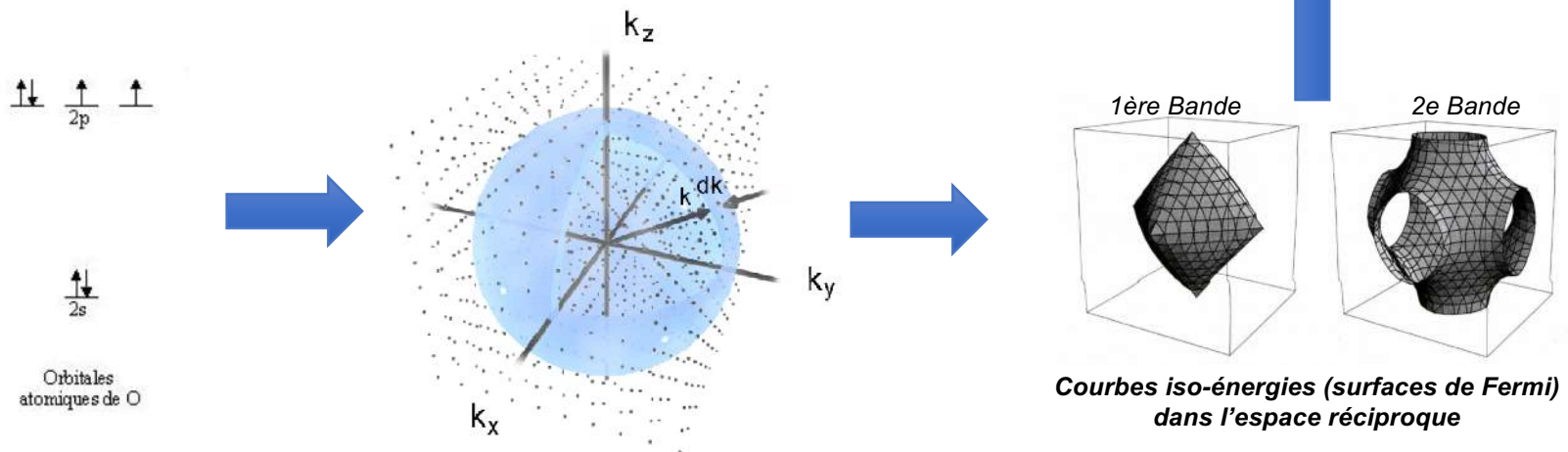
## 2. Enseignement – d) Obstacles épistémologiques

Trois grandes difficultés pour comprendre la physique du solide :

1. Modèle de l'atome isolé profondément ancré

2. Le vecteur d'onde  $k$

3. Remplissage des niveaux d'énergie en 3D



## 2. Enseignement – Conclusion

	Chimistes	Physiciens	Théoriciens
Avantages	<ul style="list-style-type: none"><li>- Lien entre orbitales atomiques et bandes</li><li>- De 2 à N atomes</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>- Explique l'origine physique du « Gap »</li><li>- Importance du vecteur <math>k</math></li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>- Complétude des modèles</li><li>- Grandes précisions</li></ul>
Inconvénients	<ul style="list-style-type: none"><li>- Pas besoin du vecteur d'onde <math>k</math></li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>- Pas de lien entre orbitales atomiques et bandes</li><li>- Précisions faibles</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>- Modèles difficiles d'accès aux étudiants</li></ul>

- Les étudiants ont une **vision partielle du problème avec souvent un seul point de vue proposé**
- Face à la complexité, l'enseignant prend en charge l'ensemble des aspects théoriques et fait lui-même les calculs (ou pas)



*Support d'étude  
pour la modélisation*

**Modélisation des électrons  
dans la matière**

A diagram consisting of a light blue rounded rectangle containing a red rectangle. The red rectangle contains the text 'Modélisation des électrons dans la matière'. Three red arrows point from the right side of the red rectangle to the text 'Propriétés thermiques', 'Propriétés électriques', and 'Propriétés optiques' respectively.

*Propriétés thermiques*

*Propriétés électriques*

*Propriétés optiques*

## Plan de l'exposé

### 3. Notre approche pédagogique de la modélisation des électrons

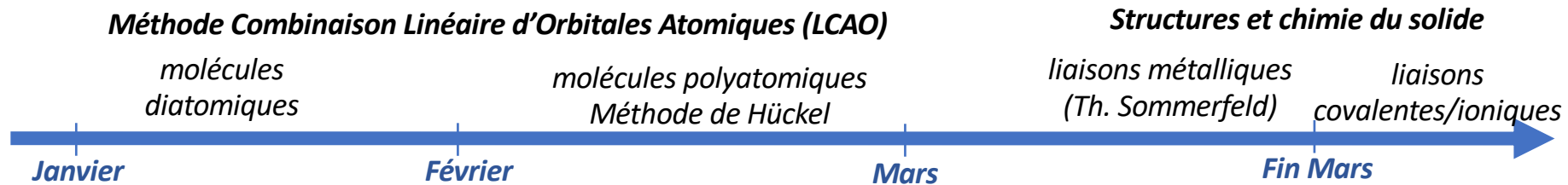
- a. Notre choix épistémologique*
- b. Notre choix didactique en APP*
- c. Notre approche « d'un modèle à l'autre »*

# 3. Notre approche – a) Notre choix épistémologie

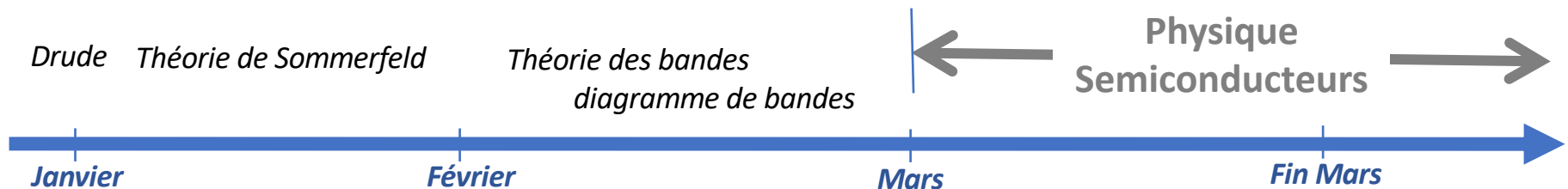
Avant 2016

2 cours / 2 enseignants différents

« Liaisons Chimiques » Céline Darie – « Chimiste » : 8 CM (2h) + 5 TD (2h) = 44h ETD



« Physique du Solide » Christophe Durand – « Physicien » : 5 CM (2h) + 3 TD (2h) = 27h ETD



# 3. Notre approche – a) Notre choix épistémologie

Après 2016

Approche graduelle

Fusion des 2 cours en 4 séquences-problèmes / 2 enseignants ensemble

Liaisons chimiques

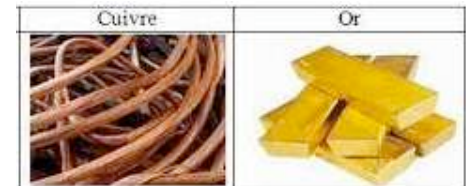
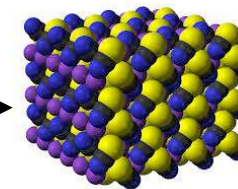
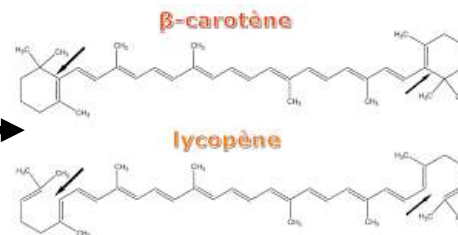
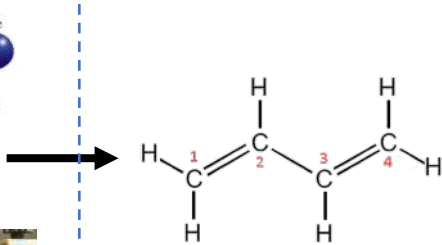
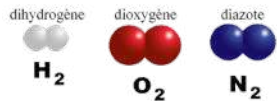
Physique du Solides

Problème n°1: 2 atomes

Problème n°2: 4 atomes

Problème n°3: 22 atomes

Problème n°4: 10<sup>24</sup> atomes



Janvier

Février

Mars

Résolution de l'équation de Schrödinger avec différentes hypothèses pour décrire les propriétés des électrons

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x)\psi = E\psi$$

→ Formalisme établi pour quelques atomes inutilisable face aux très grands nombres

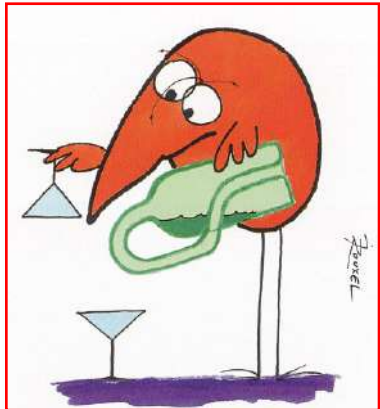
→ *in fine* nécessité d'introduire de nouveaux concepts pour le changement d'échelle

# 3. Notre approche – b) Notre choix didactique en APP

## Méthode APP (Apprentissage Par Problèmes)

### Approche socio-constructiviste

#### Le problème



#### Le groupe

### Un séquençage APP typique

#### Travail Personnel TRAP

(50-70 % du temps total de travail)

#### Séance « Aller »

- Comprendre la tâche (clarifier, reformuler)
- Faire le point sur ce que l'on sait
- Formuler des pistes



- Réaliser le plan d'action (travail individuel)



#### Séance « Retour »

- Mettre en commun (comparer et évaluer)
- Construire une solution
- Faire le bilan



#### Séance de Clôture

- Cours de synthèse/reconstruction
- Evaluation **INDIVIDUELLE** (Quick-test)



- Favoriser l'expression de chacun



- Déterminer les responsabilités



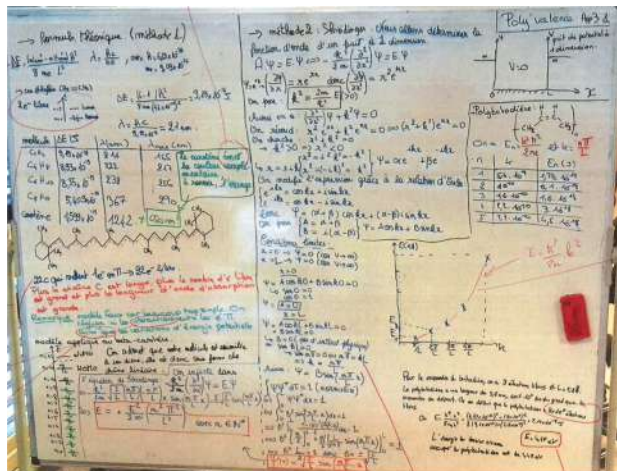
- Organiser le groupe



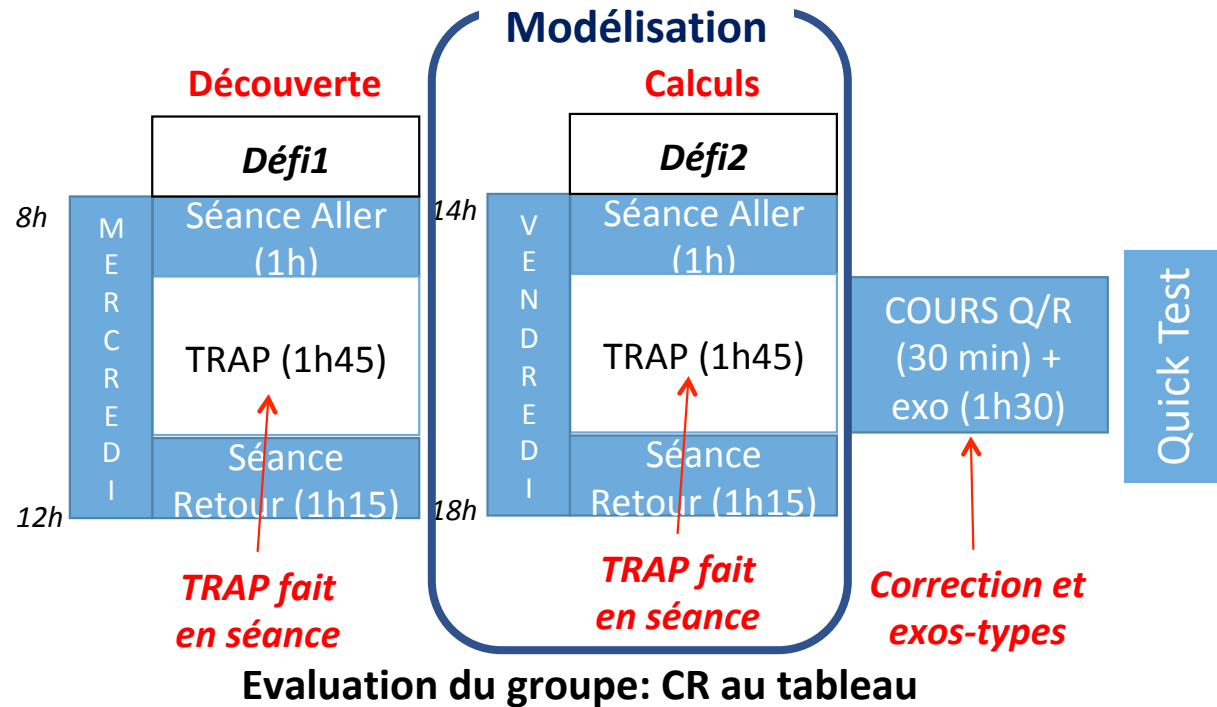
+ séances « mini-cours ou/et de questions/réponses »

# 3. Notre approche – b) Notre choix didactique en APP

## Le groupe



## L'organisation de nos séquences APP

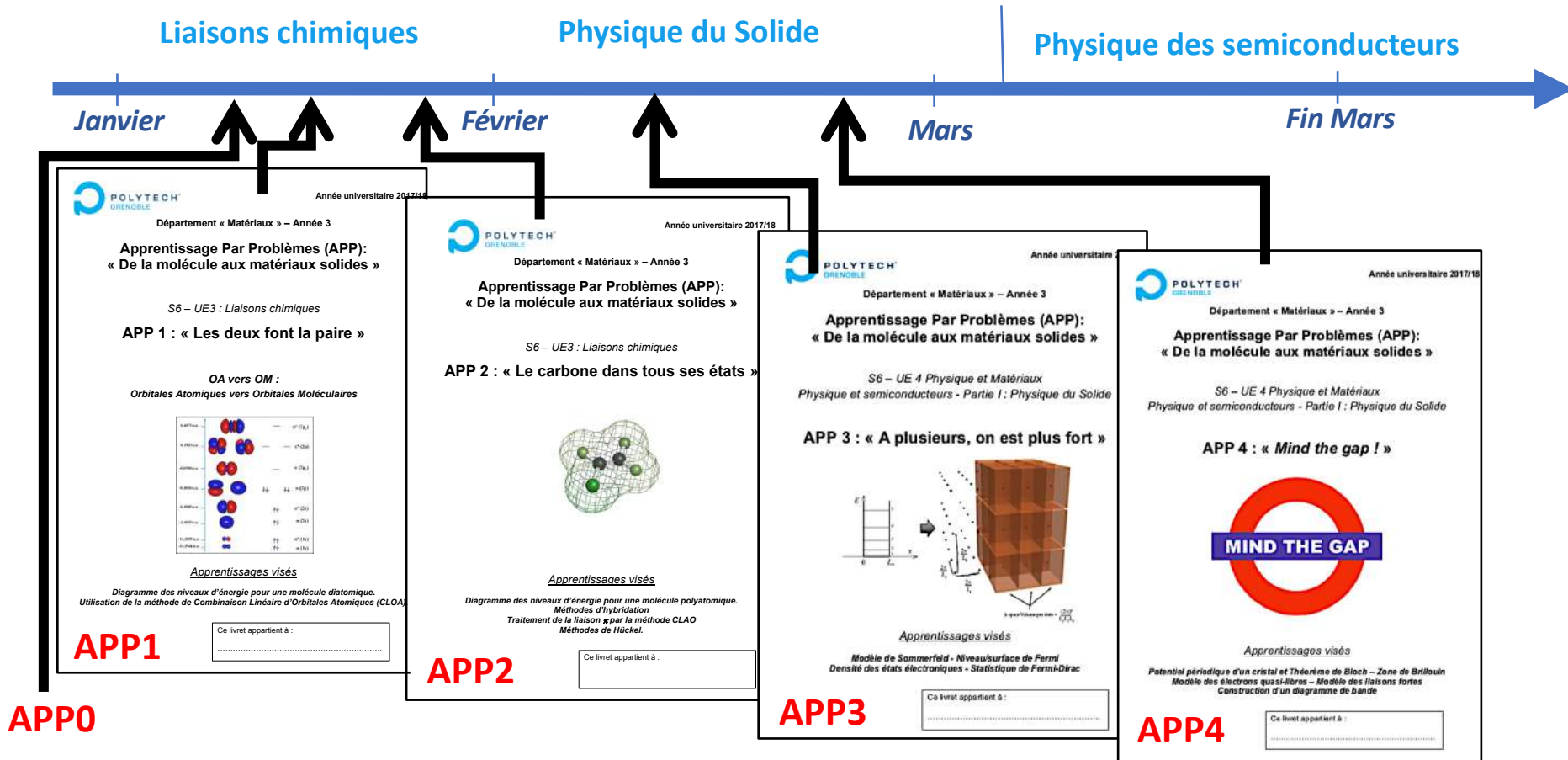


Constitution de 8 groupes de 6 encadrés par 2 tuteurs



# 3. Notre approche – b) Notre choix didactique en APP

## L'organisation des séquences APP



# 3. Notre approche – c) D'un modèle à l'autre

## APP0 : « Apporte ton grain de sable »

### Objectifs :

- Comprendre le travail en groupe et la méthode APP
- Invitation à la modélisation
- Travail sur les grands nombres

## DEFI n° 1 : « le laisser-faire »

### VOTRE MISSION



Répondre à la question suivante :  
Combien y-a-t-il de grains de sable sur la Terre ?

$N_{\text{grain de sable}} = \text{env. } 10^{24} \text{ (Terre)}$

## DEFI n° 2 : « une organisation précise »

### VOTRE MISSION



Répondre à la question suivante :  
Combien y-a-t-il de grains de sable utilisés par l'humanité?



Le travail se déroulera en 2 temps :

**1<sup>er</sup> temps - TRAVAIL PERSONNEL - TRAP (10 min) :**

**ATTENTION :** Travail strictement individuel. Interdiction de discuter avec ses voisins !!!!!!!

Essayer de résoudre par vous-même le défi n°2.

**2<sup>e</sup> temps - Travail en équipe (20 min)**

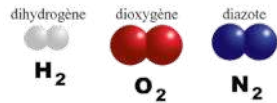
**ATTENTION :** Travail strictement collectif. Obligation de discuter avec son groupe !!!!!!!

**Avant de commencer, attribuer les rôles suivants :**

**Animateur :** s'assure que le groupe suit les étapes prévues et anime la discussion (distribue la parole, suscite /sollicite la participation ou modère les interventions)

# 3. Notre approche – c) D'un modèle à l'autre

## APP1 : « Les deux font la paire »

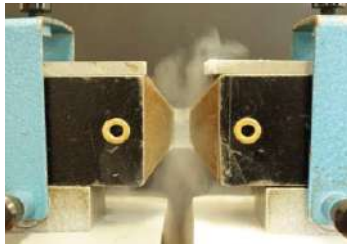


### Objectifs :

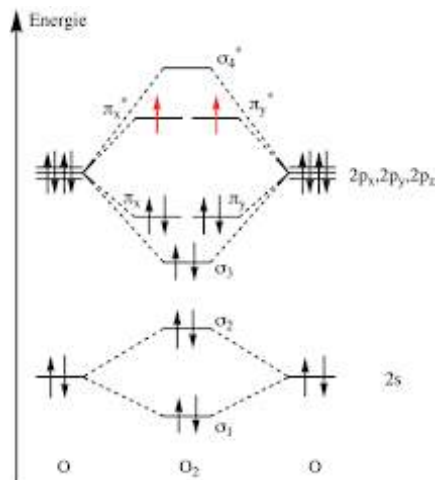
- **Modèle LCAO**
- **Résolution exacte du problème avec la molécule  $H_2^+$**

## Défi n°1

Pourquoi  $O_2$  est magnétique et pas  $N_2$  ?



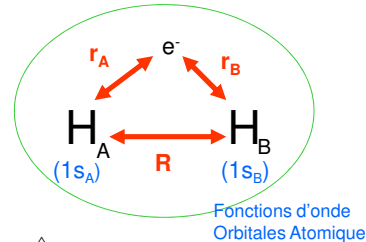
## Construction d'un diagramme d'énergie d'une molécule



## Défi n°2

Est-ce que la molécule  $He_2$  existe ?

### Résolution exacte de l'eq. Schrodinger pour $H_2^+$



$$\psi_{app} = c_1 1s_A + c_2 1s_B$$

Orbitale Moléculaire = Combinaison Linéaire d'Orbitales Atomiques

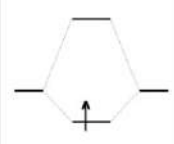
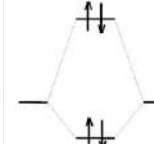
$$\hat{H}\Psi = E_0\Psi$$

Comprendre et détailler

annexe mathématique sans tous les détails

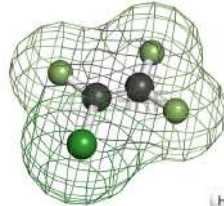
$$\langle E^+ \rangle = \frac{\alpha + \beta}{1 + S}$$

$$\langle E^- \rangle = \frac{\alpha - \beta}{1 - S}$$

Edifice	$H_2^+$	$He_2$
$\Sigma N_v$	$2 \times 1 - 1 = 1$	$2 \times 2 = 4$
Diagramme des O.M.		

# 3. Notre approche – c) D'un modèle à l'autre

## APP2 : « Le carbone dans tout ses états »



### Objectifs :

- hybridation  $sp$
- LCAO avec simplification de Hückel

### Défi n°1 Hybridation $sp$ avec $CH_4$

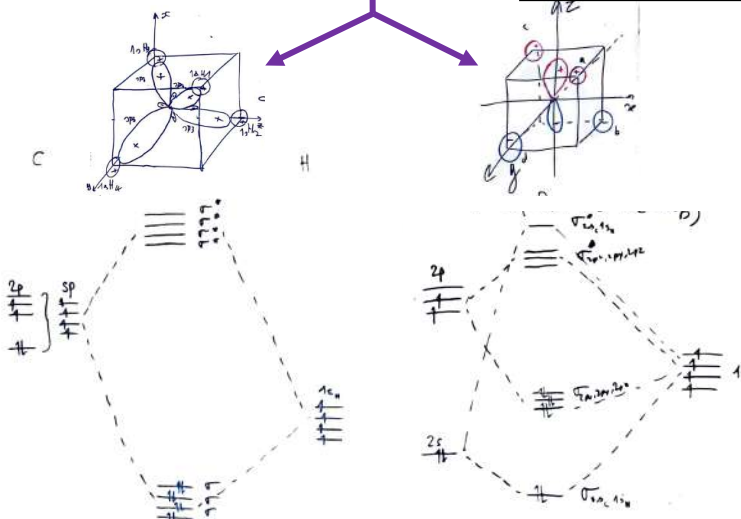
Modèle hybridation fait avec la molécule  $BH_3$



Modèle avec hybridation  $sp$

Transposer

Modèle sans hybridation  $sp$



Comparer

Géométrie : OK

Diag. énergie : pas OK

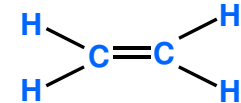
Géométrie : pas OK

Diag. énergie : OK

### Défi n°2

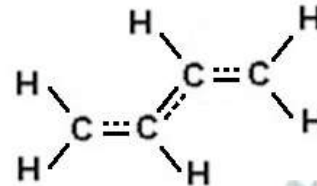
LCAO avec 4 atomes de carbone (butadiène)

Modèle LCAO réalisée pour la molécule d'éthylène  $C_2H_4$



Transposer

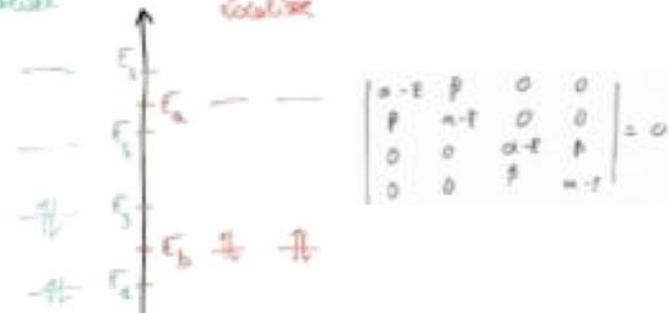
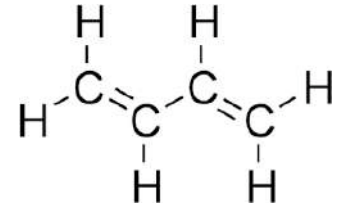
Liaison double délocalisée



$$\begin{vmatrix} d & -t & 0 & 0 \\ 0 & d & -t & 0 \\ 0 & 0 & d & -t \\ 0 & 0 & 0 & d \end{vmatrix} = 0$$

Forme la plus stable !

Liaison double localisée

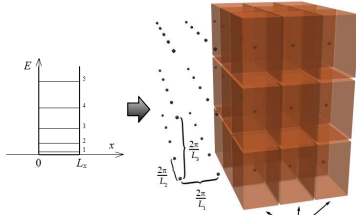


Comparer

Forme qui n'existe pas !

# 3. Notre approche – c) D'un modèle à l'autre

## APP3 : « A plusieurs, on est plus fort »



### Objectifs :

- **Modèle des électrons libres (Modèle de Sommerfeld)**
- **Quantification du vecteur d'onde  $k$  de la fonction d'onde**
- **Modèle appliqué à un système 1D, 2D et 3D**

## Défi n°1

Pourquoi les tomates sont rouges ?

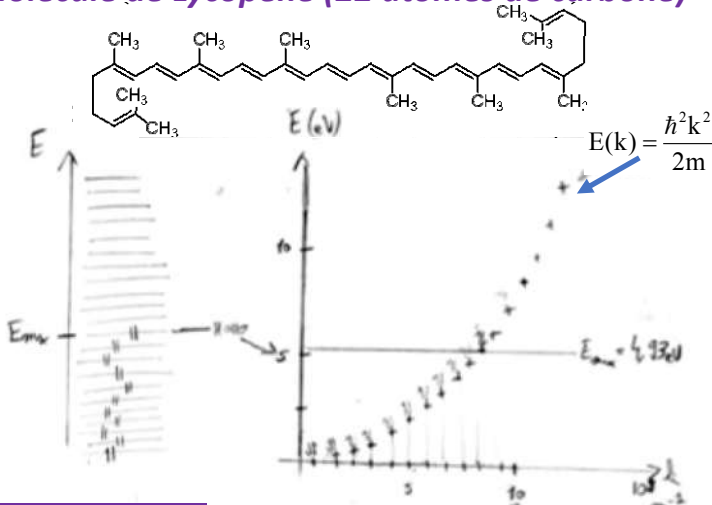


**Modèle d'un électron dans un puit quantique**

**Application d'un modèle connu**

### Modèle des électrons libres à 1D

**Molécule de Lycopène (22 atomes de carbone)**

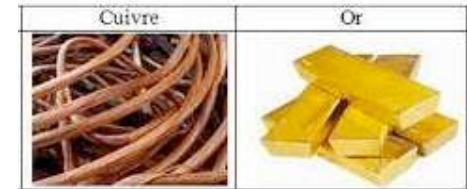


**Limite du modèle**

← **Polymère (10<sup>6</sup> atomes de carbone)**

## Défi n°2

Quel est le meilleur conducteur entre le cuivre et l'or ?

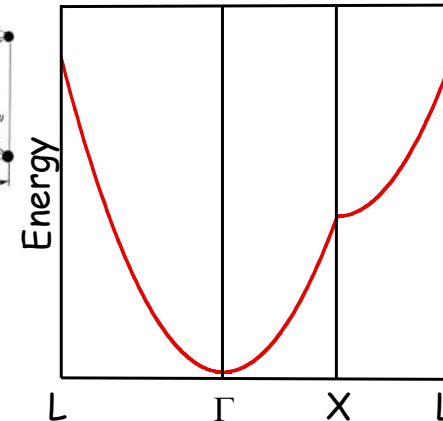
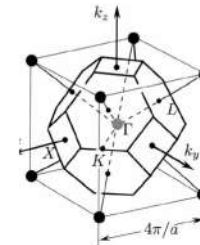
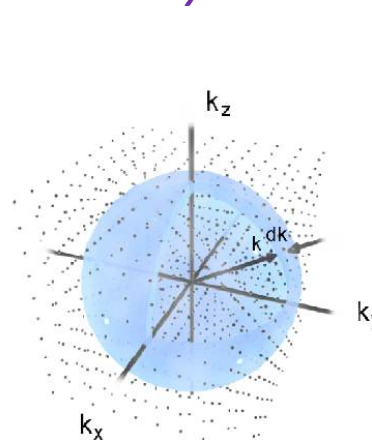


### Modèle des électrons libres à 3D

**Modèle des électrons libres à un système 2D**

**Transposer**

**Modèle des électrons libres à un cristal (3D)**  
10<sup>22</sup> atomes/cm<sup>3</sup>





# 3. Notre approche – c) D'un modèle à l'autre

## APP4 : « Mind the gap ! »



### Objectifs :

- Prise en compte du potentiel du réseau d'atomes
- Modèle des électrons quasi-libres à 1D
- Modèle des liaisons fortes à 1D

### Défi n°1 Modèle des électrons quasi-libres à 1D

Vous allez chercher la solution de l'équation de Schrödinger en tenant compte du réseau cristallin. La solution est une combinaison linéaire de fonctions d'onde  $\psi_1$  et  $\psi_2$ .

Comme  $\psi_1$  et  $\psi_2$  forment une base orthogonale, on peut résoudre Schrödinger en séparant les variables par  $\psi_1$  et  $\psi_2$ .

Résolution de Schrödinger pour  $\psi_1$  :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi_1 = E \psi_1$$

Pour le potentiel, comme l'onde  $\psi_1$  est progressive, il faut considérer le potentiel de 1<sup>er</sup> ordre renforcé par Bloch, c'est-à-dire celui correspondant au potentiel en  $G = \frac{2\pi}{a}$ .

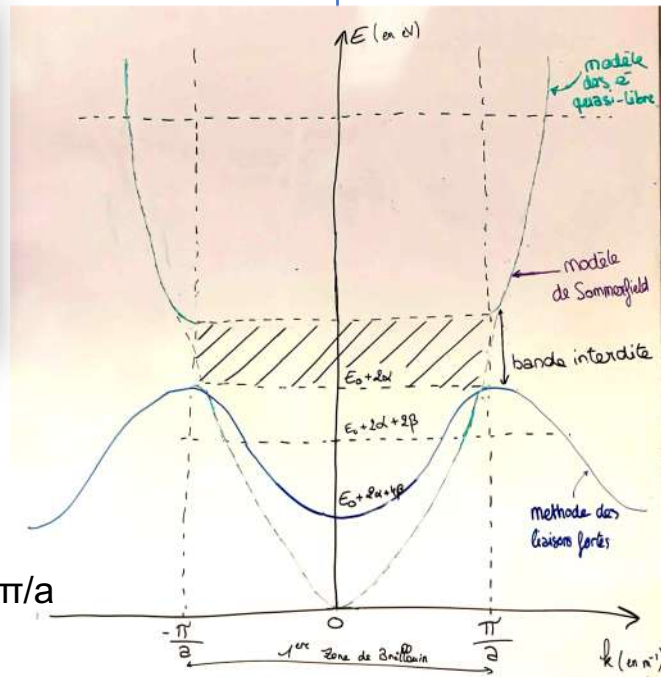
Comprendre et compléter

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{sauf en } \frac{\pi}{a} \text{ et } -\frac{\pi}{a}$$

$$E_{\text{gap}} = 2V_{2\pi/a}$$

Intérêt : comprendre la physique du « gap »  
 Modèle : pas très précis  
 Calcul : facile

### Défi n°2 Modèle des liaisons fortes à 1D



Comparer

Handwritten mathematical derivations for the tight-binding model, including the Schrödinger equation and the definition of hopping integrals  $\alpha$  and  $\beta$ .

$$E = E_0 + 2\alpha + 2\beta \cos(ka)$$

Comprendre et compléter

$$E(k) = E_0 + 2\alpha + 2\beta \cos(ka)$$

$\alpha$ : intégrale coulombienne  
 $\beta$ : intégrale d'échange

Intérêt : connaître un modèle important  
 Modèle : précis pour les couches 2s et 2p  
 Calcul : difficile

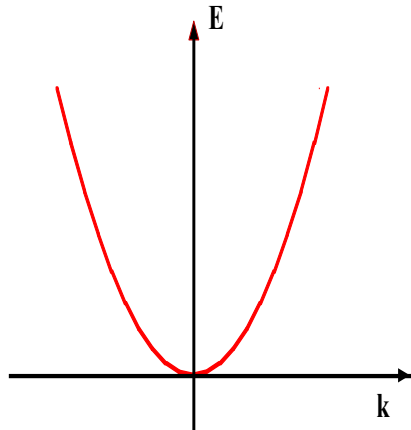
# 3. Notre approche – c) D'un modèle à l'autre

## Bilan de l'approche « d'un modèle à l'autre »

### Modèle des électrons libres

(Sommerfeld)

Electrons libres dans une boîte



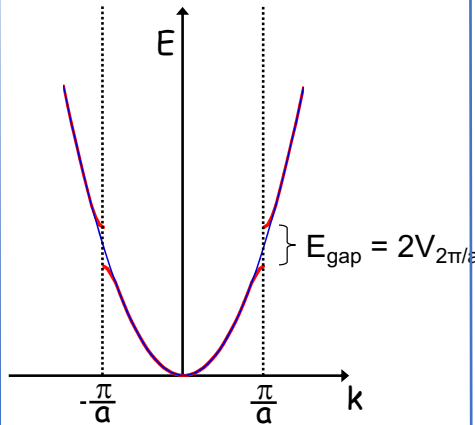
$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Quantification du vecteur d'onde  $k$

Modèle simple  
Modèle pas précis

### Modèle des électrons quasi-libres

Electrons libres sauf pour des valeurs de  $k$  connues



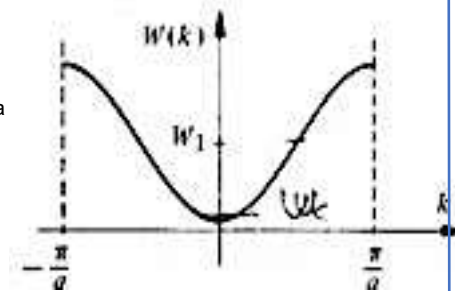
En  $\pi/a$  et  $-\pi/a$   
 $E_{gap} = 2V_{2\pi/a}$

Lien entre périodicité des  $e^-$  et celle du réseau des atomes

Modèle limité  
Explication de l'origine du gap

### Modèle des liaisons fortes

Electrons avec une LCAO des 1<sup>er</sup> atomes voisins



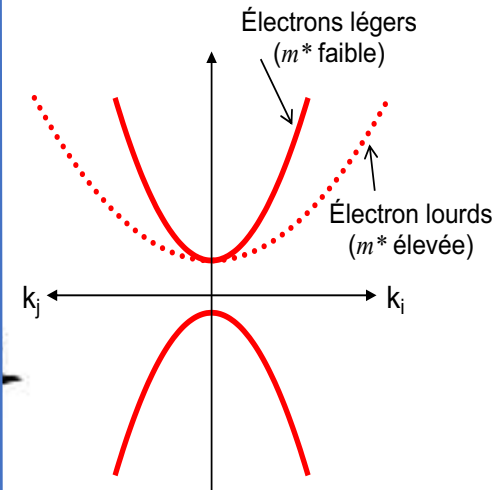
$$E(k) = E_0 + 2\alpha + 2\beta \cos(ka)$$

Lien entre Bande d'énergie = Orbitale Atomique

Modèle complexe à calculer  
Modèle assez précis pour les électrons de cœur (2s, 2p)

### Modèle des masses effectives

Modif. de masse des électrons liée à l'interaction avec le réseau des atomes



$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

Intro aux méthodes empiriques (modèle  $k.p$ )

Modèle simple  
Modèle qui « colle » à l'expérience



*Support d'étude  
pour la modélisation*

**Modélisation des électrons  
dans la matière**



*Propriétés thermiques*

*Propriétés électriques*

*Propriétés optiques*

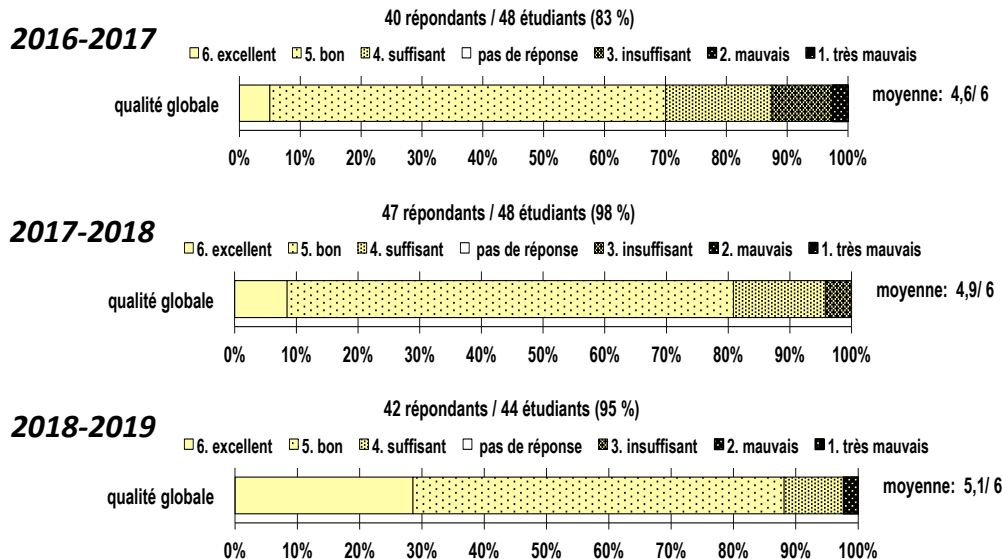
*Plan de l'exposé*

## **4. Analyse du dispositif APP**

- a. Retour des étudiants sur 3 années*
- b. Bilan sur les notes*
- c. Le passage en distanciel*

# 4. Analyse dispositif APP– a) Retour des étudiants

## Satisfaction des étudiants



### Après 3 ans:

- 95% des étudiants adhèrent au dispositif APP
- 30% des étudiants trouvent le dispositif APP « Excellent »

### Point de vigilance des APP:

**10-15% de groupes dysfonctionnent**

### Ce que j'ai aimé :

- Travail en groupe (95% satisfait)
- Dispositif/organisation des APP
- Engagement/disponibilité des enseignants
- Entreaide/Bonne ambiance

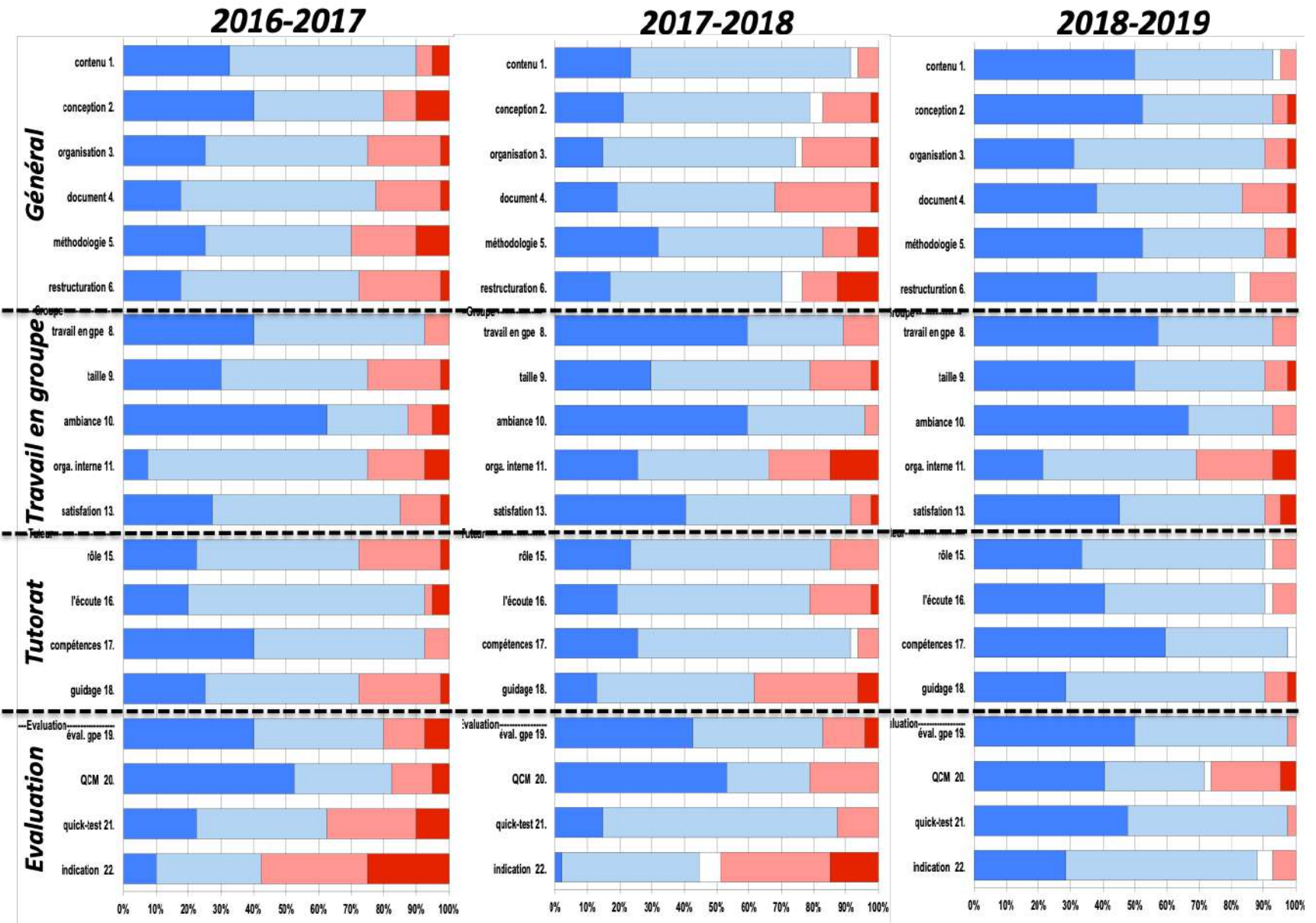
### Ce que je n'ai pas aimé :

- Manque d'exercice, préparation à l'examen
- Certains étudiants peu investis
- Pas assez de réponses de la part des enseignants

### Actions réalisées :

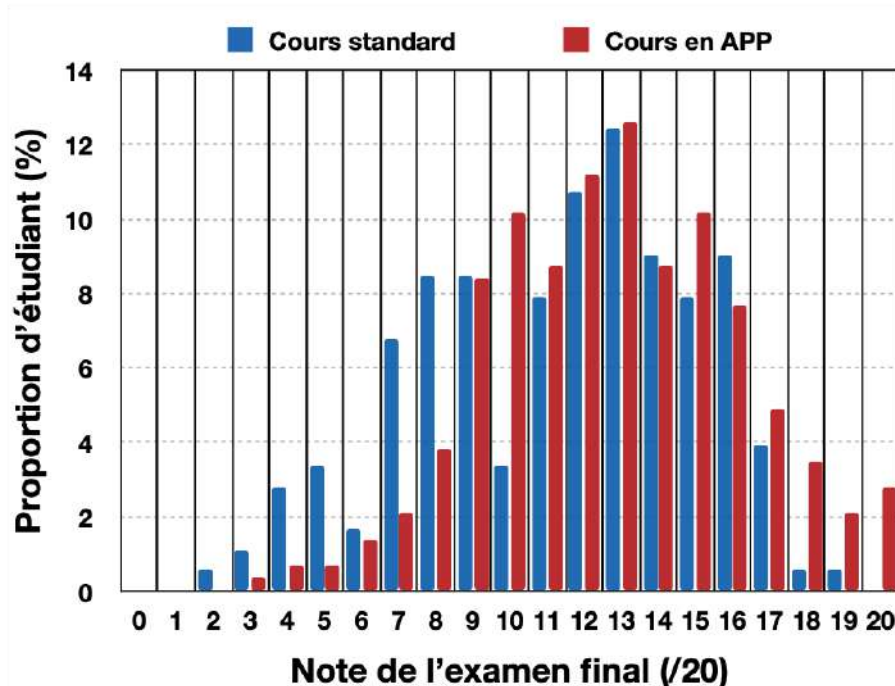
- Séance de clôture avec exercices d'examen
- Enseignants disponibles pendant le travail personnel
- Sujets qui ciblent mieux les apprentissages

# 4. Analyse dispositif APP– a) Retour des étudiants



# 4. Analyse dispositif APP – b) Bilan sur les notes

## Résultat à l'examen terminal avant et après les APP



Statistiques faites :

- sur 2 ans pour le cours standard
- sur 3 ans pour le cours en APP

Avec les APP:

- Notes <7 : 15% → 5%
- Notes <10 : 34% → 17%
- Notes >18 : 0% → 8%

Moyenne:  
+0,93 /20

A retenir :

- 1/6 des étudiants en-dessous de la moyenne (au lieu de 1/3)
- Réduction par 2-3 du nombre d'étudiants en grande difficulté (<7/20)
- D'excellentes notes > 18/20 possibles (5-10%)

# 4. Analyse dispositif APP – conclusion

## A retenir au bout de 3 ans :

- Forte adhésion des étudiants au dispositif pédagogique malgré un cours théorique difficile (95%)
- Amélioration des résultats de l'examen terminal
- Plaisir de collaborer/d'échanger entre 2 enseignants de disciplines différentes

→ Extension des APP à la « Physique des Semiconducteurs »

### Initiation méthode APP/Travail groupe

APP 0: « Apporter votre grain de sable ! »

### Cours : Liaisons chimique

APP 1: « Les deux font la paire »

APP 2: « Le carbone dans tous ses états »

### Cours : Physique du Solide

APP 3: « À plusieurs, on est plus fort »

APP 4: « Mind the gap! »

**Depuis 2019**

### Cours : Semiconducteurs et dispositifs

APP 5: « Vive le dopage »

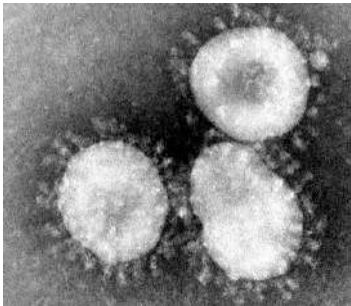
APP 6: « La jonction P-N, une idée lumineuse! »

APP 7: « Le transistor MOS: une révolution infiniment petite ».

Mi-Janvier → début Avril

# 4. Analyse dispositif APP – c) le passage au distanciel

## Comment passer les APP en enseignement à distance ?



**J4** AVEC L'ENSEIGNEMENT À DISTANCE LE PROF N'EST PLUS SEUL

**Année 2019-2020:**

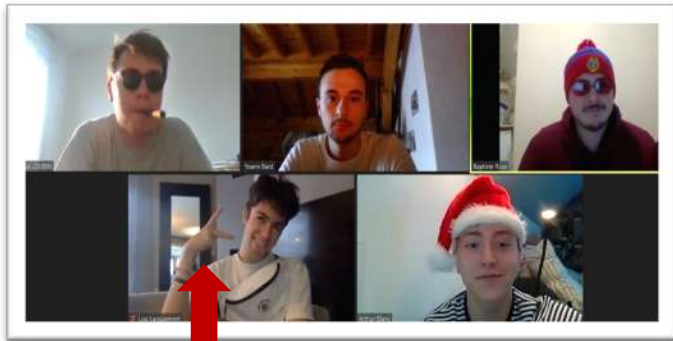
- 50% en distanciel improvisé
- Google-Drive/Discord

**Année 2020-2021:**

- 100 % en distanciel anticipé
- Google-Drive/Zoom

# 4. Analyse dispositif APP – c) le passage au distancié

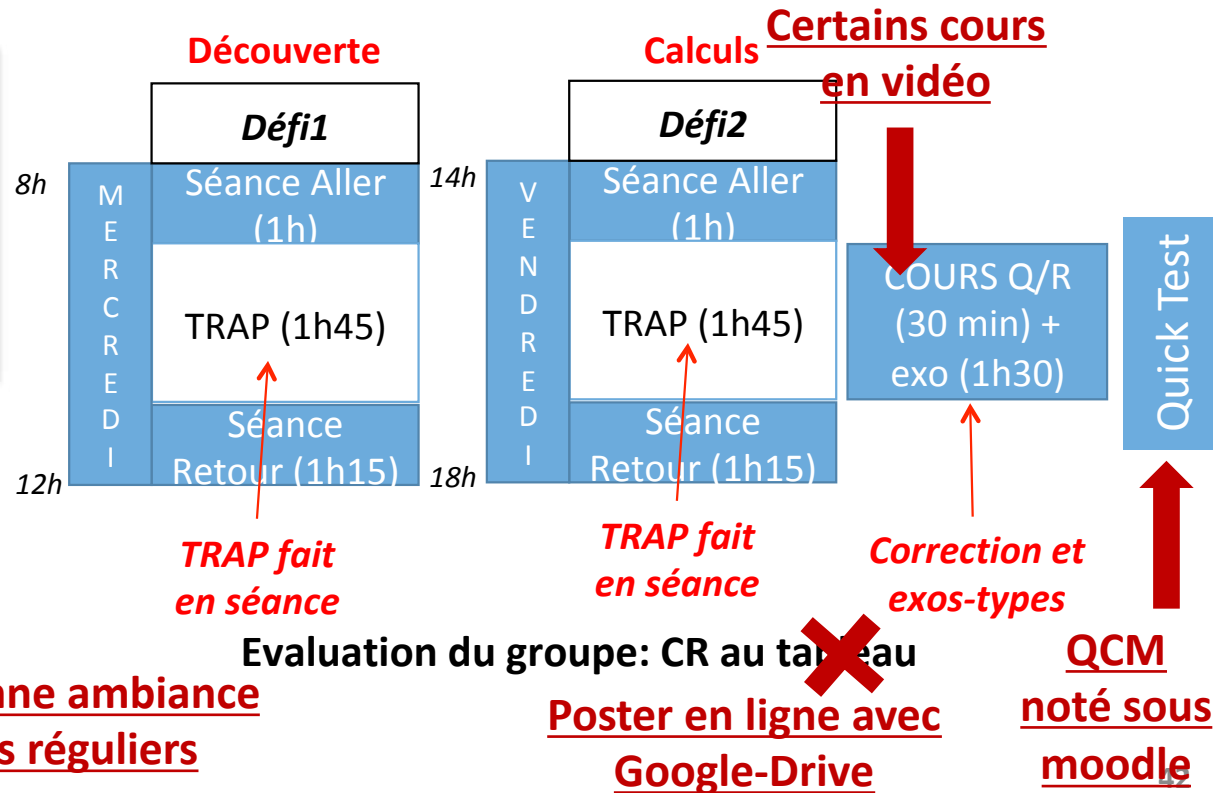
## Le groupe



Création de salles de travail dans Zoom avec possibilité d'appeler l'enseignant

Humour – Bonne ambiance + Sondages réguliers

## L'organisation d'une séquence APP





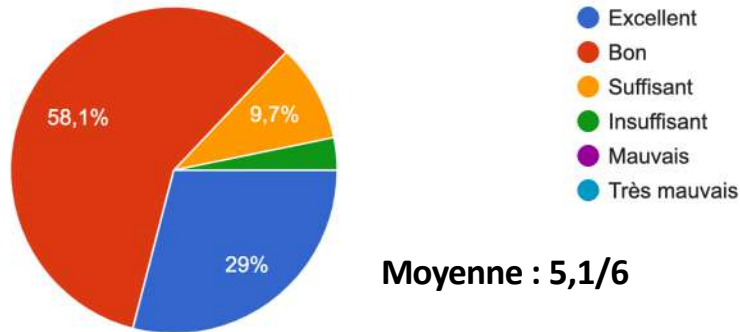
# 4. Analyse dispositif APP – c) le passage au distanciel

## Satisfaction des étudiants

31 /40 étudiants (taux de réponse: 78%)

Dans l'ensemble, vous estimez que cet enseignement à distance a été :  
31 réponses

2020-2021  
Distanciel



## Résultat à l'examen terminal

Comparaison note APP présentiel/distanciel:

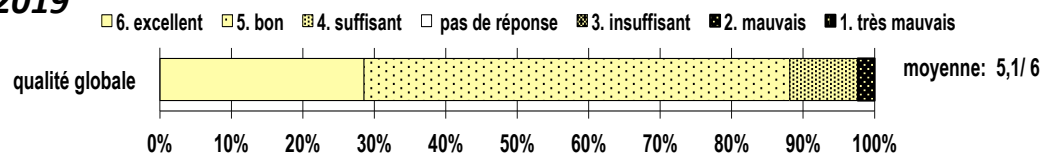
- Notes <7 : 5 % → 5%
- Notes <10 : 17% → 22 %
- Notes >18 : 8% → 10%

Moyenne 2018-2019  
(APP en présentiel)  
13,23/20

Moyenne 2020-2021  
(APP en distance) :  
12,92/20

2018-2019

42 répondants / 44 étudiants (95 %)



*Support d'étude  
pour la modélisation*

**Modélisation des électrons  
dans la matière**

*Propriétés thermiques*

*Propriétés électriques*

*Propriétés optiques*

## Plan de l'exposé

### 5. Pistes pour pratiquer la modélisation avec les étudiants

- a. *Travail autour de la notion d'un modèle*
- b. *Approches pédagogiques autour de la modélisation*

# 5. Pistes – a) Travail sur la notion d'un modèle

## Lien entre un modèle et le réel

- Un modèle ne décrit pas exactement le réel
- Un modèle peut être prédictif sans pour autant correspondre au réel

*Ex. les quasi-particules : modification de la masse de l'électron pour pouvoir utiliser un modèle simple et être prédictif, mais sans lien avec le réel*

→ **Equilibre entre simplicité et réalité physique complexe**

---

## Limites d'un modèle

- Un modèle s'appuie sur des hypothèses simplificatrices
- Tester le modèle dans des situations extrêmes

→ **Etre bien conscient des limites du modèle**

---

## D'un modèle à l'autre

Pour affronter la complexité:

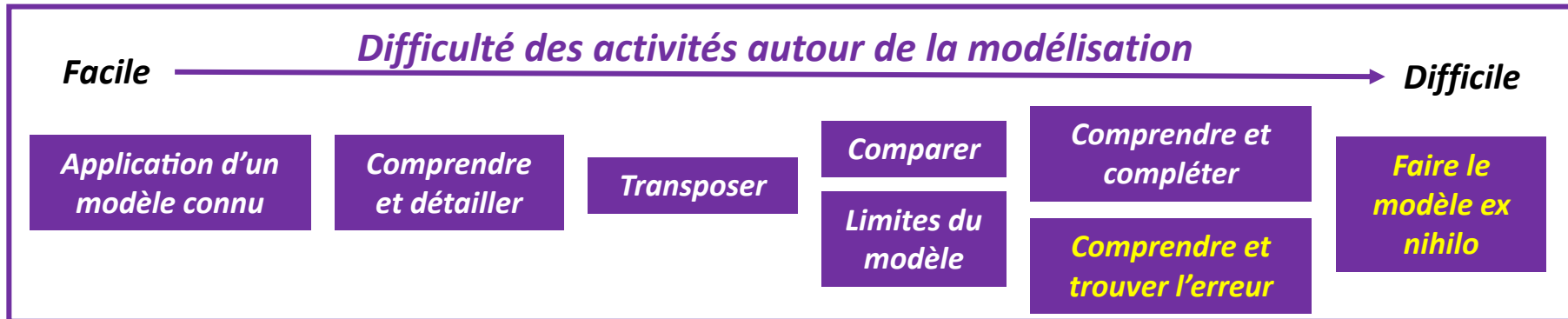
- on part du modèle le plus simple
- on complexifie le modèle quand cela est nécessaire
- Introduction de modèles en rupture parfois nécessaire

→ **Etre capable de choisir et de changer de modèle selon les situations**

# 5. Pistes – b) Approches pédagogiques

## Modélisation = activité d'apprentissage complexe

- Approche graduelle « *en marche d'escalier* » permettant d'accéder à la complexité
- Grande diversité des activités possibles pour initier à la modélisation :



- Le travail en groupe : intéressant et motivant pour affronter la complexité
- Le travail sur tableau : support idéal pour partager les idées, les calculs et pratiquer l'essai-erreur (« *The greatest teacher, failure is* »)
- 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 (*les étudiants ont tendance à chercher des solutions de facilité*). Valoriser l'effort et le plaisir de la découverte par la modélisation.