

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

Christophe Durand
Université Grenoble Alpes,
Enseignant-Chercheur à Polytech Grenoble, Laboratoire CEA/IRIG/PHELIQS

Les électrons vont déterminer la plupart des propriétés de la matière, comme les propriétés thermiques, électriques ou optiques. L'enjeu est de savoir modéliser ces électrons 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 (10^{24} cm⁻³). Le calcul exact étant limité à une centaine d'électrons, il est nécessaire de faire des fortes approximations (méthode des perturbations, méthode des liaisons fortes, ...).

Dans les laboratoires, cette modélisation se base sur des méthodes *ab initio* complexes qui font l'objet de recherches encore actives aujourd'hui. On peut citer les deux approches dites du « champ moyen » et « perturbative », qui peuvent être mises en œuvre seulement par des experts. Récemment, un outil de simulation appelé *Nextnano* a été développé permettant à la communauté des chercheurs d'avoir accès à un modèle assez simple à mettre en œuvre pour décrire de manière réaliste les observations expérimentales.

Dans ce contexte se pose la question de comment enseigner cette modélisation si complexe des électrons, d'autant plus que la modèle de l'atome isolé est fortement ancrés chez les étudiants. Pour lever ces résistances, nous avons fait un double choix. Premièrement, un choix épistémologique en introduisant une approche graduelle des atomes non-isolés en partant de 2 atomes, puis 4, puis 22, jusqu'à 10^{24} . 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 pour opérer ce changement d'échelle. Deuxièmement, un choix pédagogique en utilisant l'Apprentissage Par Problème (APP). Cette pédagogie socio-constructiviste permet de dépasser l'obstacle épistémologique de l'atome en interaction en marquant les esprits des étudiants à travers des conflits cognitifs, qui imposent de passer d'un modèle à un autre plus complexe, mais plus réaliste. Nous décrivons la mise en œuvre de l'APP et les résultats sur les ressentis et les notes des étudiants avant et après la mise en place de l'APP (Dare et al. 2021). Cette approche graduelle « *d'un modèle à l'autre* » permet de réfléchir sur la notion de modèles et de leurs limites, de changer en profondeur la représentation des électrons dans les solides et de rendre accessible aux étudiants la complexité de cette modélisation.

Référence

Darie, C.; Durand, C. *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 Ann. QPES 2021, 1 (3).*
<https://doi.org/10.14428/qpes.v1i3.62123>.