

vivre et de travailler pendant un certain temps dans un autre pays. C'est le cas en particulier pour les pays membres de la Communauté Économique Européenne dans lesquels on a supprimé les anciennes barrières pour l'inter-emploi des travailleurs. A l'heure actuelle, il y a au moins deux Universités et deux Polytechniques où l'on poursuit, de façon très active, le placement à l'étranger à des fins industrielles des étudiants des cours sandwichs.

Les places de stages industriels à l'intérieur des autres pays membres de la CEE, ne sont pas faciles à obtenir, ce que nous pouvons

sans doute attribuer en partie au manque de connaissance et d'expérience qui existe des cours sandwichs, tels qu'ils fonctionnent au Royaume-Uni. En France, par exemple, l'idée d'un stage d'un mois ou deux pour un étudiant est généralement acceptée. Par contre, un stage de six mois ou d'un an, toujours pour un étudiant, est totalement méconnu des industriels français, à l'exception des sociétés qui ont déjà accepté des étudiants britanniques. Selon l'expérience de l'auteur, dès qu'une société apprécie à leur juste valeur la nature et les buts des cours sandwichs, et les compétences des étudiants, on peut souvent négocier une place. Il va de

soi, qu'il est essentiel pour les professeurs et les étudiants d'avoir une connaissance raisonnable de la langue étrangère appropriée. Après avoir travaillé à l'étranger les étudiants reviennent avec une connaissance d'un mode de vie différent (tant dans leur travail qu'au dehors), avec une solide connaissance d'une langue étrangère, et une confiance en soi accrue, et l'on espère que cela leur donnera plus de débouchés dans leur futur emploi. De tels avantages valent, très certainement, l'effort supplémentaire fourni pour obtenir les places qui conviennent le mieux.

Appendice

1. Les universités qui étaient auparavant des Collèges de Technologie Avancée sont les suivantes : Aston à Birmingham, l'Université de Technologie de Bath, Bradford, Brunel, City, Heriot-Watt, l'Université de Technologie de Loughborough, Salford, Strathclyde, Surrey et l'Institut des Sciences et Technologie de l'Université du Pays de Galles.

2. Les diplômes de Bachelor of Science (BSc) sont décernés par les Universités britanniques, chaque université étant responsable de

la validation de ses diplômes. Le BSc représente approximativement le même niveau d'études que le diplôme de maîtrise d'une Université française ou que le Diplôme d'ingénieur d'une Grande École. Aucune distinction acceptable à l'échelon national n'a encore été faite dans le titre du diplôme obtenu par un étudiant qui a suivi un cours sandwich et un autre qui a suivi un cours conventionnel.

3. Les Polytechniques forment un groupe

d'établissements d'enseignement supérieur qui entrèrent en fonctions après 1967. Ils diffèrent des Universités en ce qu'ils ne sont pas uniquement concernés par les études menant à la licence, maîtrise ou diplômes supérieurs, mais par une large gamme d'autres études et de qualifications. Une de leurs responsabilités, qui n'est certes pas la moindre, est d'offrir des cours aux étudiants à mi-temps.

Une introduction à l'étude des orbitales atomiques*

par Jean-Pierre Jolivet¹, Daniel Cabrol² et Nicole Lombroso-Bader³

(¹ Université Pierre et Marie Curie, 4, place Jussieu, 75230 Paris Cedex 05, Laboratoire de chimie des polymères inorganiques ;
² Université de Nice, Parc Valrose, 06034 Nice Cedex, Laboratoire de biophysique et ³ Université Pierre et Marie Curie, 4, place Jussieu, 75230 Paris Cedex 05, Laboratoire de chimie physique du CNRS, BP 28, 94320 Thiais.)

Les notions de probabilité de présence d'un électron et d'orbitale atomique sont souvent abordées en première année de premier cycle, en introduction à l'étude de la liaison covalente.

Une des raisons qui rendent cet enseignement difficile est son caractère abstrait, lié moins à la nature même des notions enseignées qu'à la difficulté de pouvoir les illustrer par des schémas simples. C'est pourquoi nous avons tenté de fournir un support matériel à cet enseignement. Il consiste en une série de trente-trois diapositives en couleur, accompagnées de fiches qui en précisent le contenu ainsi que les codes (couleurs, graphismes, etc...) adoptés pour visualiser les concepts présentés.

Ces diapositives illustrent essentiellement :

- les notions de densité de probabilité et de densité de probabilité radiale,
- la symétrie sphérique des orbitales s,
- les propriétés directionnelles des orbitales p,
- l'équivalence entre des systèmes d'orbitales pures et des systèmes d'orbitales hybrides.

Il est certain que l'aperçu de ce document, que nous présentons ici imprimé en noir et blanc, ne rend compte que très imparfaitement des effets obtenus avec des diapositives en couleur.

I. Notion de densité de probabilité de présence

Les représentations ont pour objet de faire apparaître la différence entre :

- densité de probabilité,
- densité de probabilité radiale

en considérant l'électron de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental (décrit par une orbitale ψ_{1s}).

Afin d'illustrer et de concrétiser ces notions, nous avons établi un

parallèle entre densité de probabilité et intensité de coloration d'une solution.

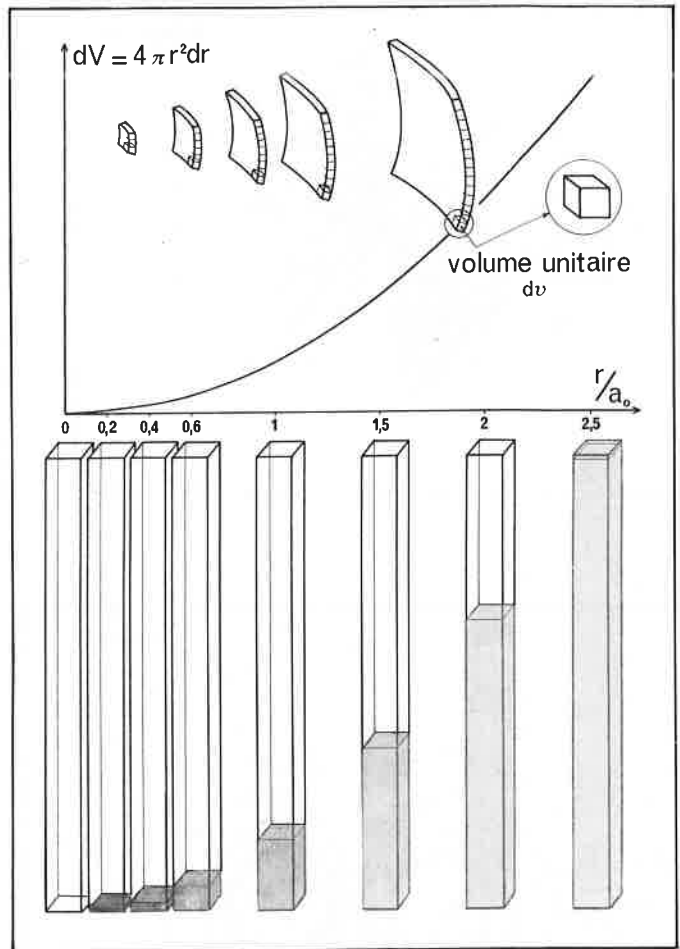
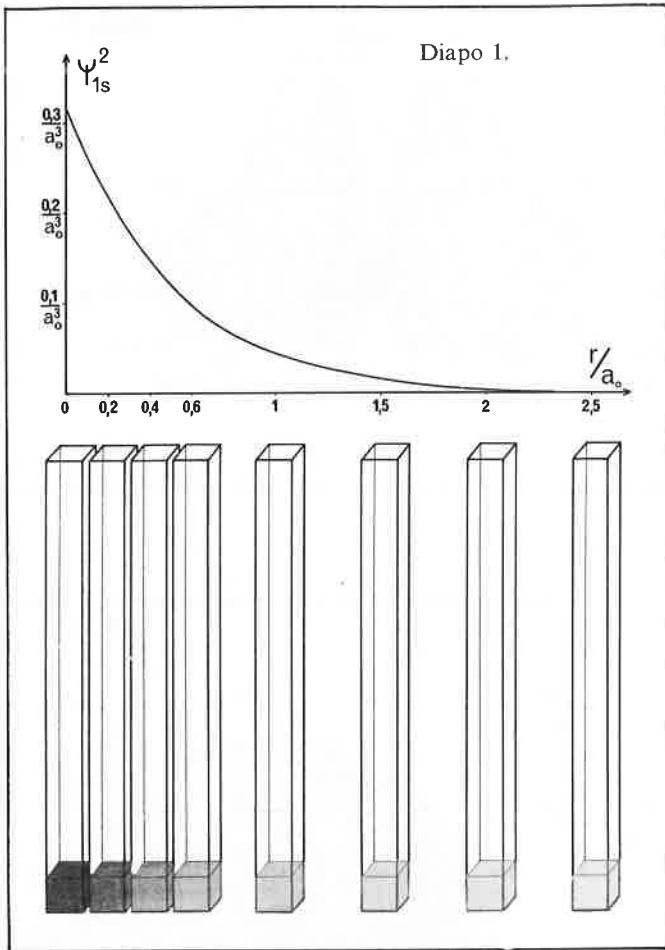
Nous rappellerons que l'intensité de coloration d'une solution dépend :

- de sa concentration en substance colorée,
- de l'épaisseur de liquide à travers laquelle est faite l'observation.

En faisant varier un seul de ces facteurs, la concentration, on pourra utiliser les intensités de coloration d'une série de solutions pour représenter la variation (en fonction de la distance au noyau) de la densité de probabilité.

En faisant varier simultanément les deux facteurs (concentration et épaisseur de liquide traversé), on pourra au contraire utiliser l'intensité de la coloration pour représenter la variation (en fonction de la distance au noyau) de la densité de probabilité radiale.

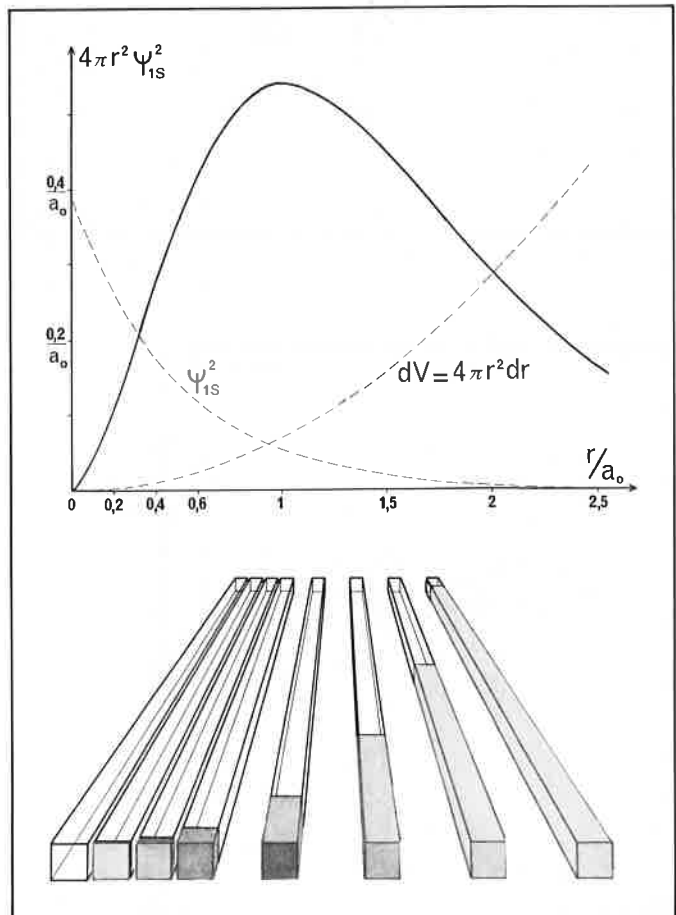
* Ce document a fait l'objet de discussions dans le cadre des réunions de RECODIC, groupe « Multimedia ». Il est actuellement diffusé par le Centre Universitaire de Diffusion de Nouveaux Media d'Enseignement (C.U.D.N.M.E.) Université de Poitiers, Faculté des Sciences Fondamentales et Appliquées, 40 avenue du Recteur Pineau, 86022 Poitiers Cedex.

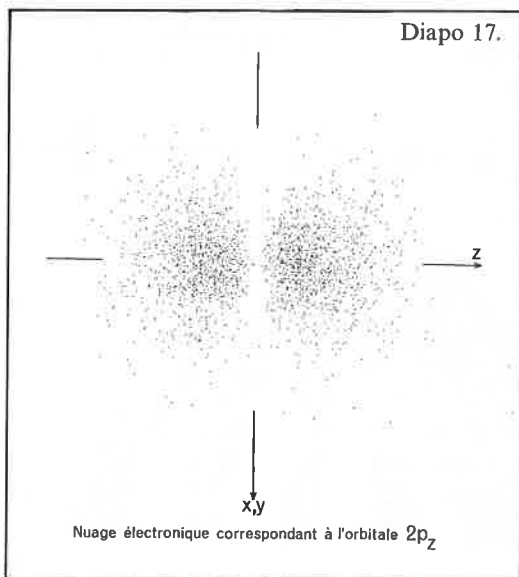
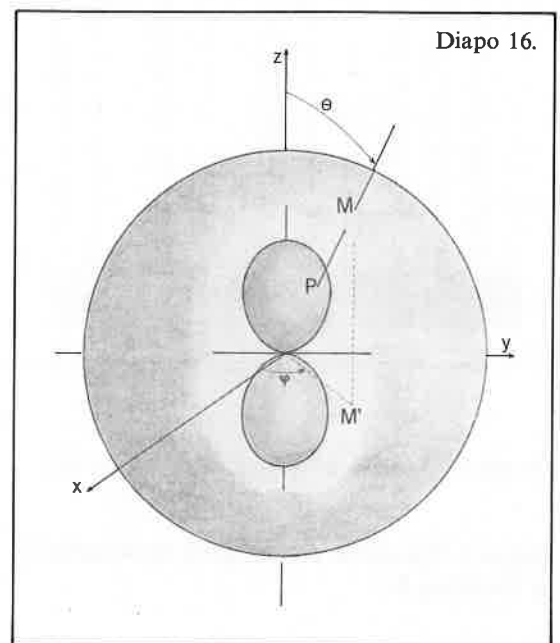
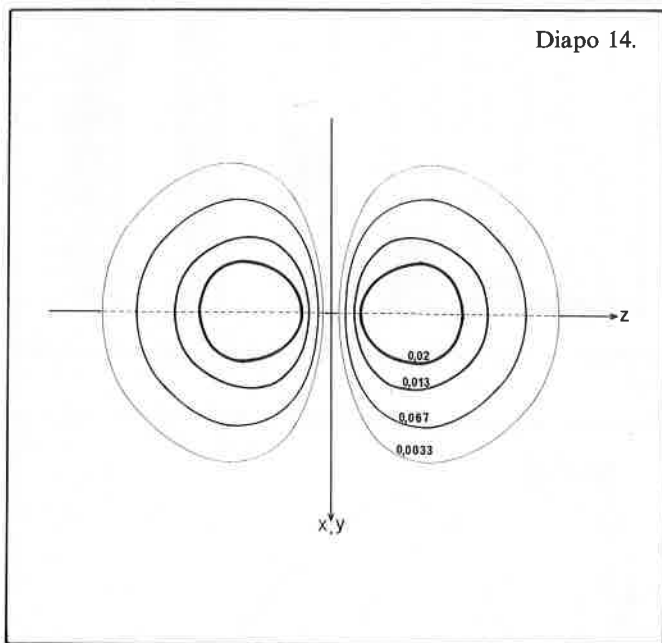
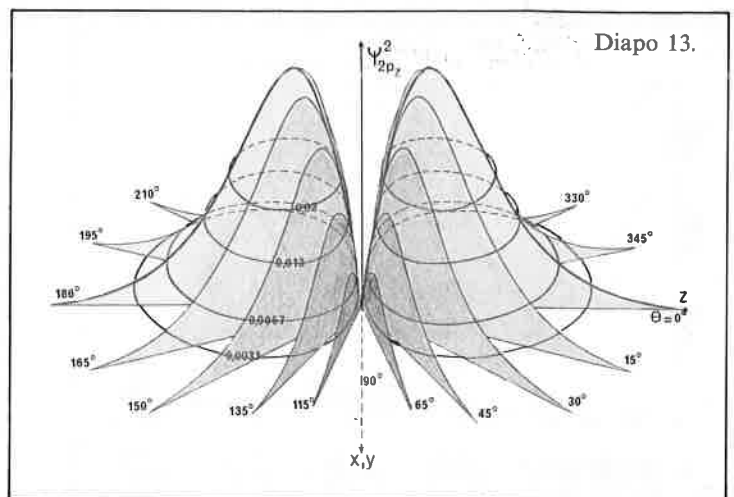
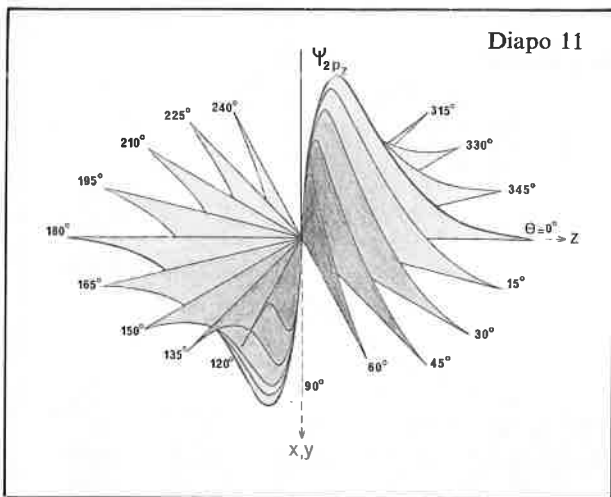


Diapo 1. Densité de probabilité $\frac{dP}{dV} = \psi_{1s}^2$

Diapo 2. Variation de l'élément de volume $dV = 4\pi r^2 dr$ en fonction de r

Diapo 3. Densité de probabilité radiale $\frac{dP}{dr} = 4\pi r^2 \psi_{1s}^2$





Diapo 11 : $[\psi_{2p_z} = f(r)]_{\theta=Cte}$

Diapo 13 : $\begin{cases} [\psi_{2p_z}^2 = f(r)]_{\theta=Cte} \\ [\psi_{2p_z}^2 = Cte] \end{cases}$

Diapo 14 : Projection sur le plan yoz (ou xoz) des lignes d'isodensité électronique.

Diapo 16 : $[\psi_{2p_z}^2 = f(\theta)]_{r=Cte}$

Diapo 17 : Nuage électronique.

Diapo 1 : Densité de probabilité $\frac{dP}{dV} = \psi_{1s}^2$

a) La courbe (figure du haut) représente la variation de ψ_{1s}^2 en fonction de r , r étant la distance au noyau du volume unitaire dV dans lequel on recherche l'électron (r est exprimé en unités a_0).

b) Dans des tubes identiques (figure du bas) placés à des distances indiquées sur le diagramme et observés de face, on a représenté des volumes égaux de solution dont la concentration, et par conséquent l'intensité de coloration, varie proportionnellement à ψ_{1s}^2 .

La variation de l'intensité de la coloration dans la série de tubes permet donc de visualiser la variation de la fonction $\psi_{1s}^2 = f(r)$.

Densité de probabilité radiale

Au lieu de considérer la densité de probabilité, c'est-à-dire la probabilité de présence de l'électron dans l'unité de volume dV à une distance r du noyau, on peut, en raison de la symétrie sphérique du modèle, considérer la probabilité de présence dans l'élément de volume dV compris entre les sphères de rayon r et $r + dr$. (dV représente un ensemble de volumes élémentaires d'autant plus important que r est plus grand).

$$dP_{\text{rad}} = \psi_{1s}^2 \cdot dV = 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 dr.$$

La densité de probabilité radiale est alors

$$\frac{dP_{\text{rad}}}{dr} = 4\pi r^2 \psi_{1s}^2$$

Diapo 2 : Variation de l'élément de volume

$$dV = 4\pi r^2 dr \text{ en fonction de } r$$

La courbe (figure du haut) représente la variation du volume dV en fonction de r . Des coupes représentant une partie de l'élément de

volume dV compris entre les sphères de rayon r et $r + dr$ montrent l'accroissement rapide du nombre de volumes unitaires compris dans dV à mesure que r augmente.

L'illustration de cette variation est représentée sur la figure du bas. Les concentrations des solutions sont identiques à celles des tubes représentés sur la diapo 1. Seul le volume de liquide contenu dans les tubes augmente, en fonction de r , proportionnellement à dV . Les colorations des solutions sont donc identiques à celles de la diapo 1 et restent proportionnelles à ψ_{1s}^2 .

Diapo 3 : Densité de probabilité radiale

$$\frac{dP}{dr} = 4\pi r^2 \psi_{1s}^2$$

La courbe (trait plein, figure supérieure) représente la variation de la densité de probabilité de présence radiale en fonction de la distance r . Cette fonction est le produit des deux fonctions de la même variable r rappelées en pointillés : l'une décroissante $\psi_{1s}^2 = f(r)$, l'autre croissante $dV = g(r)$. Leur produit présente un maximum pour la valeur $r = a_0$.

Sur le schéma inférieur l'observation des tubes *par le fond* permet de visualiser directement le produit des deux fonctions : l'intensité de coloration observée est due en effet simultanément :

- à la coloration des solutions qui décroît avec r proportionnellement à ψ_{1s}^2 ,
- à l'observation de la coloration à travers une épaisseur de liquide de plus en plus grande puisqu'elle croît proportionnellement à dV .

Un maximum de coloration apparaît alors nettement pour une distance $r = a_0$.

II. Étude de l'orbitale $2p_z$ de l'atome d'hydrogène

La difficulté de représenter les fonctions orbitales ψ ou leur carré ψ^2 est liée au fait que ces fonctions dépendent en général de trois variables d'espace x, y, z (ou r, θ, ϕ , lorsque l'on utilise les coordonnées sphériques). La représentation complète de ces fonctions nécessite ainsi un espace à 4 dimensions. Disposant seulement d'un « support » bidimensionnel, l'utilisation de la perspective ou de la projection permet au mieux de faire apparaître une troisième dimension. C'est pourquoi il est nécessaire, pour décrire une orbitale, d'utiliser plusieurs représentations.

Nous avons limité l'étude à l'orbitale $2p_z$ de l'atome d'hydrogène. Son expression est indépendante de ϕ . On peut alors réaliser les représentations suivantes :

ψ^2 (ou ψ)	r	θ	Représentations
variable	variable	constant	$[\psi \text{ ou } \psi^2 = f(r)]_{\theta=Cte}$
variable	constant	variable	$[\psi \text{ ou } \psi^2 = f(\theta)]_{r=Cte}$
constant	variable	variable	$\psi^2 = Cte$ (isodensité)

Diapo 11 : $[\psi_{2p_z} = f(r)]_{\theta=Cte}$

On a représenté la variation de la fonction orbitale ψ_{2p_z} en fonction de r pour différentes valeurs de l'angle θ . Le point autour duquel on recherche l'électron est situé soit sur l'axe Oz ($\theta = 0$) soit dans le plan yOz en dehors de l'axe Oz ($\theta \neq 0$).

L'invariance de la fonction ψ_{2p_z} avec ϕ se traduit par la permutation possible des plans yOz et xOz .

Les zones rouges correspondent à des valeurs positives de ψ_{2p_z} , les vertes aux valeurs négatives de ψ_{2p_z} , $\left(\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{3\pi}{2}\right)$.

Diapo 12 : $[\psi_{2p_z}^2 = f(r)]_{\theta=Cte}$

Variation de la densité de probabilité $\psi_{2p_z}^2$ en fonction de r pour différentes valeurs de θ .

Le principe de la représentation est identique à celui de la diapo 11.

Diapo 13 :

$$[\psi_{2p_z}^2 = Cte] \text{ Lignes d'isodensité électronique}$$

Sur la même figure que la précédente, on a tracé les contours correspondant à des valeurs égales de la densité de probabilité $\psi_{2p_z}^2$.

Diapo 14 : $[\psi_{2p_z}^2 = Cte]$ Projection sur le plan yOz (ou xOz) des lignes d'isodensité

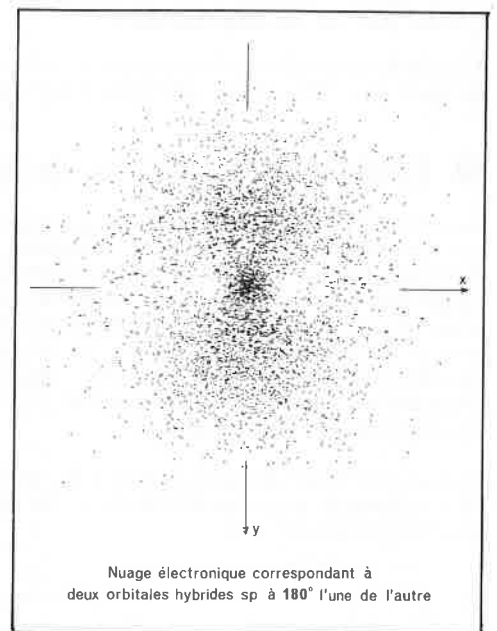
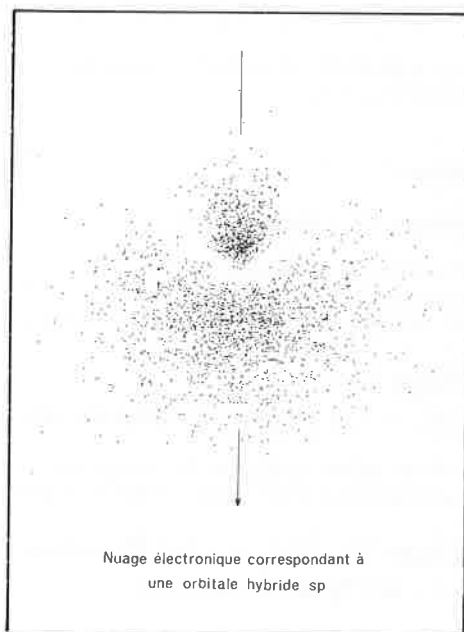
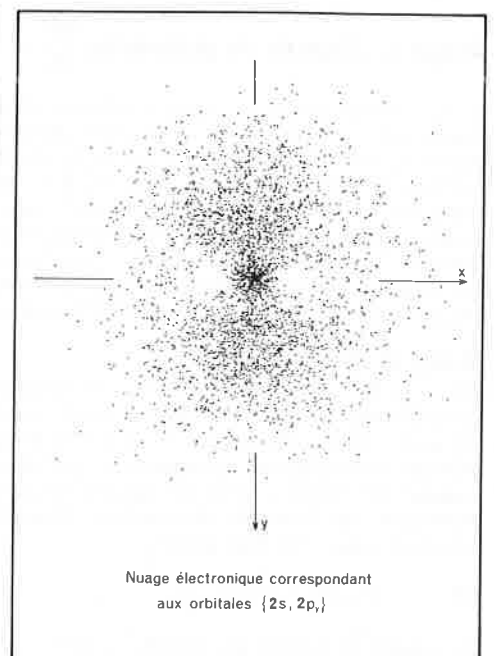
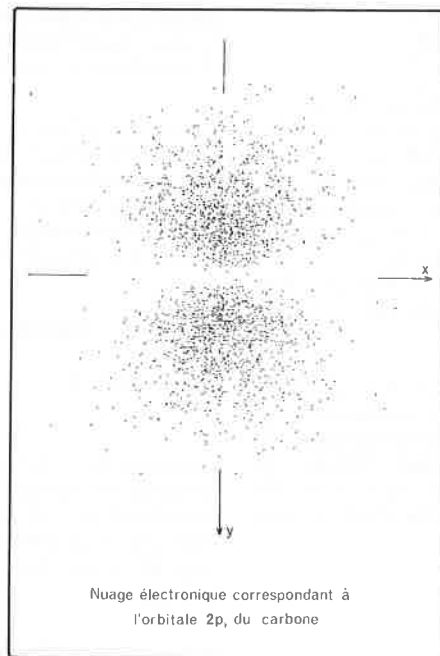
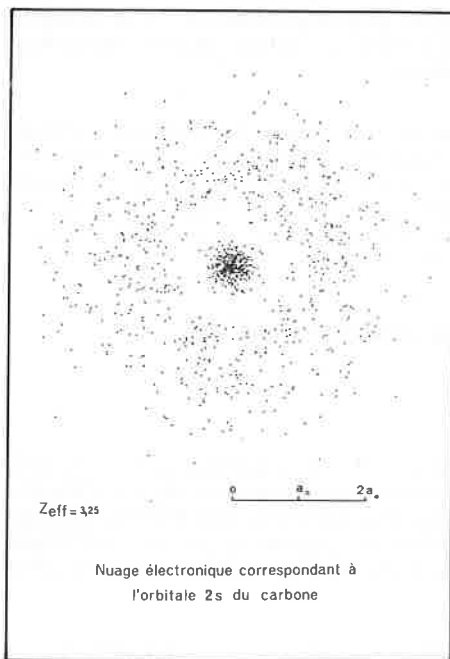
L'épaisseur du trait traduit les différentes valeurs de $\psi_{2p_z}^2$.

N.B. Devant l'impossibilité d'avoir une représentation simple des orbitales $2p$, ces lignes d'isodensité semblent la meilleure façon de les symboliser.

Diapo 15 : $[\psi_{2p_z} = f(\theta)]_{r=Cte}$. Représentation de la partie angulaire de la fonction orbitale ψ_{2p_z} [$\psi_{2p_z} = A \cos \theta$]

La distance au noyau, r , du point M autour duquel on recherche l'électron, demeure constante mais la direction dans laquelle on recherche l'électron (angle θ) varie. Le point M décrit donc la surface d'une sphère (en grisé sur la diapo).

Pour chaque direction de recherche, on porte sur l'axe OM correspondant un segment OP représentant la valeur de la partie angulaire ($\cos \theta$) de la fonction ψ_{2p_z} . Le point P décrit alors la surface des sphères rouge (valeurs positives de $\cos \theta$) et verte (valeurs négatives de $\cos \theta$).



L'absence de dépendance de φ entraîne une symétrie de révolution de la figure.

Diapo 16 : $[\psi_{2p_z}^2 = f(\theta)]_{r=Cte}$. **Représentation de la partie angulaire de la densité de probabilité $\psi_{2p_z}^2$**

La représentation est basée sur le même principe que précédemment (diapo 15).

III. Hybridation des orbitales atomiques (cas des orbitales $n = 2$ de l'atome de carbone)

L'hybridation des orbitales atomiques est une transformation mathématique qui permet de remplacer un ensemble d'orbitales par un autre ensemble obtenu par combinaison linéaire des premières. L'intérêt de cette transformation est d'obtenir des orbitales dont les directions principales coïncident avec celles des liaisons de la molécule que l'on cherche à décrire.

La série de diapositives a pour but de montrer l'équivalence des ensembles d'orbitales s , p_x , p_y et des orbitales hybrides obtenues par combinaison linéaire de ces dernières.

Nous ne présenterons ici que le cas de l'hybridation sp .

Diapos 18, 19 : Représentation des orbitales $2s$, $2p_y$

Les représentations sont effectuées selon le principe déjà décrit (diapo 17).

Diapo 17 : Nuage électronique correspondant à l'orbitale $2p_z$

Ce diagramme représente une coupe du nuage par un plan passant par le noyau (ce dernier se trouve au centre du carré). Il est tracé à l'ordinateur et contient 2 000 points formant un nuage dont la densité n'est pas uniforme; elle est proportionnelle à la densité de probabilité de présence ψ^2 .

Le plan de coupe du nuage contient l'axe z . L'invariance de la fonction $\psi_{2p_z}^2$ avec φ entraîne une symétrie de révolution autour de l'axe Oz .

Diapo 27 : Nuage électronique $\{2s, 2p_y\}$

Le nuage électronique correspondant à deux électrons de valence décrits respectivement par les orbitales $2s$ et $2p_y$ (ou $2p_x$) peut être représenté par superposition des figures correspondantes : diapo 18 : $\{2s\}$, diapo 19 : $\{2p_y\}$, diapo 27 : $\{2s, 2p_y\}$.

Diapos 28, 29 : Hybridation sp symétrique

A partir de ces deux orbitales pures, on peut construire deux orbitales hybrides sp symétriques colinéaires. Le nuage électronique d'une telle orbitale est représenté sur la diapo 28.

La superposition de deux orbitales sp à 180° l'une de l'autre est représentée sur la diapo 29.

On observe l'équivalence complète des deux systèmes.

Enseignement assisté par ordinateur

Des Journées d'études sur l'Enseignement Assisté par Ordinateur (EAO) ont été organisées sous le patronage du Ministère des Universités, les 9 et 10 mai 1979, par l'Université Paris VII, sous la responsabilité de Mme Bestougeff du Département d'informatique générale de cette université.

Au cours d'une brève réunion, annexe aux « Journées », les enseignants intéressés par les possibilités de l'EAO, prenant exemple sur les chimistes de l'enseignement supérieur regroupés dans le mouvement RECODIC dont les actions permettent depuis plus de

3 ans une confrontation des idées et réalisations pédagogiques au niveau des pays francophones, ont lancé l'idée de la création d'un Groupe de travail et d'information, de structure informelle, qui tenterait de sensibiliser les collègues de toutes les disciplines aux possibilités de l'EAO.

Un groupe de réflexion, chargé de proposer à la rentrée universitaire 79/80 un certain nombre de thèmes de travail, a été constitué. Les collègues suivants ont été désignés à cet effet :

R. Luft, chargé de l'animation provisoire du

groupe de réflexion (Université de Nice), MM. Blondel (I.N.R.P.), Dubreuil (U. Paris 7, O.P.E.), Jacques (U. Paris 7, O.P.E.), Masse (I.N.P. Grenoble), Varet (U. Paris 5), Weisbuch (U. Marseille 2, Luminy).

Les collègues intéressés par la mise en route d'un Groupe de travail et d'information sur le domaine de l'E.A.O. sont priés de le signaler à M. Jacques, Département d'informatique générale (O.P.E.), 2, Pl. Jussieu, 75221 Paris Cedex 5.