

Comment les étudiants s'approprient-ils le modèle quantique de la liaison chimique ?

Alain Dumon* professeur, Henry Sauvaître* professeur

Si quelques enseignants se sont posés des questions sur le bien fondé de l'introduction du modèle quantique en 1er cycle universitaire [1, 4], en avançant l'argument que « les concepts du modèle quantique sont difficiles, abstraits, et comme il est impossible de les développer dans le détail, les étudiants sont conduits à les accepter sans discussion et sans véritable compréhension », il semble qu'il y ait actuellement un consensus pour que cet enseignement soit effectivement présenté. On signalera cependant la réticence de certains enseignants vis-à-vis du concept d'hybridation [3, 5], parfois pour des raisons opposées, se traduisant par l'absence de son développement dans certains ouvrages [6, 7].

Les arguments invoqués sont :

- la possibilité de rendre compte autrement de la géométrie,
- la difficulté d'explications de la méthode auxquelles ce développement conduit,
- des représentations le plus souvent erronées chez l'étudiant.

La structure du champ conceptuel du modèle quantique de la liaison chimique peut être schématisée, de façon simplifiée, par la figure 1.

Deux voies parallèles de description de la molécule y apparaissent. Une voie localisée, s'appuyant sur le concept d'hybridation, et une voie délocalisée s'appuyant sur le concept d'orbitale moléculaire (OM).

Ces deux descriptions de la molécule sont certes différentes, mutuellement exclusives, chacune permettant d'interpréter des propriétés des molécules, mais sont-elles incompatibles si elles doivent conduire à la même énergie totale et à la même densité électronique totale de la molécule ?

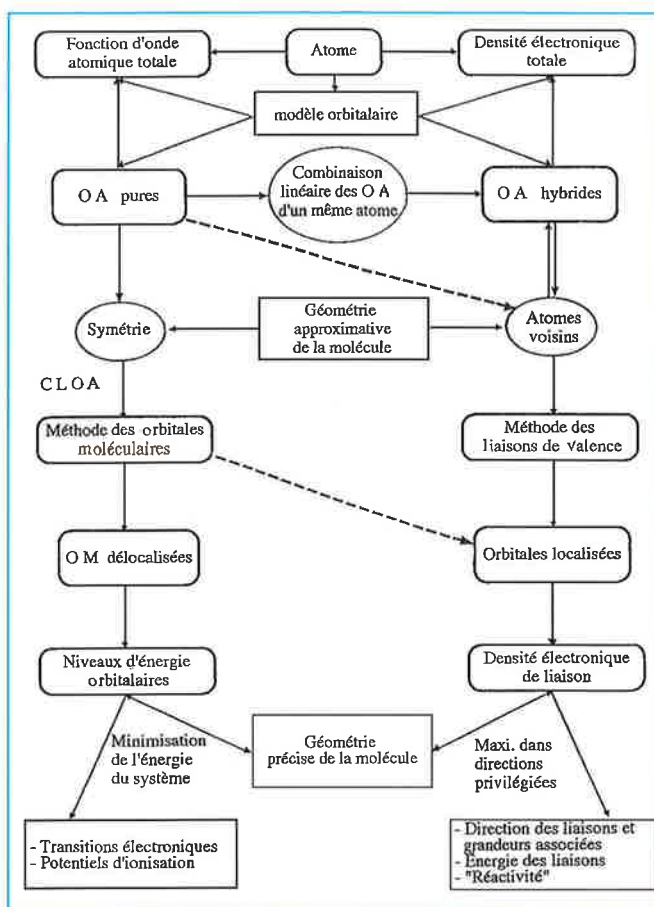


Figure 1 - Structuration du champ conceptuel du modèle quantique.

Dans le 1er cycle de l'enseignement supérieur, il est temps d'insister sur la notion de modèle en science et donc l'introduction de ces deux descriptions doit être l'occasion de montrer leurs limites, leurs domaines d'application et leurs domaines de recouvrement, le choix de l'une ou l'autre de ces représentations reposant sur des raisons de commodité liées au problème à résoudre et non sur des critères de validité.

Il est cependant judicieux de s'interroger sur la progression à adopter pour les présenter, de façon à ne pas introduire de confusions entre les deux descriptions dans l'esprit des étudiants [8] : par exemple, commencer à travailler en modèle localisé, puis passer au modèle délocalisé et traiter les molécules diatomiques comme des cas particuliers de ce modèle.

* Université de Pau et des Pays de l'Adour, UFR Sciences et Techniques, avenue de l'université, 64000 Pau.
Tél. : 59.32.31.65. Fax : 59.62.76.71.

Conférence présentée au 61e Congrès de l'ACFAS, 17-21 mai 1993, université du Québec, Rimouski, Québec, Canada.

Dans cette étude nous avons cherché à identifier l'image que les étudiants se sont construite du modèle quantique, un certain temps après l'enseignement.

Nous avons limité l'étude aux concepts clés d'orbitale moléculaire et d'hybridation. On notera que ces concepts, introduits en chimie physique, sont principalement utilisés, pour leur caractère opératoire, en chimie organique et inorganique et que c'est au cours de leur manipulation dans ces différents domaines que les étudiants se les approprient.

Méthodologie

Deux techniques complémentaires ont été utilisées :

– *L'association de mots*, qui consiste à demander aux étudiants de relier entre eux les mots ou expressions relatifs aux concepts qui leur semblent avoir un rapport direct. Cette méthode permet, après établissement d'une matrice de corrélation :

- D'une part de calculer un coefficient de lien entre expressions, compris entre 0 et 1. Coefficient dont la valeur est donnée par le rapport N/N_{sup} , avec N : nombre de liens relevés entre deux expressions
 N_{sup} : nombre correspondant aux deux expressions les plus reliées.

- D'autre part un diagramme de proximité à l'aide d'une méthode d'optimisation [9]. Ce diagramme est destiné à visualiser la proximité des termes relatifs aux concepts dans l'esprit des étudiants, c'est-à-dire l'organisation du champ cognitif du groupe.

– *Des questions à choix de réponses*. Les questionnaires ont été bâtis spécialement à cet effet en utilisant les termes ou expressions, parfois imprécis, utilisés couramment par les enseignants en cours et travaux dirigés. Leur but n'est pas de chercher la réponse correcte mais d'identifier les mots clés auxquels se raccrochent les étudiants pour répondre.

Représentation du concept d'OM

Organisation du champ cognitif

Le questionnaire pour l'association de mots est reporté dans le *tableau 1*.

L'étude a porté sur deux populations étudiantes.

Une de première année, deux mois après l'apprentissage des concepts (mois de mars). L'autre de deuxième année, en début d'année universitaire, soit environ neuf mois après l'apprentis-

Tableau 1 - Technique d'association de mots. Concept d'OM.

L'ensemble des concepts ou expressions ci-dessous se rapportent à l'électron engagé dans une liaison covalente (ordre de présentation des concepts quelconque).

Veuillez relier tous les concepts qui ont un rapport direct entre eux.

Attention : parmi ces expressions, certaines peuvent ne pas figurer dans le schéma.

- | | |
|-------------------------------------|----------------------------|
| 1 - fonction d'onde | 7 - fonction mathématique |
| 2 - probabilité de présence | 8 - orbitale atomique |
| 3 - niveaux d'énergie | 9 - surface |
| 4 - orbitale moléculaire (ϕ) | 10 - état de l'électron |
| 5 - région de l'espace | 11 - ϕ^2 |
| 6- combinaison linéaire | 12- signification physique |

sage et utilisation en chimie organique au cours des enseignements du second semestre.

Plutôt que de présenter une carte conceptuelle résultant d'une analyse a priori de chaque concept, il nous a paru préférable d'établir, comme référence, un diagramme de proximité pour l'équipe enseignante participant à leur enseignement. Cette équipe est constituée de 15 enseignants, spécialistes ou non de chimie théorique.

Analyse des diagrammes de proximité

- Les étudiants de première année (*figure 2*) :

- présentent un champ assez bien organisé avec des regroupements simples CLOA, aspect probabilistique...) et une cohésion bonne,
- centrent le champ sur l'objet d'étude : l'orbitale moléculaire (concept le plus souvent relié à d'autres),
- n'établissent pas de relations directes entre les fondements théoriques et le concept d'OM. On notera à ce niveau que la notion de fonction d'onde reste contextualisée c'est-à-dire attachée au domaine dans lequel elle a pris du sens : l'atome.

- les étudiants de deuxième année (*figure 3*) :

- présentent un champ très désorganisé, avec une cohésion faible et, malgré tout, encore quelques regroupements,
- centrent le champ sur les composantes de l'objet d'étude : les orbitales atomiques (OA),
- n'établissent toujours pas de lien entre OM et fonction d'onde, et comme les étudiants de 1re année, ne prennent pas en compte la notion de surface alors que les OA et les OM sont souvent représentées par leurs surfaces d'isodensité de probabilité.
- On notera également que le sens physique de ϕ^2 semble perdu.

- Pour l'équipe enseignante, le diagramme de la *figure 4* fait apparaître :

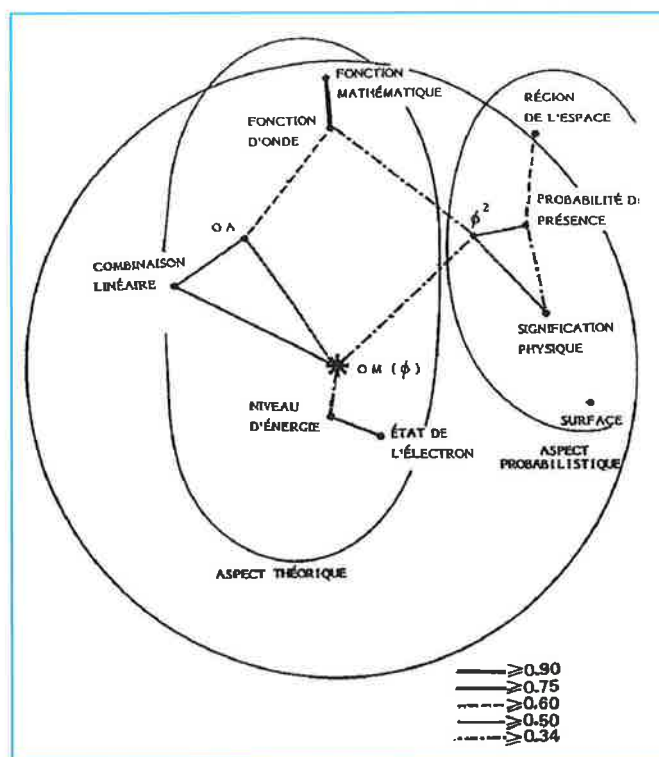


Figure 2 - Diagramme de proximité des étudiants de DEUG 1re année-OM.

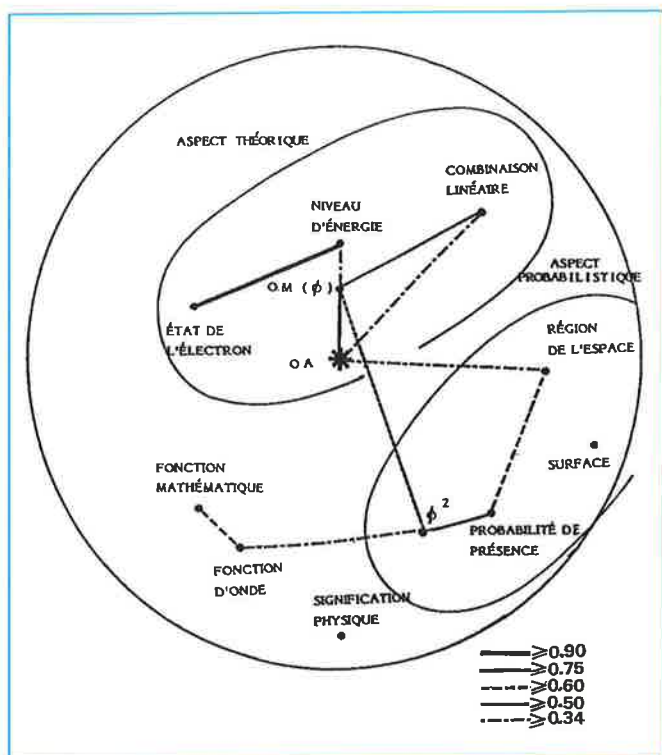


Figure 3 - Diagramme de proximité des étudiants de DEUG 2e année-OM.

- une grande structuration du champ, accompagnée d'une forte cohésion,
- un centrage sur le fondement théorique,
- comme pour les étudiants, la non-prise en compte de la notion de surface dans le réseau conceptuel. Ce comportement peut s'expliquer par le fait que l'on représente généralement les surfaces d'isodensité par des courbes ou contours.

Comparaison des diagrammes

- Alors que les enseignants situent les OA et les OM de la même façon par rapport à la fonction d'onde, les étudiants ont tendance à faire découler l'OM des OA.
- Pour les étudiants, la notion de niveau d'énergie est étroitement liée à celle d'état alors que, pour les enseignants, cet état est défini par la fonction d'onde. Il semble donc que, alors que les enseignants pensent de façon abstraite en terme de fonction d'état de l'électron, les étudiants interprètent concrètement en terme d'état énergétique.

Tableau II - Exemples de questions relatives au concept d'orbitale moléculaire.

Questions	% d'étudiants ayant choisi l'item
Q. 1 - Quelle est la définition exacte d'une orbitale moléculaire ?	
1 - Le niveau d'énergie occupé par une paire d'électrons dans la molécule.	14
2 - Une portion de l'espace autour des noyaux où la probabilité de trouver les électrons de liaison est maximale.	36
3 - Une fonction mathématique donnant la probabilité de trouver un électron sur un niveau d'énergie donnée.	40
4 - Une fonction mathématique représentant la trajectoire de l'électron dans la molécule.	21
5 - Aucune des définitions ci-dessus.	09
Q. 2 - Quelle est (quelles sont) l'(es) affirmation(s) exacte(s) ?	
La méthode CLOA permet :	
1 - De trouver la solution rigoureuse de l'équation de Schrödinger.	04
2 - De trouver la valeur des niveaux d'énergie possibles pour les électrons de liaison.	23
3 - De trouver une fonction mathématique traduisant l'état d'un électron dans la molécule.	81
4 - D'obtenir une équation de la trajectoire des électrons de liaison dans la molécule.	01
5 - Aucune des affirmations ci-dessus.	04

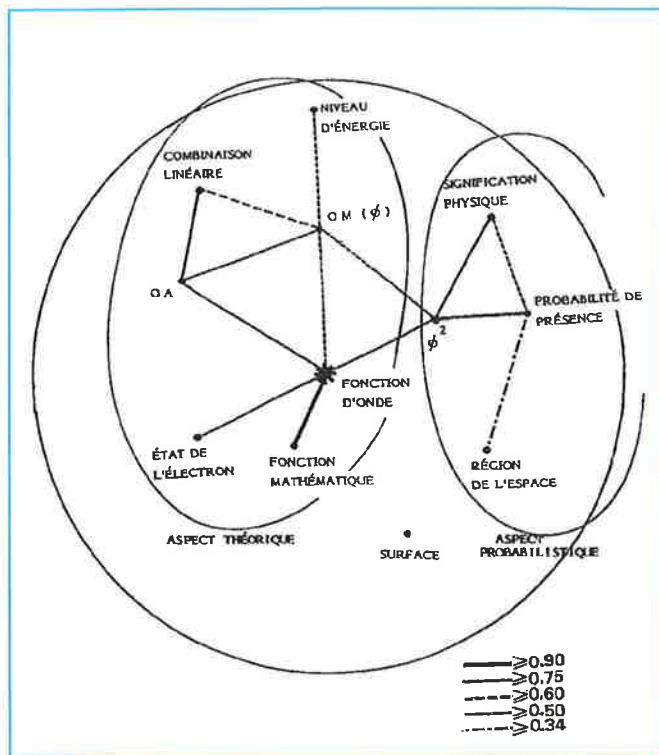


Figure 4 - Diagramme de proximité de l'équipe enseignante-OM.

- La proximité entre OM et niveau d'énergie est forte dans l'esprit des étudiants.

Ceci s'explique par le fait que le fonctionnement du concept d'OM, lors des travaux dirigés, porte principalement sur les diagrammes de corrélation énergétique en 1e année ; diagrammes repris lors des enseignements de spectroscopie en 2e année.

Cette première approche fait apparaître que les fondements théoriques du concept semblent mal assimilés et que seuls les aspects opératoires, pouvant être qualifiés de concrets, sont bien retenus. Elle demande à être précisée par l'analyse des réponses au questionnaire (tableau II).

Analyse des réponses au questionnaire

Analyse concernant les fondements théoriques du concept d'OM

- Les pourcentages de choix des items de la question 1 font

apparaître que la notion d'OM est fortement reliée aux notions de probabilité de présence puis de fonction mathématique, ce qui corrige un peu ce qui vient d'être dit.

- Le pourcentage relativement élevé de choix de l'item 2 (36 %) montre l'existence d'une confusion certaine entre l'OM et le domaine de probabilité de présence (observation confirmée au niveau de la 3e question). Cette confusion correspond d'ailleurs à un glissement de langage admis par certains organiciens.

- Si l'association fonction mathématique-trajectoire de l'électron semble effectuée par un nombre non négligeable d'étudiants, cette constatation doit être relativisée par le faible choix de l'item contenant la notion de trajectoire dans la question 2. Ce choix semble donc plutôt résulter de la présence de l'expression fonction mathématique dans l'item.

On peut donc dire que le concept d'OM est bien perçu comme une fonction mathématique, mais que cette fonction, comme cela a été signalé précédemment, est fortement reliée à la notion de combinaison linéaire des orbitales atomiques et non à la notion de fonction d'onde (cf. réponses à la question 2).

- Ces combinaisons linéaires, conduisant à la formation des OM, liantes ou antiliantes, ou π , sont souvent représentées par les schémas de recouvrement des OA en représentations polaires. L'analyse des réponses à la question 4 (tableau III) fait apparaître que le lien entre le signe des fonctions d'onde intervenant dans la combinaison linéaire, qui figure dans les lobes, et le caractère liant ou antiliant de l'OM est mal perçu (40 % de réponses correctes). Le nombre important d'inversions systématiques liant-antiliant (33 %) semble résulter d'une confusion associant les signes, non à ceux de fonctions d'onde, mais à des charges : les charges de mêmes signes se repoussent, celles de signes différents s'attirent.

- Par contre, les conditions de formation des OM σ par «recouvrement» axial et π par recouvrement latéral sont bien assimilées par les étudiants.

Analyse concernant l'aspect opératoire du concept d'OM

La question 3 (tableau III) était relative à la signification du carré de la fonction d'onde (ϕ^2).

Tableau III - Autres questions.

Q.3 - Quelle est (quelles sont) l'(es) affirmation(s) exacte(s) relative(s) au carré de la fonction d'onde ?	% de choix
1 - ϕ^2 représente la probabilité de trouver l'électron dans une région déterminée.	64
2 - le calcul de ϕ^2 permet d'obtenir la représentation spatiale de l'orbitale moléculaire.	23
3 - ϕ^2 représente la densité de probabilité de présence d'un électron dans un volume dV à une certaine distance des noyaux.	63
4 - Pour que la condition d'une liaison soit réalisée, il suffit que ϕ^2 prenne une valeur non nulle entre les noyaux.	25
5 - Pour une OM antiliante, ϕ^2 prend une valeur nulle entre les noyaux.	56
6 - ϕ^2 permet le tracé des courbes d'isodensité de probabilité.	64
Q. 6 - Parmi les affirmations suivantes relatives au diagramme de corrélation énergétique lié aux OM, laquelle (ou lesquelles) sont exactes ?	
1 - La probabilité de trouver deux électrons dans une même région de l'espace est indépendante des niveaux d'énergie occupés par ces électrons.	16
2 - Le calcul du niveau d'énergie découle de la connaissance de ϕ .	33
3 - Un électron dont l'état est décrit par une OM donnée possède une énergie donnée qui dépend de la localisation de cet électron entre les noyaux.	36
4 - Les niveaux d'énergie des OM liantes et antiliantes figurant sur le diagramme sont généralement déterminés pour une distance entre les noyaux correspondant à l'état stable de la molécule.	49
5 - Des paires d'électrons situées sur des niveaux d'énergie (atomiques) voisins peuvent interagir.	56
6 - L'inversion des niveaux d'énergie des OM σ et π est due à l'existence d'électrons «sur» des OA de niveaux d'énergie voisins.	41

- Tous les items (corrects ou non) contenant le terme probabilité ont été retenus par une forte proportion d'étudiants (64 %).

Mais il existe une confusion certaine dans leur esprit résultant de la non différenciation entre les notions de probabilité de présence et de densité de probabilité de présence, comme le montrent les pourcentages de choix des items 1 et 3.

- La relation entre ϕ^2 et le tracé des courbes d'isodensité ainsi que la relation entre la valeur de ϕ^2 entre les noyaux et le caractère liant ou antiliant de l'OM sont par contre assez bien retenues.

- En ce qui concerne la relation entre la densité de probabilité de présence (représentée par le modèle du nuage électronique) et le caractère de l'OM σ ou π , liant ou antiliant, les réponses à la question 5 (tableau IV) montrent que les étudiants :

- reconnaissent bien le caractère liant ou antiliant des OM (σ_{2s} : 73 % ; $\pi^*_{x,y}$: 76 % ; σ^*_{2s} : 60 %),
- différencient mal les OM σ et π : pour les OM $\pi_{x,y}$ (48 % σ ; 48 % π) et σ_z (46 % σ ; 36 % π).

On signalera que ces représentations n'avaient jamais été vues auparavant par les étudiants et on constatera qu'elles favorisent cependant grandement l'identification du caractère liant ou antiliant des OM.

Les réponses à la dernière question (tableau III) concernant l'aspect énergétique du concept d'OM montrent :

- que peu d'étudiants établissent une relation entre la connaissance de la fonction d'onde et le calcul de l'énergie électronique correspondante. Le sens de l'équation $H\phi = E\phi$ semble mal perçu par une grande majorité d'entre eux,
- que les conditions de calcul des niveaux d'énergie (noyaux à la distance d'équilibre) et que la participation d'OA de niveaux d'énergie voisins, d'un même atome, à la construction des OM sont bien assimilées,
- qu'une confusion existe dans leur esprit par établissement d'une corrélation entre, d'une part, OM et niveau d'énergie associée et, d'autre part, la localisation des électrons affectés à la liaison entre les noyaux dans la molécule. Le principe d'indiscernabilité semble être oublié

Tableau IV - Deux exemples de questions relatives à la notion d'orbitales moléculaires.

Q.4 - Associer à chacun des schémas ci-dessous la nature de l'OM formée (liante, non-liante, antiliante).

(a) O.M. σ
 (b) O.M. π
 (c) O.M. liante
 (d) O.M. antiliante
 (e) O.M. non-liante
 (chaque case peut contenir soit 2 lettres soit 1 seule lettre suivant le cas)

Q. 5 - La structure de la molécule d'oxygène est : $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{x,y})^4 (\pi_{x,y}^*)^2$. Pouvez-vous indiquer à quelle représentation des orbitales moléculaires de l'oxygène (σ_{2s} ; σ_{2s}^* ; σ_{2p} ; $\pi_{x,y}$; $\pi_{x,y}^*$) correspondant chacune des figures des nuages électroniques suivantes.

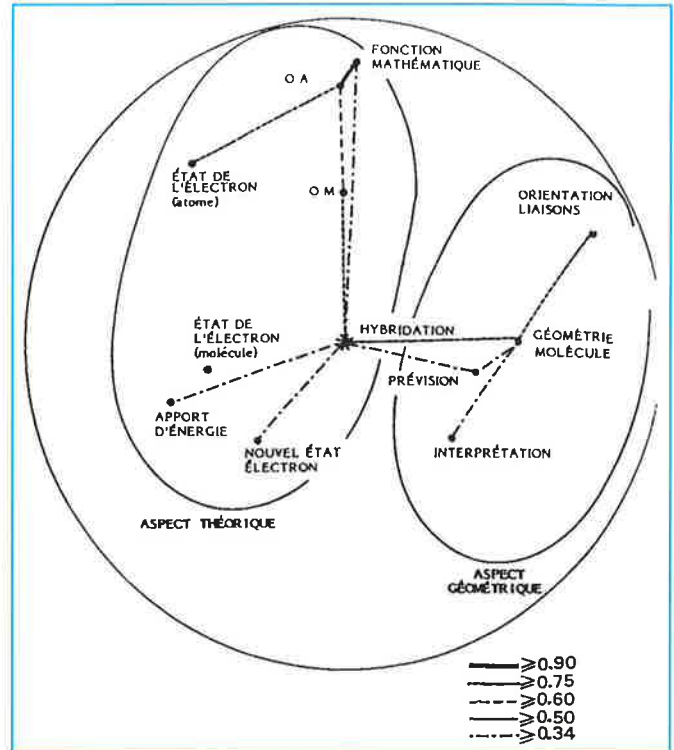


Figure 5 - Diagramme de proximité des étudiants de Deug 1re année - Hybridation.

Représentations du concept d'hybridation

La méthodologie employée est identique à celle utilisée pour le concept d'OM.

Organisation du champ cognitif

Le questionnaire pour l'association de mots est reporté dans le tableau V.

Analyse des diagrammes

- Les étudiants de 1ère année (figure 5) :
 - présentent un champ assez bien structuré autour de deux regroupements simples (aspect théorique et aspect géométrique) mais où la cohésion est faible,
 - centrent le champ sur l'objet d'étude,
 - relient directement la notion d'hybridation à la notion d'OM et non à celle d'OA,
 - établissent une relation entre hybridation-apport d'énergie-nouvel état de l'électron.

Tableau V - Technique d'association de mots. Concept d'hybridation.

Veillez relier entre eux les concepts (ou expressions) ci-dessous relatifs à l'hybridation.

Attention : certaine(s) de ces expressions peuvent ne pas convenir pour la description du concept d'hybridation

1 - hybridation	7- prévision
2 - nécessité d'un apport d'énergie	8- interprétation
3 - orbitale moléculaire	9- géométrie de la molécule
4 - orientation des liaisons	10- état de l'électron dans l'atome
5 - fonction mathématique	11- état de l'électron dans la molécule
6 - orbitale atomique	12- nouvel état de l'électron

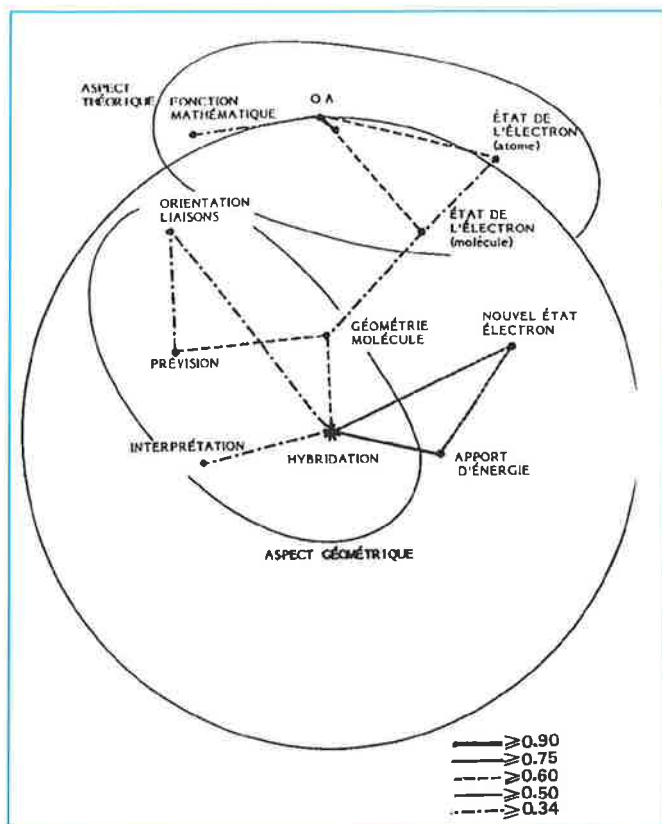


Figure 6 - Diagramme de proximité des étudiants de Deug 2e année - Hybridation.

- Les étudiants de 2e année (figure 6) :
 - présentent une nouvelle fois un champ assez désorganisé avec encore, malgré tout, quelques regroupements,
 - centrent également le champ sur l'objet d'étude,
 - ne relient en aucune façon la notion d'hybridation à ses fondements théoriques : ils rejettent l'aspect mathématique, abstrait, du concept à la périphérie du champ. Par contre ils établissent un lien entre l'hybridation et la géométrie de la molécule, ce qui s'explique par le fait qu'ils n'ont fait fonctionner le concept qu'à ce niveau.
 - On note encore la relation, plus forte qu'en 1re année, entre hybridation-apport d'énergie-nouvel état de l'électron.
- Le diagramme de référence (figure 7) fait apparaître :
 - une grande structuration et une bonne cohésion du champ,
 - une superposition au centre du champ des concepts d'OA et d'hybridation (coef. de lien = 1)
 - la non-prise en compte des notions d'apport d'énergie et de nouvel état de l'électron.

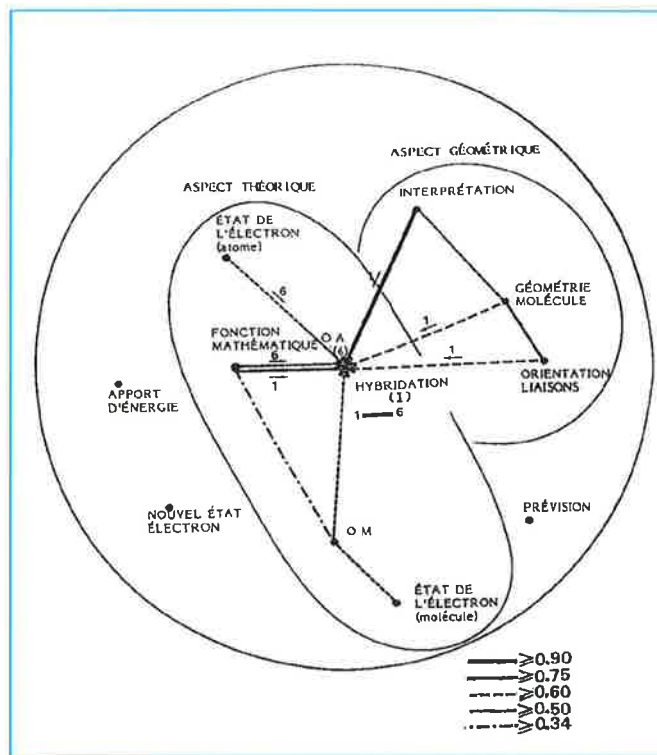


Figure 7 - Diagramme de proximité de l'équipe enseignante - Hybridation.

Comparaison des diagrammes

- De la comparaison des diagrammes, il ressort qu'un décalage important existe entre ce que dit l'équipe enseignante et ce que retiennent les étudiants :
- pour les enseignants, l'hybridation permet d'interpréter la géométrie de la molécule à partir de l'orientation des liaisons alors que, pour les étudiants, elle permet de prévoir la géométrie d'une molécule et donc l'orientation des liaisons,
 - pour les étudiants, l'hybridation nécessite un apport d'énergie et conduit à un nouvel état de l'électron, alors que les enseignants n'ont jamais introduit un tel point de vue, tout au moins lors des apprentissages.

Il semble donc que le concept d'hybridation soit mal appréhendé sur le plan théorique et que seule son utilité «pratique» soit bien perçue.

Analyse des conceptions

Dans le but de confirmer (ou non) les observations précédentes, une question à choix de réponse a été proposée aux étudiants. L'analyse des réponses est toujours réalisée à

Tableau VI - Questions relatives au concept d'hybridation..

Questions	% d'étudiants ayant choisi l'item
Quelle est (quelles sont) l'(es) affirmation(s) exacte(s) ?	
1 - L'hybridation est un concept mathématique qui permet de prévoir la géométrie de la molécule.	57
2 - L'hybridation est un concept mathématique qui permet de construire un ensemble d'orbitales orientées suivant les directions de liaison.	49
3 - L'hybridation conduit à une fonction d'onde décrivant l'état de l'électron dans la molécule.	16
4 - L'hybridation conduit à définir un nouvel état pour l'électron dans l'atome	39
5 - Les descriptions d'un atome avec ou sans hybridation sont équivalentes.	19
6 - L'hybridation n'est possible que par suite de l'apport d'énergie due à l'interaction des atomes qui vont se lier avec l'atome central.	49

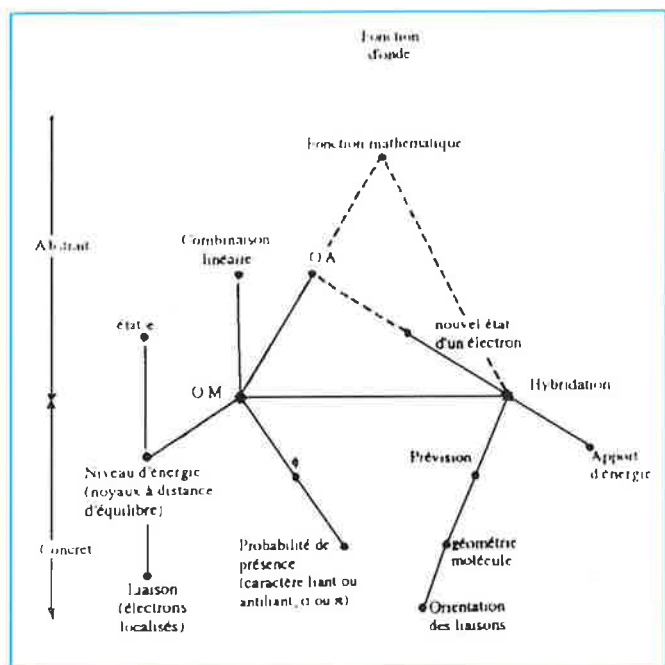


Figure 8 - Structuration du champ cognitif des étudiants.

partir du choix des items effectué par les étudiants en relation avec les mots clés qu'ils contiennent.

On remarque que :

- Les items 1 et 2 contenant l'expression concept mathématique sont les plus choisis, mais le faible choix de l'item 5 montre que son origine est mal connue.
- La prévision de la géométrie moléculaire à partir de l'hybridation est confirmée.
- Le faible pourcentage de choix de l'item 3 semble montrer que l'hybridation est associée à l'atome et non à la molécule, ce qui n'apparaissait pas comme une évidence sur le diagramme de proximité (figure 5).
- La nécessité d'un apport d'énergie et la définition d'un nouvel état de l'électron se confirment également.

Il est intéressant de noter que des conceptions non introduites dans l'enseignement apparaissent dans l'esprit des étudiants. Ces conceptions sont à rapprocher des notions d'énergie de promotion et d'état excité introduites dans quelques ouvrages. Leur apparition peut s'expliquer en considérant que le symbolisme utilisé dans la théorie de la liaison de valence, par exemple à l'aide des cases quantiques, est identique à celui utilisé pour la description des états excités.

Organisation du champ cognitif

Sur la figure 8 est résumé ce qui nous semble être l'organisation du champ cognitif des étudiants concernant le modèle quantique, tel qu'il ressort de l'étude.

- Une OM est une fonction mathématique obtenue par combinaison linéaire d'orbitales atomiques, en respectant certaines conditions de symétrie.

- A une OM est associé un niveau d'énergie (on ne sait pas comment) traduisant l'état (énergétique) de l'électron dans la molécule.

- Le carré de l'OM conduit au calcul de la probabilité de présence de l'électron ou de la densité de probabilité (la diffé-

rence n'est pas établie). Rappelons ici que la perception du caractère liant ou antiliant, σ ou π d'une OM est grandement favorisée par le modèle du nuage électronique.

- Enfin le principe d'indiscernabilité des électrons n'est pas pris en compte : des électrons particuliers, situés sur des niveaux d'énergie particuliers, sont localisés entre les noyaux. Le rapport entre le concept d'OM et la description de la molécule en modèle délocalisé est loin d'être perçu.

- L'hybridation est certainement une opération mathématique (dont le principe est mal perçu), vraisemblablement liée à l'atome, mais conduisant surtout à la formation d'une OM : ce qui confirme le mélange entre modèles délocalisé et localisé.

- Pour qu'il y ait hybridation, les électrons doivent passer dans un nouvel état, suite à un apport d'énergie.

- Enfin, l'hybridation permet de prévoir la géométrie d'une molécule et donc l'orientation des liaisons.

On peut donc en conclure qu'un grand nombre de confusions existe dans l'esprit des étudiants. Ce qui semble bien maîtrisé correspond aux notions qu'ils ont manipulées lors des exercices dirigés, par contre ils retiennent mal les définitions formelles et les conditions d'élaboration des modèles lorsque ces conditions leur ont seulement été exposées en cours.

On retiendra, en référence à notre introduction, que la distinction entre les deux voies de description de la molécule est loin d'être réalisée.

Comment améliorer l'apprentissage du modèle ?

Quelques propositions en guise de conclusion.

L'apprentissage du modèle quantique est une opération difficile, sinon douloureuse pour les étudiants. Il nécessite en effet la remise en cause d'un modèle qui a parfaitement fonctionné pendant les trois années de l'enseignement secondaire, à savoir : la molécule est représentée par un assemblage d'atomes ; chaque atome est lié à son voisin le plus proche par une liaison ; la liaison (simple, double ou triple) est formée par la mise en commun d'électrons de valence des atomes participant à la liaison, sous forme de paires. Ces paires sont localisées entre les atomes concernés.

Ce modèle, qui apparaît satisfaisant à ce niveau, compte tenu des explications qu'il permet et des applications qui en découlent, doit être remplacé par un modèle abstrait, modifiant en profondeur l'image commune de la molécule puisque : la molécule est constituée par un agrégat de noyaux et d'électrons ; les électrons sont délocalisés sur l'ensemble de la molécule ; seuls les états accessibles par les électrons peuvent être définis par des fonctions d'ondes, les OM. Aussi n'est-il pas étrange qu'il soit mal assimilé !

Comme il est impossible, compte tenu du temps dont on dispose et des difficultés mathématiques inhérentes au modèle, de faire appréhender par les étudiants les fondements de tous les éléments composant le modèle, il convient de s'attacher à donner un «sens» à ces éléments. Seule une diversification des situations pédagogiques au cours desquelles la connaissance est manipulée par les étudiants peut conduire à la faire passer sous leur responsabilité : ils doivent l'admettre, la comprendre, l'utiliser.

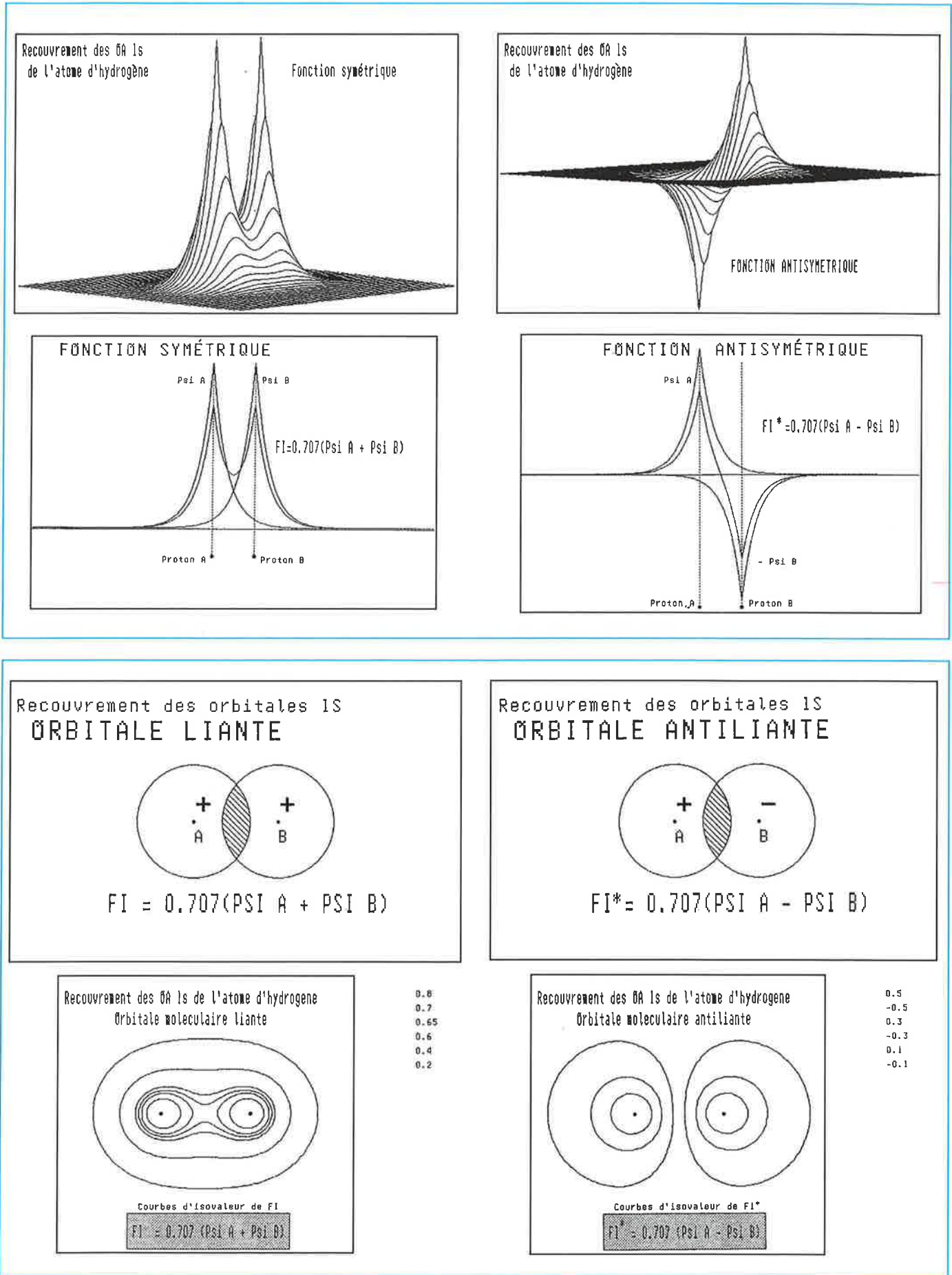


Figure 9 - Représentations des orbitales moléculaires.

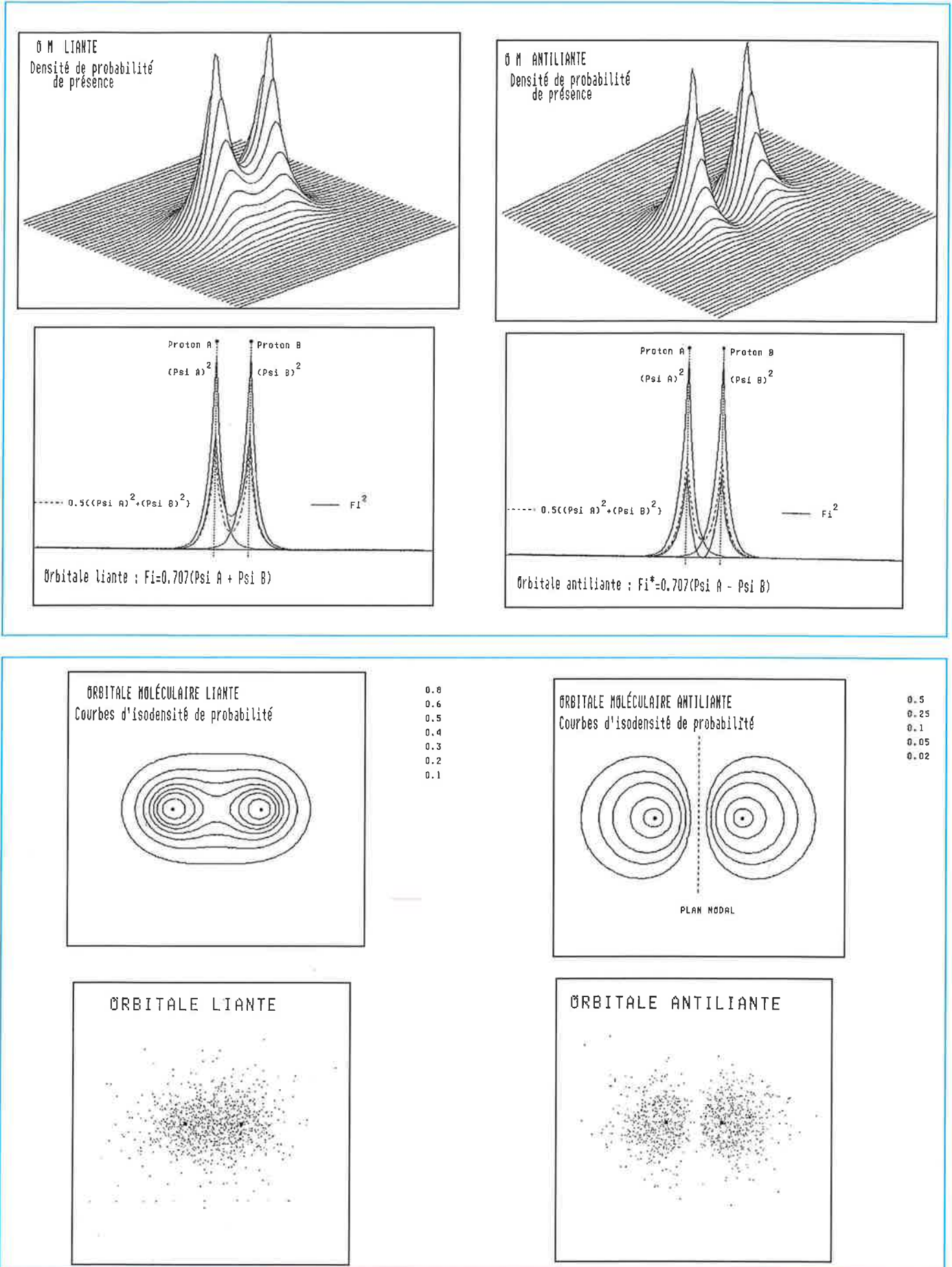


Figure 10 - Représentation de la densité de probabilité de présence.

Introduction du modèle

Les concepts du modèle quantique sont abstraits et ne peuvent en aucun cas être construits par les étudiants. Il est donc obligatoire de les présenter en cours. La visualisation de ces concepts abstraits par des schématisations pouvant être qualifiées, abusivement certes, de concrètes devrait grandement favoriser leur appropriation. Par exemples, pour le concept d'OM :

- la compréhension de la formation des OM à partir des OA, pourra être facilitée par une représentation en parallèle des OM (dépendance radiale) en 3 et 2 dimensions et du recouvrement des OA, représentée en coordonnées polaires : la symétrie, l'antisymétrie, les valeurs positives et négatives de la fonction d'onde seront ainsi mieux perçus (figure 9).

- pour renforcer l'adhésion au caractère liant, ou antiliant, σ ou π d'une OM, la visualisation des combinaisons des carrés des fonctions d'onde par les représentations en 3 et 2 dimensions, par les contours d'isodensité et le modèle du nuage électronique est d'une grande utilité (figure 10). Ces représentations gagneraient à être accompagnées des courbes d'isodensité différentielle.

- la représentation, pour une molécule polyélectronique, des contours d'isodensité et/ou du modèle du nuage électronique, non seulement pour chacune des OM mais aussi pour la molécule, est un moyen d'insister sur l'indiscernabilité des électrons, l'obtention de la fonction d'onde et de la densité électronique totale à partir des OM.

Manipulation du modèle

- L'appropriation du modèle par les étudiants nécessite qu'ils le fassent fonctionner dans diverses situations, à savoir :

- non seulement des exercices dirigés, classiques, d'application,
- mais également des lectures critiques de texte, qui nécessitent, une mobilisation du modèle pour expliquer, interpréter, justifier.

- Enfin un renforcement dans l'appropriation du modèle nous semble devoir passer aussi bien par un auto-apprentissage à l'aide de didacticiels d'EAO et/ou de montage(s) audiovisuel(s) que par la réalisation d'exercices d'auto-évaluation.

La mise à disposition des étudiants de tels outils, et donc leur réalisation, nous semble correspondre à une nécessité (les enseignants intéressés peuvent prendre contact avec les auteurs qui ont commencé à travailler dans ce sens).

Références

- [1] Bent H.A., *J. Chem. Educ.*, **1984**, 61, p. 421.
- [2] Pauling L., *The Science Teacher*, septembre **1983**, p. 25.
- [3] Gillespie R.J., *Chem. Can.*, **1976**, 23, p. 23.
- [4] Morwick J.-J., *J. Chem. Educ.*, **1975**, 52, p. 146.
- [5] Ducasse A, Lalanne J.-P., Lalanne P., Rayez J.-C., *Bulletin de l'Union des Physiciens*, **1986**, 678, p. 129.
- [6] Lazlo P., *La liaison chimique*, Herman, Paris, **1974**.
- [7] Duboc-Chabanon C., Lemaire J., Le Roux Y., Talbot J., *Chimie*, tome 1, Armand Collin ; Paris, **1987**.
- [8] Lissilour R., Opposition et complémentarité des notions d'orbitales moléculaires localisées et délocalisées. Quelques aspects pédagogiques, *L'Actualité Chimique*, octobre **1977**, p. 28.
- [9] Moynihan T.F., Word association techniques for the study of cognitive structure of chemical concepts in Scottish secondary school, M. Sc. Thesis, **1981**, University of Glasgow.

Université d'été de chimie 1995

ÉLECTROCHIMIE ET ÉNERGIE DES CONCEPTS AU VÉHICULE ÉLECTRIQUE

Grenoble, 29 août-1er septembre 1995

L'objectif de l'université d'été est de répondre à la demande des professeurs de lycées et collèges en matière de formation continue dans un domaine de la physico-chimie souvent mal connu. Onze universités ont déjà été tenues depuis 1984.

Instaurée à l'initiative de l'Union des Physiciens, elle est organisée conjointement avec l'université Joseph Fourier et l'Institut National Polytechnique de Grenoble, en collaboration avec l'Union des Industries Chimiques, la Société de Chimie Industrielle et la Société Française de Chimie.

Nombre de participants limité à 300.

Au programme : 5 demi-journées de conférences, une demi-journée consacrée à des visites (au choix du stagiaire), une journée de visites d'entreprises de la région.

Reenseignements : Jacques Fouletier, LIESG-ENSEEG, BP 75, 38402 Saint-Martin d'Hères Cedex. Tél. : 76.82.65.66. Fax : 76.82.66.70.