

Remarque sur la représentation des nuages électroniques

par Jean-Paul MATHIEU,

Université P.-et-M.-Curie, Paris 5^e.

L'article de M. TROPIS, paru dans le B.U.P. de novembre 1983, contient au sujet de la densité électronique des atomes hydrogéoïdes des considérations qui me paraissent risquer d'obscurcir la représentation statistique correcte et bien connue que l'on peut se faire de la structure de ces atomes. Il convient d'abord de rappeler la signification admise aujourd'hui pour la fonction d'onde ψ ; elle a été donnée par M. BORN [1] qui l'exprime en ces termes [2] : « Soit ψ la fonction propre d'un état; la quantité $|\psi|^2 dv$ représente la probabilité que l'électron (considéré comme un corpuscule) se trouve dans l'élément de volume dv ». La quantité $D = |\psi|^2$ est donc une densité de probabilité de présence de l'électron. On peut la calculer et M. TROPIS en donne une expression exacte. On peut aussi la représenter, comme l'a fait jadis WHITE [3], en photographiant des aiguilles de forme choisie animées de mouvements périodiques convenables.

Pour l'état fondamental de l'atome d'hydrogène ($n = 1$, $l = m = 0$), on sait que :

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right)$$

où r désigne la distance de l'électron au centre de l'atome et $r_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / me^2$, $\hbar$ représentant la constante de PLANCK, ϵ_0 la permittivité du vide, m et e respectivement la masse et la charge de l'électron. D'où la probabilité :

$$dP = D_{100} dv = \frac{1}{\pi r_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{r_0}\right) r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi.$$

En intégrant en θ et φ sur la surface d'une sphère, on obtient :

$$dP = \frac{4}{r_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{r_0}\right) r^2 dr.$$

Par suite de la symétrie de l'état fondamental, dP représente la probabilité de trouver l'électron entre deux sphères de rayons r et $r + dr$. La fonction dP/dr passe par un maximum

pour $r = r_0$, qui est la distance la plus probable de l'électron au noyau et coïncide avec le rayon de l'orbite primitive de BOHR, $r_0 = 0,629 \cdot 10^{-10}$ m.

La densité D n'est qu'une grandeur de calcul. C'est la quantité dP qui a une signification physique. Il ne me semble donc pas que la légende de la fig. 1 de l'article de M. TROPIS soit bien choisie, ni que l'on doive « se défaire de l'image que l'on voit encore trop souvent dans certains manuels (*) [4]. En considérant la fonction dP/dr , on évite la conclusion choquante qui consiste à localiser l'électron de préférence au centre de l'atome, c'est-à-dire à l'endroit du noyau.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] M. BORN. — *Zeits. f. Physik*, 37 (1926), p. 803.
- [2] M. BORN. — *Atomic Physics*, Blackie, London, 1963, p. 148.
- [3] H.-E. WHITE. — *Phys. Review*, 37 (1931), p. 1416.
- [4] Citons parmi ces manuels : J. BARRIOL, *La Constitution des molécules*, Gauthier-Villars, Paris 1958 ; EYRING, WALTER, KIMBALL, *Quantum chemistry*, Wiley, New York, 1946 ; G. GUINIER, *Physique moderne*, Bordas, Paris, 1949, tome I ; G. HERZBERG, *Atomic spectra and atomic structure*, Dover, New York, 1944 ; L. PAULING, *The nature of the chemical bond*, Cornell, 1960.

(*) Page 242, fin du paragraphe II.