

## De la sédentarité des populations électroniques

Le modèle de Lewis est l'aboutissement pré quantique d'une théorie de la liaison chimique initiée au début du XIX ème siècle par John Dalton. Le modèle de Lewis constitue à la fois une représentation de la matière à l'échelle atomique et une théorie de son organisation. Dans cette communication j'essaie de confronter l'hypothèse fondamentale du modèle de Lewis, l'existence de groupes d'électrons localisés dans l'espace, aux résultats d'expériences numériques de falsification au sens de Karl Popper. Comme dans les approches ELF et AIM l'espace géométrique est divisé en région distinctes, mais à la différence de ces dernières la partition de l'espace moléculaire est réalisée par la minimisation d'une fonction objectif rendant explicitement compte de la localisation des électrons plutôt que par la détermination des bassins d'un système dynamique.

L'ensemble des résultats numériques obtenus sur les atomes (Li-Rn) et sur des petites molécules corroborent l'hypothèse de Lewis. Notre approche complète la panoplie d'outils disponibles pour l'interprétation.