

- a) [2 pts] L'orbitale $2p_z$ s'écrit comme suit dans l'atome d'hydrogène,

$$\varphi_{2p_z}(x, y, z) = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \times e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{2a_0}}$$

où a_0 est le rayon de Bohr. Expliquer, sans nécessairement faire des développements mathématiques, comment cette formule est reliée à la représentation que les chimistes utilisent pour les orbitales p_z .

- b) [2 pts] Qu'est-ce-qu'un atome hydrogénoïde? Ce dernier permet d'évaluer, par exemple, l'énergie des orbitales $3s$ et $3p$ dans l'atome de chlore (son numéro atomique est $Z = 17$). Comment fait-on le calcul?
- c) [2 pts] Il est possible d'obtenir les valeurs plus précises suivantes pour ces énergies : $\varepsilon_{3s} = -25.3$ eV et $\varepsilon_{3p} = -13.7$ eV. Quelle est la différence majeure entre ces valeurs et celles prédites par le modèle de l'atome hydrogénoïde? Quelle en est la raison? Est-il *a priori* nécessaire de prendre en compte les électrons $3s$ dans la description de la liaison entre un atome de chlore et d'autres atomes? Justifiez votre réponse.
- d) [4 pts] Expliquer la construction du diagramme d'énergies orbitales moléculaires de la molécule HCl (en y indiquant les niveaux d'énergie occupés). Si l'axe de la molécule est choisi comme axe des z du repère cartésien, les orbitales $3p_x$ et $3p_y$ deviennent des orbitales non-liantes. Quelle en est la raison fondamentale?