

- a) [2 pts] Dans l'atome d'hydrogène, l'orbitale  $2p_x$  s'écrit comme suit en fonction des coordonnées cartésiennes  $x, y, z$  de l'électron,

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

où  $a_0$  est le rayon de Bohr. On note  $\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z$  le vecteur position électronique (décomposé dans la base cartésienne),  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$  la distance de l'électron au noyau, et  $\vec{u}_r = \frac{\vec{r}}{r}$ . Exprimer  $\varphi_{2p_x}(x, y, z)$  en fonction de  $r$ ,  $\vec{u}_r$  et  $\vec{e}_x$ . Expliquer, sans faire de développements mathématiques supplémentaires, le lien entre cette expression et la représentation que les chimistes donnent des orbitales  $p_x$ .

- b) [2 pts] Qu'est-ce-qu'un atome hydrogénoïde? Ce dernier peut être utilisé pour estimer, par exemple, l'énergie des orbitales  $2s$  et  $2p$  dans l'atome de fluor (son numéro atomique est  $Z = 9$ ). Comment ferait-on le calcul?
- c) [2 pts] Il est possible d'obtenir les valeurs plus précises suivantes pour ces énergies :  $\varepsilon_{2s} = -40.2$  eV et  $\varepsilon_{2p} = -18.6$  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  $2s$  dans la description de la liaison entre un atome de fluor et d'autres atomes? Justifiez votre réponse.
- d) [4 pts] Expliquer la construction du diagramme d'énergies orbitales du fluorure d'hydrogène (HF) 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  $2p_x$  et  $2p_y$  deviennent des orbitales non-liantes. Quelle en est la raison fondamentale? Quel est l'ordre de la liaison HF? Discuter, sur la base de la théorie des perturbations, la (dé)localisation des différents électrons de valence sur les atomes d'hydrogène et de fluor, puis commenter à la lumière de la règle de l'octet.