

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

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

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 $\varphi_{2p_y}(x, y, z)$ en fonction de r , $\vec{u}_r$ et $\vec{e}_y$. Expliquer comment la représentation usuelle des orbitales p_y peut être obtenue (qualitativement) à partir de cette expression.

- b) [2 pts] Qu'est-ce-qu'un atome hydrogénoïde ? Ce dernier peut être utilisé comme modèle pour estimer, par exemple, l'énergie des orbitales $3s$ et $3p$ de l'atome de chlore (son numéro atomique est $Z = 17$). Comment ferait-on le calcul ?
- c) [2 pts] Il est possible d'obtenir les valeurs plus précises suivantes pour ces énergies : $\varepsilon_{3s}^{\text{Cl}} = -25.3$ eV et $\varepsilon_{3p}^{\text{Cl}} = -13.7$ 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] L'énergie de l'orbitale $3s$ du sodium ($Z = 11$ dans ce cas) vaut $\varepsilon_{3s}^{\text{Na}} = -5.1$ eV. Expliquer en détail, à l'aide de la théorie des perturbations, la construction du diagramme d'énergies orbitales du chlorure de sodium NaCl et ce, en tenant compte de l'observation faite dans la question précédente. Détailler le calcul de l'ordre de liaison et commenter la structure de Lewis de NaCl à la lumière du diagramme obtenu. On discutera en particulier la (dé)localisation des différents électrons de valence sur les atomes de sodium et de chlore.