

## Contrôle Terminal

### Mercredi 13 Décembre 2017

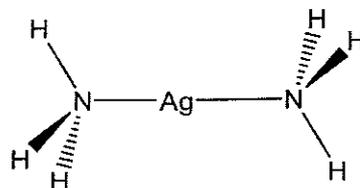
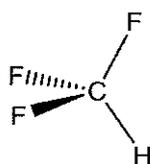
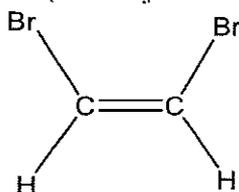
### 1h30

Seules les tables de caractères distribuées durant le cours sont autorisées. Calculatrices et téléphones portables interdits.

Cette épreuve est constituée de **quatre** parties totalement **indépendantes** les unes des autres.

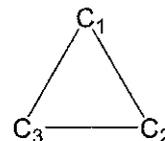
#### 1) Détermination de groupes de symétrie (/3pts)

Indiquer (sans le justifier) le groupe de symétrie correspondant aux molécules ci-dessous.



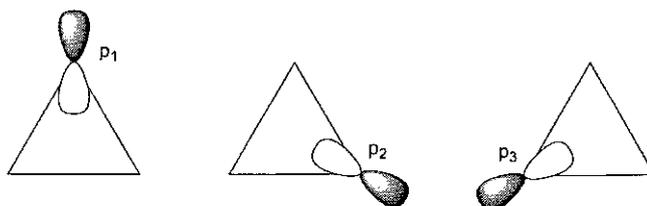
#### 2) Orbitales de symétrie de $C_3$ équilatéral. (/8pts)

On considère la molécule  $C_3$  dans une géométrie où chaque atome de carbone est situé au sommet d'un triangle équilatéral représenté ci-contre :



a) Quel est le groupe de symétrie associé ? Quel est l'ordre de ce groupe ?

On souhaite construire une partie des orbitales adaptées à la symétrie de ce système à partir de trois orbitales atomiques (OA) 2p de chaque atome, notées  $p_1$ ,  $p_2$  et  $p_3$  et représentées sur le schéma ci-dessous :

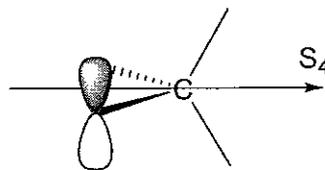


On souhaite établir la représentation  $\Gamma$  associée à cette base de représentation.

- Indiquer comment se transforme l'orbitale  $p_1$  par chaque opération de symétrie.
- Indiquer comment se transforme l'orbitale  $p_2$  par chaque opération de symétrie.
- Indiquer comment se transforme l'orbitale  $p_3$  par chaque opération de symétrie.
- En déduire les caractères de  $\Gamma$  pour chaque classe d'équivalence.
- Réduire cette représentation.
- Trouver les orbitales de symétrie, bases des représentations irréductibles précédentes à l'aide de l'opérateur de projection. On ne cherche pas les normes de ces orbitales.

## 3) Opération de symétrie et orbitale atomique (/1pt)

Dessiner l'orbitale que l'on obtient lorsqu'on applique l'opération  $S_4$  associé à l'axe  $S_4$  pour la molécule tétraédrique dessinée ci-contre.

4) Détermination partielle de la table de caractères de  $C_{4v}$  (/8pts)

a) Définir l'ordre d'un groupe. Quel est l'ordre du groupe  $C_{4v}$  ?

Lors d'une photocopie, une partie de la table de  $C_{4v}$  a été effacée. On remplace les nombres manquants par des lettres dans la table obtenue :

$C_{4v}$	E	$2C_4(z)$	$C_2$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	I	II
$A_1$	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>	<i>z</i>	$x^2+y^2, z^2$
$A_2$	<i>f</i>	1	1	-1	-1	$R_z$	
$B_2$	1	-1	1	-1	1		<i>xy</i>
E	2	0	<i>g</i>	0	0	$(x,y), (R_x, R_y)$	$(xz, yz)$

Puisque vous avez la table dans le livret, seules les justifications sont notées dans les questions suivantes.

- Donner en justifiant les valeurs *a*, *b*, *c*, *d* et *e*.
- Rappeler le théorème de petite orthogonalité, aussi appelé LOT.
- Quelle est la signification 'physique' du LOT ?
- Donner en justifiant la valeur de *f*.
- Calculer la valeur de *g*.
- Justifier qu'il manque une ligne à cette table ?
- Quelle est la dimension de la RI qui manque ?
- [Bonus] Calculer les caractères de la RI qui manque.