

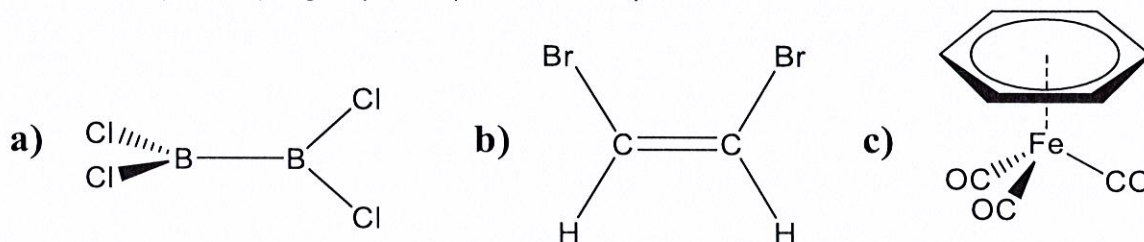
Session 2
Mardi 20 Juin 2023
Durée : 1h20

Seules les tables de caractères distribuées durant le cours sont autorisées. Calculatrices et téléphones portables interdits. Cet énoncé comporte 2 pages.

Cette épreuve est constituée de **cinq** 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) Détermination partielle de la table de caractères d'un groupe inconnu (/6pts)

Par inadvertance, une partie la table de caractères d'un groupe a été effacée... On souhaite reconstituer la table complète. Pour cela, on remplace les caractères manquants par des lettres :

X	E	$2C_3(z)$	$3C_2$	$\sigma_h(xy)$	$2S_3$	$3\sigma_v$
A'_1	1	Ⓐ	Ⓑ	Ⓒ	Ⓓ	Ⓔ
A'_2	1	Ⓕ	-1	1	1	-1
E'	2	-1	Ⓖ	Ⓗ	-1	0
A''_1	1	1	1	-1	-1	-1
A''_2	1	1	-1	Ⓙ	-1	1

- Définir l'ordre d'un groupe. Quel est l'ordre de ce groupe ?
- Justifier qu'il manque une ligne à cette table.
- Quelle est la dimension de la RI qui manque ?
- Donner en justifiant les valeurs de Ⓐ à Ⓔ.
- En utilisant le théorème d'orthogonalité, déduire les valeurs de Ⓖ, Ⓗ et Ⓙ.

3) Autour des groupes de symétrie (/1pt) [Répondre sur l'énoncé]

a) Laquelle/Lesquelles de ces molécules est/sont de symétrie D_{3h} ? (aucune justification demandée)

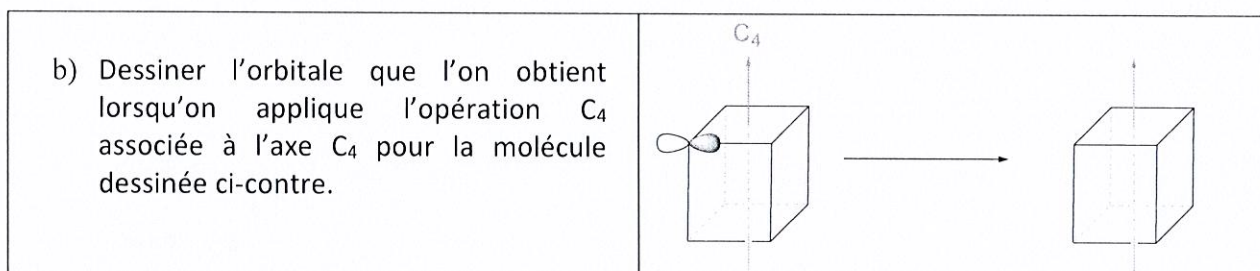
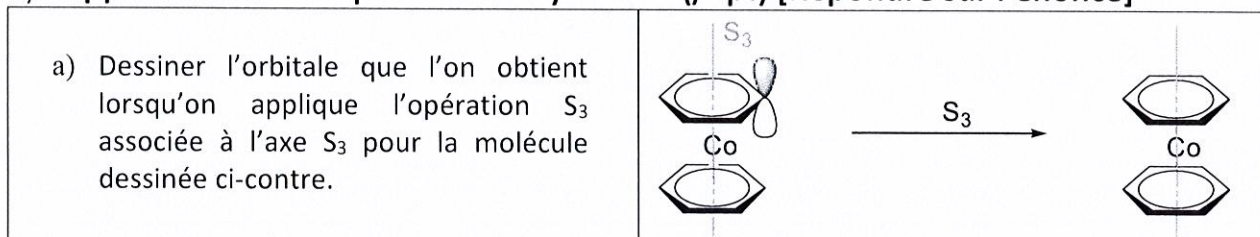
- HCl SF₆ CCl₄ BH₃ C₂H₄

b) Donner un exemple d'une molécule de symétrie $D_{\infty h}$ (aucune justification demandée).

Nom :

Prénom :

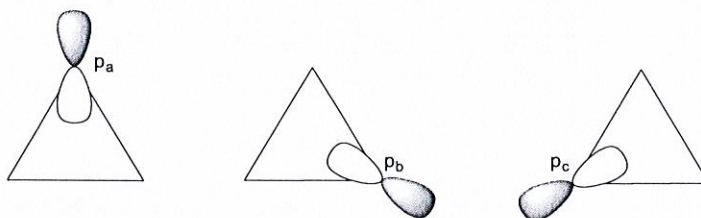
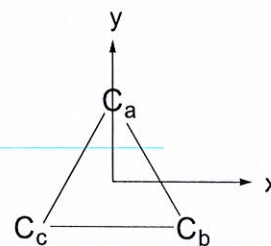
4) Application d'une opération de symétrie. (/2pt) [Répondre sur l'énoncé]



5) Orbitales de symétrie du cyclobutadiène. (/8pt)

On considère la molécule C_3 (squelette du cyclopropane) dans une géométrie où chaque atome de carbone est situé au sommet d'un triangle équilatéral, comme représenté ci-contre. Le groupe de symétrie associé est D_{3h} .

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_a , p_b , et p_c et représentées sur le schéma ci-dessous :



On précise que toutes ces orbitales sont dans le plan (xy).

- Indiquez comment se transforme l'orbitale p_a par les opérations de symétrie de D_{3h} .
- Indiquez comment se transforme l'orbitale p_b par les opérations de symétrie de D_{3h} .
- Combien d'atomes sont invariants par l'opération $C_3(z)$? par l'opération $\sigma_{(xy)}$?
- Établir la représentation associée à la base de représentation (p_a , p_b , p_c) que l'on notera Γ .
- Réduire la représentation Γ .
- Trouver l'orbitale de symétrie base de la représentation irréductible de dimension 1 à l'aide de l'opérateur de projection. On ne cherchera pas la norme de cette orbitale.
- Trouver les orbitales de symétrie, bases de la représentation irréductible de dimension 2 à l'aide de l'opérateur de projection. On ne cherchera pas les normes de ces orbitales.

Formule du projecteur :

$$\mathcal{P}_{RI}(f) \propto \sum_{R \in Op. Sym.} \chi_{RI}(R) R(f)$$