

Session 2

Vendredi 28 Juin 2019 - 30mn

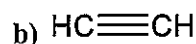
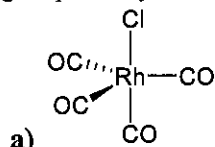
À rédiger sur une copie à part

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

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

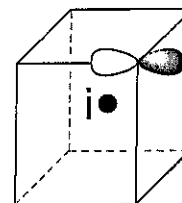
1) Détermination de groupes de symétrie

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



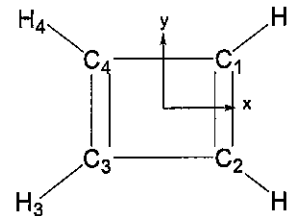
2) Application d'une opération de symétrie.

Représenter le système obtenu après l'opération i représentée sur le schéma ci-contre.



3) Orbitales de symétrie π du cyclobutadiène.

Le cyclobutadiène adopte une géométrie « rectangulaire » où chaque atome de Carbone est situé au sommet d'un rectangle (ci-contre). Dans cette géométrie, le groupe de symétrie de la molécule est D_{2h} .



On souhaite construire les orbitales adaptées à la symétrie de ce système à partir des orbitales atomiques (OA) $2p_z$ de chaque atome de carbone. Pour faciliter les notations, les OA $2p_z$ seront notées z par la suite.

- Quel est l'ordre du groupe D_{2h} ?
- Indiquez comment se transforme l'orbitale z_1 par les opérations de symétrie de D_{2h} .
- Combien d'atomes sont invariants par l'opération $C_2(x)$? par l'opération $\sigma_{(xy)}$?
- Établir la représentation associée à la base de représentation (z_1, z_2, z_3, z_4) que l'on notera Γ_π .
- Réduire la représentation Γ_π .
- Trouver l'orbitale de symétrie base de la représentation irréductible B_{1u} à l'aide de l'opérateur de projection. On ne cherchera pas la norme de cette orbitale.

Formule du projecteur :

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