

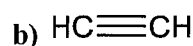
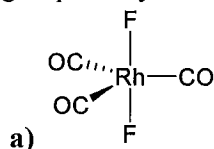
Session 2 - 30mn

À rédiger sur une copie à part

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

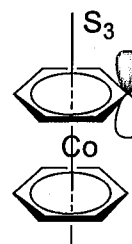
1) Détermination de groupes de symétrie

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



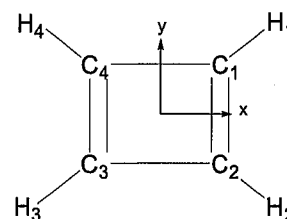
2) Application d'une opération de symétrie.

Dessiner l'orbitale que l'on obtient lorsqu'on applique l'opération S_3 associée à l'axe S_3 pour la molécule dessinée ci-contre.

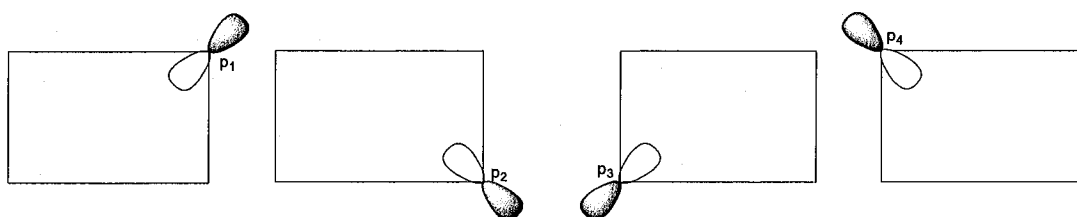


3) Orbitales de symétrie du cyclobutadiène.

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 une partie des orbitales adaptées à la symétrie de ce système à partir de quatre orbitales atomiques (OA) 2p de chaque atome, notées p_1 , p_2 , p_3 et p_4 et représentées sur le schéma ci-dessous :



- Quel est l'ordre du groupe D_{2h} ?
- Indiquez comment se transforme l'orbitale p_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 (p_1, p_2, p_3, p_4) que l'on notera Γ .
- Réduire la représentation Γ .
- 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 :

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