

Contrôle Terminal – Seconde session

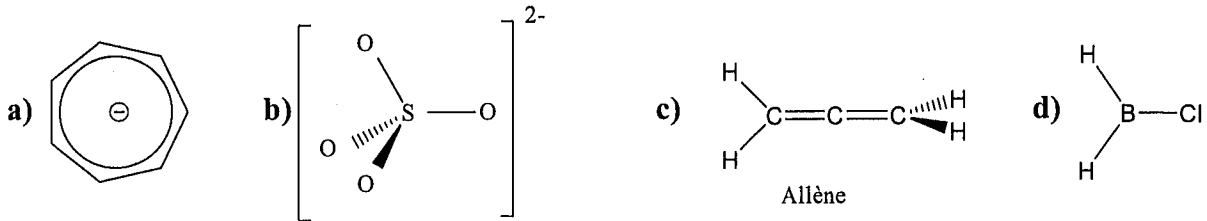
1h30

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 (/4pts)

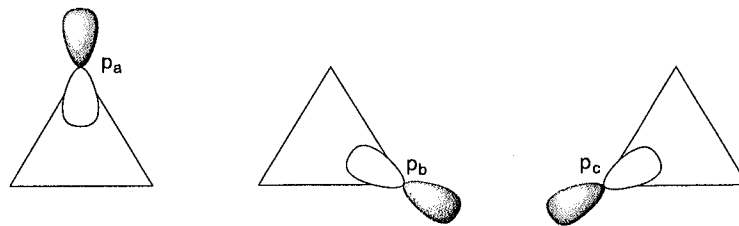
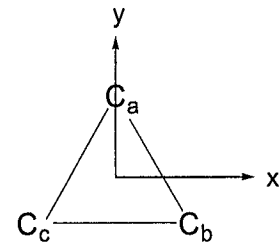
Indiquer (sans le justifier) le groupe de symétrie correspondant aux molécules ci-dessous.



2) Orbitales de symétrie de C₃ triangle équilatéral. (/6pts)

On considère la molécule C₃ (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 :



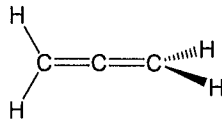
- Indiquez comment se transforme l'orbitale p_a par les opérations de symétrie de D_{3h}.
- Combien d'atomes sont invariants par l'opération C₃(z) ? par l'opération σ_(xy) ?
- Établir la représentation associée à la base de représentation (p_a, p_b, p_c) que l'on notera Γ.
- Réduire la représentation 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.

Formule du projecteur :

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

3) **Identification des opérations et des éléments de symétrie. (/2pts)**

Représenter les éléments de symétrie et indiquer les opérations de symétrie associées pour l'allène :

4) **Détermination totale de la table de caractères de C_{3v} (/8pts)**

- Définir l'ordre d'un groupe. Quel est l'ordre du groupe C_{3v} ?
- Qu'est-ce qu'une classe d'équivalence ?

On souhaite construire la table complète de C_{3v} . Puisque vous avez la table dans le livret, **seules les justifications sont notées** dans les questions suivantes.

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	I	II
A_1	a	b	c	z	x^2+y^2, z^2
A_2	1	f	g	R_z	
E	k	i	j	$(x,y), (R_x, R_y)$	$(x^2-y^2, xy), (xz, yz)$

- Donner en justifiant les valeurs a, b et c.
- Donner en justifiant la valeur de k.
- Rappeler le théorème de petite orthogonalité, aussi appelé LOT.
- Calculer les valeurs de f et g.
- En déduire les valeurs de i et j.