

Nom :

Prénom :

## Rattrapage

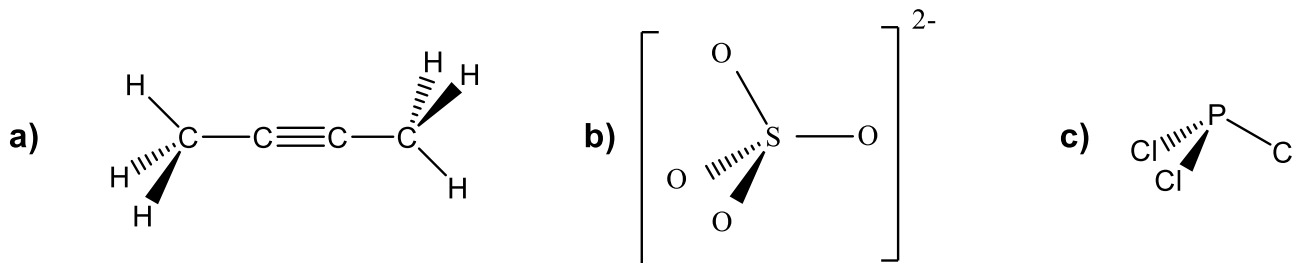
### Mardi 21 Juin 2022 - 1h30

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

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 d'une table de caractères (/6pts)

Lors d'une photocopie, une partie d'une table de caractères a été effacée. On remplace les nombres manquants par des lettres dans la table obtenue

$D_{3d}$	E	$2C_3$	$3C_2$	i	$2S_6$	$3\sigma_d$
$A_{1g}$	1	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)
$A_{2g}$	1	1	(f)	1	1	-1
$E_g$	2	(g)	i	(i)	-1	0
$A_{1u}$	1	1	1	-1	-1	-1
$A_{2u}$	1	1	-1	-1	-1	1

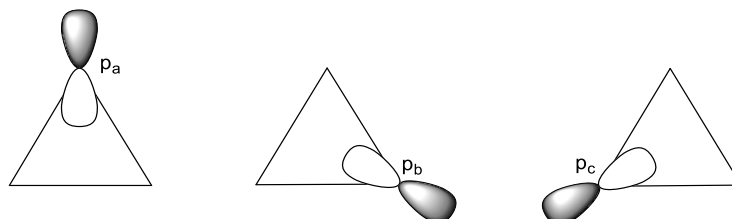
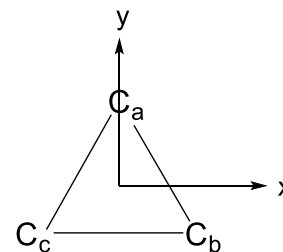
Puisque vous avez la table dans le livret, **seules les justifications sont notées** dans les questions suivantes.

- Définir l'ordre d'un groupe. Quel est l'ordre du groupe  $D_{3d}$  ?
- Justifier qu'il manque une ligne à cette table ?
- Quelle est la dimension de la RI qui manque ?
- Donner en justifiant les valeurs de (a) à (e).
- Calculer les valeurs de (f), (g) et (i).

### 3) Orbitales de symétrie de $C_3H_4$ plan carré. (/8pts)

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 :



- Quel est l'ordre du groupe  $D_{3h}$ .
- Indiquez comment se transforme l'orbitale  $p_a$  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  $\Gamma$ .
- Réduire la représentation  $\Gamma$ .
- 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 la norme de cette orbitale.

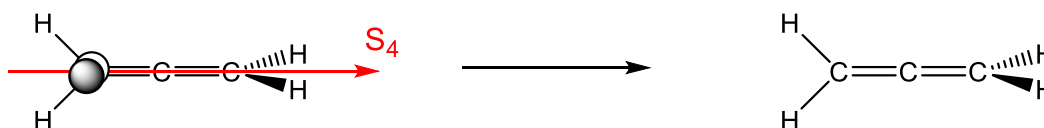
Formule du projecteur :

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

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

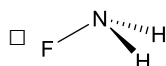
- Rappeler la définition de la rotation impropre  $S_4$ .

- Représenter le système obtenu après la rotation impropre  $S_4$  représentée ci-dessous pour la molécule d'allène :



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

Laquelle/Lesquelles de ces molécules est/sont de symétrie  $C_{2v}$  ? (aucune justification demandée)

  $H_2O$ 

  $CHCl_3$ 
  $BH_3$ 
