

Examen de moyenne durée
Durée 1h30

Exercice1 : 4 points

1. Soient les éléments A, B, C et D tels que : A conjugué avec C et D et B conjugué avec C.

Montrer que ces quatre éléments forment une classe.

2. Vérifier si la loi $*$ admet un élément neutre dans $\mathbf{R}^{*2}$

Représenter $(x, y) * (x', y') = (x - 2y' ; x' / y)$

Exercice n° 2 : 8 points

Représenter les éléments de symétrie sur les structures des composés énumérés ci-dessous.

Donner la liste complète des opérations de symétrie et le groupe ponctuel correspondant.

1. Acide borique
2. PCl_5
3. Ethanal
4. 2,7-Dichloronaphtalène
5. Bromure d'hydrogène
6. Acétone

Exercice 3: 8 points

Soit la molécule suivante :



1. Représenter clairement tous les éléments de symétrie de la molécule.
2. Donner le groupe ponctuel de symétrie (GPS) et l'ensemble des opérations de la molécule.
3. Construire la table de multiplication et vérifier si le groupe est abélien. Justifier.
4. Donner les transformations dans la base de coordonnées cartésiennes et internes
5. Établir la table de caractères du GPS de la molécule et nommer les représentations irréductibles associées aux symboles de Mulliken dans chaque cas.
6. Ecrire la représentation réductible en fonction des représentations irréductibles en donnant les valeurs des coefficients de contribution de chacune d'elles.

Corrigé - type - EMD. TG. 2023

Exercice n° 1: 4 Points

1. A conjugué avec C et D $\Rightarrow$ C et D sont conjugués entre eux

Théorème: « Si un élément A d'un groupe est conjugué avec deux éléments B et C du même groupe, alors B et C sont conjugués entre eux » (0,5)

$$A = X_1^{-1} \cdot C \cdot X_1 \text{ et } A = Y_1^{-1} \cdot D \cdot Y_1 \Rightarrow C = Z_1^{-1} \cdot D \cdot Z_1 \quad /$$

• B conjugué avec C et A conjugué avec C $\Rightarrow$ B conjugué avec A

$$B = X_2^{-1} \cdot C \cdot X_2 \text{ et } A = X_1^{-1} \cdot C \cdot X_1 \Rightarrow B = X_3^{-1} \cdot A \cdot X_3 \quad /$$

• B conjugué avec C et C conj. avec D $\Rightarrow$ B conjugué avec D

$$B = X_2^{-1} \cdot C \cdot X_2 \text{ et } C = Z_1^{-1} \cdot D \cdot Z_1 \Rightarrow B = Z_2^{-1} \cdot D \cdot Z_2 \quad (1,5)$$

, Par suite les 4 elts A, B, C et D sont conjugués entre eux donc ils forment une classe. /

2. Element neutre pour (*) dans $\mathbb{R}^{*2}$

$$\forall (x, y) \in \mathbb{R}^{*2}, \exists? (e, e') \in \mathbb{R}^{*2} / (x, y) * (e, e') = (e, e') * (x, y) = (x, y)$$

$$(x, y) * (e, e') = (x - 2e', e/y) = (x, y) \quad (0,5)$$

$$\begin{cases} x - 2e' = x \Rightarrow 2e' = x - x = 0 \Rightarrow e' = 0 \notin \mathbb{R}^* \end{cases} \quad (0,5)$$

$$\begin{cases} e/y = y \Rightarrow e = y^2 \in \mathbb{R}^* \end{cases} \quad (0,5)$$

$\Rightarrow (e, e') = (0, y^2) \Rightarrow$ D'une part $e \notin \mathbb{R}^*$ et d'autre part y^2 prend une infinité de valeurs.

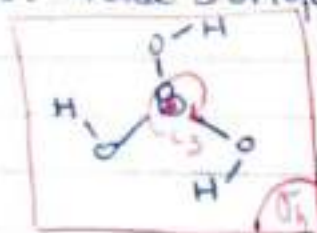
Donc l'elt neutre n'existe pas.

(0,5)

Exercice n° 2: 8 Points

Éléments, Opérations et groupe de symétrie:

1. Acide Borique: $B(OH)_3$



$$\{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v, \sigma_v, S_6, S_6^5\}$$

$$G.P.S = C_{3h}$$

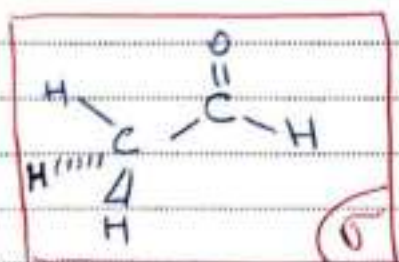
2. $PCl_5 \rightarrow$ Bipyramide à base triangulaire



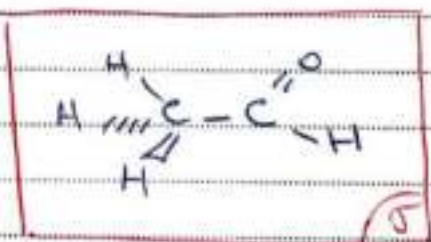
$$\{E, C_3, C_3^2, 3C_2 (\perp \text{à } C_3), 3\sigma_v, \sigma_h, \sigma_h, S_6, S_6^5\}$$

$$G.P.S = D_{3h}$$

3. Ethanal: $C_2H_4O = CH_3COH$



ou



$$G.P.S = C_s = \{E, \sigma_v\}$$

4. 2,7-Dichloronaphtolène

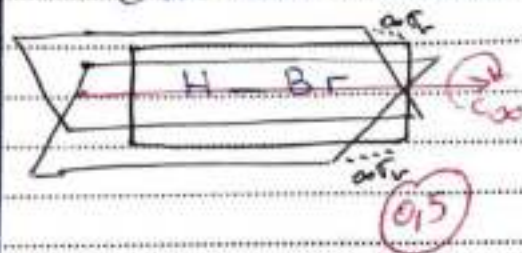


$$\{E, C_2, 2\sigma_v\}$$

$$G.P.S = C_{2v}$$

5 - Bromure d'hydrogène : HBr

C'est une molécule linéaire asymétrique $\Rightarrow C_{\infty v}$

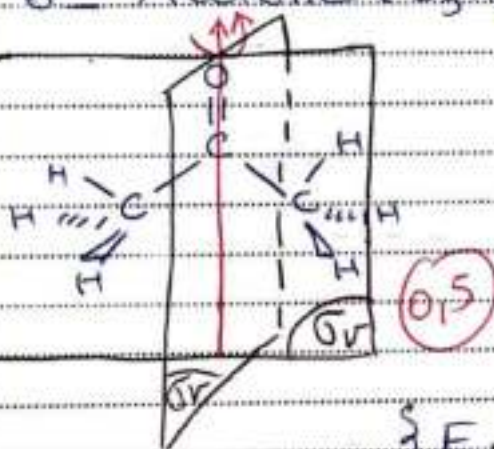


$\{E, C_{\infty}, \infty \sigma_v\}$

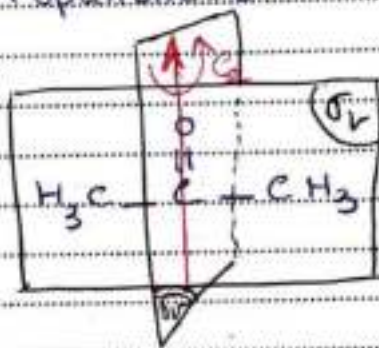
G.P.S. = $C_{\infty v}$

0,5

6 - Acétone : $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ = Propanone



ou



$\{E, C_2, 2 \sigma_v\}$

G.P.S. = C_{2v}

0,5

Remarque : Note complète pour une réponse totalement juste.

Exercice n° 3 : 8 Points.

1 -



(0,5)

2 - Groupe ponctuel et opérations de symétrie:

$$G.P.S = C_{2h} = \{E, C_2, \sigma_h, i\}$$

(0,5)

3 - Table de multiplication du groupe C_{2h} :

C_{2h}	E	$C_2(z)$	$\sigma_h(xy)$	i
E	E	$C_2(z)$	$\sigma_h(xy)$	i
$C_2(z)$	$C_2(z)$	E	i	$\sigma_h(xy)$
$\sigma_h(xy)$	$\sigma_h(xy)$	i	E	$C_2(z)$
i	i	$\sigma_h(xy)$	$C_2(z)$	E

Le groupe C_{2h} est abélien.
Car la table de Cayley est symétrique par rapport à la diagonale ou tous les produits sont commutatifs.

(0,5)

4 - Transformations dans les différentes bases:

• Base Cartésienne:

$$E \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \chi(E) = 3$$

$$C_2(z) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow C_2(z) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \chi(C_2) = -1$$

$$\sigma_h(xy) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_h(xy) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow \chi(\sigma_h) = 1$$

$$i \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow i = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\chi(i) = -3$$

(1)

Rq: Les Traces des matrices $\rightarrow$ Table de Caractères: question 5 (x)

• Base de Coordonnées internes $\vec{T}, \vec{R}$:

$$\begin{aligned} E \begin{pmatrix} \vec{T}_x \\ \vec{T}_y \\ \vec{T}_z \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \vec{T}_x \\ \vec{T}_y \\ \vec{T}_z \end{pmatrix}, \quad C_2(z) \begin{pmatrix} \vec{T}_x \\ \vec{T}_y \\ \vec{T}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\vec{T}_x \\ -\vec{T}_y \\ \vec{T}_z \end{pmatrix} \\ \sigma_{xy} \begin{pmatrix} \vec{T}_x \\ \vec{T}_y \\ \vec{T}_z \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \vec{T}_x \\ \vec{T}_y \\ -\vec{T}_z \end{pmatrix}; \quad i \begin{pmatrix} \vec{T}_x \\ \vec{T}_y \\ \vec{T}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\vec{T}_x \\ -\vec{T}_y \\ -\vec{T}_z \end{pmatrix} \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \text{Transformation} \\ \text{des vecteurs} \\ \text{translation} \end{array} \right\} \textcircled{1}$$

Vecteurs rotations: Produits Vectoriels des vecteurs $\vec{T}$ tels que

$$\vec{R}_x = \vec{T}_y \wedge \vec{T}_z, \quad \vec{R}_y = \vec{T}_z \wedge \vec{T}_x, \quad \vec{R}_z = \vec{T}_x \wedge \vec{T}_y$$

$$E \begin{pmatrix} \vec{R}_x \\ \vec{R}_y \\ \vec{R}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{R}_x \\ \vec{R}_y \\ \vec{R}_z \end{pmatrix}; \quad C_2(z) \begin{pmatrix} \vec{R}_x \\ \vec{R}_y \\ \vec{R}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\vec{R}_x \\ -\vec{R}_y \\ +\vec{R}_z \end{pmatrix} \quad \textcircled{1}$$

$$\sigma_{xy} \begin{pmatrix} \vec{R}_x \\ \vec{R}_y \\ \vec{R}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\vec{R}_x \\ -\vec{R}_y \\ +\vec{R}_z \end{pmatrix}; \quad i \begin{pmatrix} \vec{R}_x \\ \vec{R}_y \\ \vec{R}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +\vec{R}_x \\ +\vec{R}_y \\ +\vec{R}_z \end{pmatrix}$$

5 - Table de Caractères de C_{2h} :

C_{2h}	E	$C_2(z)$	σ_{xy}	i	Bases
A_g	1	1	1	1	$\vec{R}_z$
A_u	1	1	-1	-1	$\vec{T}_z$
B_g	1	-1	-1	1	$\vec{R}_x, \vec{R}_y$
B_u	1	-1	1	-1	$\vec{T}_x, \vec{T}_y$
Γ_c	3	-1	1	-3	(xy3)

* Traces des matrices $\textcircled{0,5} \rightarrow$ détail

6 - Réduction de Γ_c : $\Gamma_c = \sum_{i=1}^4 a_i \Gamma_i$

$$a_i = \frac{1}{h} \cdot \sum_R n \cdot \chi(R) \cdot \chi_i(R) \rightarrow \text{Caract. de R dans la représentation } \Gamma_i$$

Ordre du G.P.S $\uparrow$ $h=4$
 op. de symétrie $\uparrow$ n nombre d'op. de sym.
 Caractère de R dans Γ_c $\textcircled{0,25}$

$$a_1 = 0; \quad a_2 = 1; \quad a_3 = 0; \quad a_4 = 2$$

$$\Rightarrow \Gamma_c = 0A_g + A_u + 0B_g + 2B_u$$

$$\Gamma_c = A_u + 2B_u \quad \textcircled{0,75}$$