Université de Versailles – Saint-Quentin
Licence – $2^{\text{ème}}$ année
Année universitaire 2007–2008
Module MA 213 : Théorie des groupes pour la chimie

Feuille de TD n°4 : Représentations linéaires de groupes ponctuels.

Exercice 1

1) Rappeler le groupe d'isométries de la molécule d'eau H_2O.
2) Trouver toutes les représentations de degré 1 de ce groupe. On rappelle que trouver une représentation χ de degré 1, c'est associer à chaque élément g du groupe un nombre *a priori* complexe $\chi(g)$, ces nombres vérifiant la même table de multiplication que le groupe de départ. (Autrement dit si on a deux éléments g et g' dans le groupe, alors les nombres $\chi(g)$, $\chi(g')$ et $\chi(gg')$ doivent vérifier la relation $\chi(g)\chi(g') = \chi(gg')$.) Indication : Vous devez en trouver quatre différentes.
3) Même exercice avec la molécule d'ammoniac NH_3.

Exercice 2

Soit G un groupe fini. Soit $\rho : G \longrightarrow \mathrm{GL}(\mathbb{R}^n)$ une représentation de G. Montrer que pour tout élément g de G, les valeurs propres de la matrice $\rho(g)$ sont de module 1. *Indication :* On utilisera le fait qu'il existe un entier p (par exemple l'ordre du groupe) tel que $g^p = e$.

Exercice 3

Soit C_3 le groupe cyclique d'ordre 3.
1) Combien y a-t-il de classes de conjugaison dans C_3 ?
2) En déduire le nombre de caractères irréductibles de C_3.
3) Quel est le degré des représentations irréductibles de C_3 ?
4) Trouver toutes les représentations irréductibles de C_3.
5) Dresser la table des caractères de C_3.

Exercice 4

Même exercice avec C_4.

Exercice 5

Même exercice avec C_5.

Exercice 6 (Table des caractères du groupe D_2)

1) Montrer que le groupe diédral D_2 est isomorphe au groupe des isométries de la molécule d'eau.
2) Ce groupe est-il commutatif ?
3) Combien y a-t-il de classes de conjugaison dans ce groupe ?
4) En déduire le nombre de caractères irréductibles.
5) Quel est le degré des représentations irréductibles ?
6) En vous aidant des résultats de l'exercice 1, dresser la table des caractères de D_2.

Exercice 7

Table des caractères de D_3 1) Rappeler la table de multiplication du groupe D_3. (C'est par exemple le groupe des isométries de la molécule d'ammoniac. **Attention cependant.**

Plus tard, en chimie, dans d'autres cours, vous noterez plutôt C_{3v} le groupe des isométries de la molécule d'ammoniac. D'un point de vue strictement *mathématique*, ces groupes sont isomorphes et ont donc la même table de caractères, du moins lorsqu'on se limite, comme nous, aux deux premières colonnes. Plus tard, vous utiliserez aussi les troisième et quatrième colonnes. Il sera alors essentiel de différencier D_3 et C_{3v}. En fait les notations utilisées en chimie contiennent un peu plus d'information que la simple notation D_3 couramment utilisée en mathématiques : elles précisent en même temps la représentation spatiale du groupe. Pour nous ces différences n'auront aucune importance, mais je le répète, elles en auront bientôt pour vous.)

2) Regrouper les éléments de D_3 en classes de conjugaison. Quel est le nombre de classes de conjugaison ?

3) En déduire le nombre de représentations irréductibles.

4) On rappelle que les degrés n_i des représentations irréductibles d'un groupe G vérifient l'équation $\sum_i n_i = \mathrm{Card}\,(G)$ (où $\mathrm{Card}\,(G)$ est le nombre d'éléments de G). En déduire le nombre de représentations irréductibles de chaque degré.

5) Trouver toutes les représentations de degré 1.

6) Montrer qu'on peut construire une représentation de degré 2 en utilisant entre autres les matrices

$$\begin{pmatrix} j & 0 \\ 0 & j^2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} j^2 & 0 \\ 0 & j \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & j \\ j^2 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & j^2 \\ j & 0 \end{pmatrix}.$$

7) Calculer le caractère de cette représentation.

8) Vérifier à l'aide du caractère qu'elle est irréductible. (On admettra qu'une représentation est irréductible si et seulement si son caractère vérifie la relation $(\chi|\chi) = 1$).

9) Conclure en dressant la table des caractères de D_3.

Exercice 8

1) Rappeler la liste des quatre isométries qui constituent le groupe G des isométries de la molécule d'eau.

2) Donner pour chacune de ces isométries la matrice de $\mathbb{R}^3$ correspondante.

3) On obtient ainsi une représentation de degré 3 du groupe G. Calculer le caractère de cette représentation.

4) En vous aidant des résultats de l'exercice 6, décomposer cette représentation en somme de représentations irréductibles.

Exercice 9

1) On rappelle qu'en cours, on a expliqué comment on pouvait représenter les vibrations d'une molécule d'eau en considérant 9 coordonnées qui permettent de repérer les déplacements des trois atomes. On a même donné les matrices (de taille 9×9) ainsi associées à l'isométrie C_2 et à l'isométrie σ_1. Donner les deux matrices restantes, associées aux isométries E et σ_2.

2) Calculer le caractère de la représentation ainsi obtenue.

3) Décomposer ce caractère en somme de caractères irréductibles.

Exercice 10

1) Rappeler le groupe des isométries de la molécule d'ammoniac NH_3. On appellera G ce groupe.

2) Dessiner cette molécule. En procédant comme pour la molécule d'eau, dessiner douze axes de coordonnées qui permettent de rendre compte des vibrations de cette molécule.

3) Donner la représentation de G ainsi obtenue. Autrement dit, pour chaque élément g de G, donner la matrice (de taille 12×12) qui correspond à l'isométrie g.

4) Calculer le caractère de cette représentation.
5) Le décomposer en somme de caractères irréductibles.