Outils mathématiques pour la chimie

(GLMA307 – Année universitaire)

Corrigé de l'examen de première session

Exercice 1

1) $\det f = -1$.

2)

$$\begin{aligned}
\det(f-\lambda \mathrm{Id}) &= \frac{1}{3^3}\begin{vmatrix} 2-3\lambda & -1 & -2 \\ -1 & 2-3\lambda & -2 \\ -2 & -2 & -1-3\lambda \end{vmatrix} \\
&= \frac{1}{27}((2-3\lambda)^2(-1-3\lambda)-4-4-4(2-3\lambda)-(-1-3\lambda)-4(2-3\lambda)) \\
&= \frac{1}{27}((4-12\lambda+9\lambda^2)(-1-3\lambda)-23+27\lambda) \\
&= \frac{1}{27}(-27+27\lambda^2-27\lambda^3+27\lambda) \\
&= -(\lambda-1)^2(\lambda+1)
\end{aligned}$$

Les valeurs propres sont 1 (double) et -1.

3) L'isométrie f est impropre car son déterminant vaut -1. De plus elle admet 1 comme valeur propre. Donc c'est une réflexion. Le plan de réflexion est l'espace propre associé à la valeur propre 1, c'est-à-dire $\mathrm{Ker}\,(f-\mathrm{Id})$, ou encore le noyau de la matrice

$$\begin{pmatrix} -1 & -1 & -2 \\ -1 & -1 & -2 \\ -2 & -2 & -4 \end{pmatrix}$$

C'est donc le plan d'équation $x+y+2z=0$.

Exercice 2

Le caractère χ se décompose en $\chi = a_1\chi_1 + a_2\chi_2 + a_3\chi_3$ où les nombres a_i sont donnés par $a_i = (\chi|\chi_i)$.

$$\begin{aligned}
a_1 &= (\chi|\chi_1) = \frac{1}{6}(1\times 12 + 2\times 1\times 0 + 3\times 1\times 2) = 3 \\
a_2 &= (\chi|\chi_2) = \frac{1}{6}(1\times 12 + 2\times 1\times 0 + 3\times(-1)\times 2) = 1 \\
a_3 &= (\chi|\chi_3) = \frac{1}{6}(2\times 12 + 2\times(-1)\times 0 + 3\times 0\times 2) = 4
\end{aligned}$$

On obtient donc $\chi = 3\chi_1 + \chi_2 + 4\chi_3$.

Exercice 3

1) $G = \{\mathrm{Id}, R, R^2, R^3, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4\}$

2) On obtient la table de multiplication suivante (le produit $gh = g\circ h$ est dans la case qui se trouve sur la ligne g et sur la colonne h).

	Id	R	R^2	R^3	σ_1	σ_2	σ_3	σ_4
Id	Id	R	R^2	R^3	σ_1	σ_2	σ_3	σ_4
R	R	R^2	R^3	Id	σ_2	σ_3	σ_4	σ_1
R^2	R^2	R^3	Id	R	σ_3	σ_4	σ_1	σ_2
R^3	R^3	Id	R	R^2	σ_4	σ_1	σ_2	σ_3
σ_1	σ_1	σ_4	σ_3	σ_2	Id	R^3	R^2	R
σ_2	σ_2	σ_1	σ_4	σ_3	R	Id	R^3	R^2
σ_3	σ_3	σ_2	σ_1	σ_4	R^2	R	Id	R^3
σ_4	σ_4	σ_3	σ_2	σ_1	R^3	R^2	R	Id

3) Les σ_i sont d'ordre 2, de même que R^2. Les rotations R et R^3 sont d'ordre 4. L'identité est d'ordre 1.

4) $P = \sigma_1.R^3.(\sigma_3\sigma_2).R.(\sigma_1\sigma_4).R^{-1} = \sigma_1.R^3.(R).R.(R).R^{-1} = \sigma_1.R = \sigma_4$
5) Le groupe G n'est pas commutatif puisque $\sigma_1\sigma_2 = R^3$ alors que $\sigma_2\sigma_1 = R \neq R^3$.
6) a) On sait *a priori* que tous les conjugués de σ_1 sont des symétries. Il faut cependant tous les calculer pour être sûr qu'il n'y a pas d'autres symétries dans la classe de σ_1 que celles que l'on va trouver ci-dessous.

$$\begin{aligned}
\mathrm{Id}\sigma_1\mathrm{Id} &= \sigma_1 \\
R\sigma_1R^{-1} &= R\sigma_1R^3 = \sigma_3 \\
R^2\sigma_1(R^2)^{-1} &= R^2\sigma_1R^2 = \sigma_1 \\
R^3\sigma_1(R^3)^{-1} &= R^3\sigma_1R = \sigma_3 \\
\sigma_1\sigma_1(\sigma_1)^{-1} &= \sigma_1 \\
\sigma_2\sigma_1(\sigma_2)^{-1} &= \sigma_2\sigma_1\sigma_2 = \sigma_3 \\
\sigma_3\sigma_1(\sigma_3)^{-1} &= \sigma_3\sigma_1\sigma_3 = \sigma_1 \\
\sigma_4\sigma_1(\sigma_4)^{-1} &= \sigma_4\sigma_1\sigma_4 = \sigma_3
\end{aligned}$$

Donc la classe de conjugaison de σ_1 est $\mathrm{Cl}\,(\sigma_1) = \{\sigma_1, \sigma_3\}$.

b) On a évidemment $\mathrm{Cl}\,(\mathrm{Id}) = \{\mathrm{Id}\}$. De plus $\mathrm{Cl}\,(R^2) = \{R^2\}$ car R^2 est la seule rotation d'angle π. R et R^3 sont conjugués car $\sigma_1R\sigma_1 = R^3$. De plus un conjugué de R est nécessairement une rotation d'angle $\pm\frac{\pi}{2}$, donc il ne peut pas y avoir d'autres éléments dans la classe de R. D'où $\mathrm{Cl}\,(R) = \{R, R^3\}$. Il ne reste plus que σ_2 et σ_4. Or ces éléments sont conjugués car $\sigma_1\sigma_2\sigma_1 = \sigma_4$. Il y a donc cinq classes de conjugaison, à savoir :

- $\{\mathrm{Id}\}$
- $\{R^2\}$
- $\mathrm{Cl}\,(R) = \{R, R^3\}$
- $\mathrm{Cl}\,(\sigma_1) = \{\sigma_1, \sigma_3\}$
- $\mathrm{Cl}\,(\sigma_2) = \{\sigma_2, \sigma_4\}$

c) Le nombre de caractères irréductibles est égal au nombre de classes de conjugaison. Donc il y a cinq caractères irréductibles.

d) On note $n_1, \ldots, n_5$ les degrés des représentations irréductibles. On sait que ces entiers vérifient la relation

$$\sum_{i=1}^{5} n_i^2 = \mathrm{Card}\, G = 8.$$

On sait aussi que tous les n_i sont supérieurs (ou égaux) à 1. En particulier pour tout i, n_i est égal à 1 ou 2 (sans quoi n_i^2 serait supérieur à 9). Il ne reste plus qu'à déterminer le nombre de caractères de degré 1 et le nombre de caractères de degré 2. Les n_i ne peuvent pas tous être égaux à 1 (car 5 est différent de 8). Donc l'un d'entre eux au moins est égal à 2, disons $n_1 = 2$. On a alors $n_2^2 + \cdots + n_5^2 = 4$ donc les autres sont tous égaux à 1. Conclusion : il y a un caractère irréductible de degré 2, et quatre de degré 1.

7) a)

$$[\mathrm{Id}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad [R] = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad [R^2] = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [R^3] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$[\sigma_1] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [\sigma_2] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad [\sigma_3] = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad [\sigma_4] = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

b) Il suffit de calculer la trace de chaque matrice. On trouve :

	Id	$\{R, R^3\}$	R^2	$\{\sigma_1, \sigma_3\}$	$\{\sigma_2, \sigma_4\}$
χ_1	2	0	-2	0	0

c) On calcule $(\chi_1|\chi_1) = \frac{1}{8}(2^2 + 0 + (-2)^2 + 0 + 0) = 1$. Donc ρ_1 est irréductible.

8) et 9) Soit χ un caractère de degré 1 de G. On note a, b, c, d ses valeurs, comme dans le tableau suivant.

	Id	$\{R, R^3\}$	R^2	$\{\sigma_1, \sigma_3\}$	$\{\sigma_2, \sigma_4\}$
χ	1	a	b	c	d

Comme χ est un morphisme de groupes, on a nécessairement

$$\begin{aligned}
& a = \chi(R) = \chi(\sigma_2\sigma_1) = \chi(\sigma_2)\chi(\sigma_1) = cd \\
\text{et} \quad & b = \chi(R^2) = \chi(R)^2 = a^2
\end{aligned}$$

si bien que χ est entièrement déterminé par c et d. De plus, c et d sont égaux à 1 ou -1 car

$$\begin{aligned} & c^2 = \chi(\sigma_1)^2 = \chi(\sigma_1^2) = \chi(\mathrm{Id}) = 1 \\ \text{et} \qquad & d^2 = \chi(\sigma_2)^2 = \chi(\sigma_2^2) = \chi(\mathrm{Id}) = 1 \end{aligned}$$

Il n'y a donc que quatre possibilités pour le couple (c, d). Or on sait *a priori* (*cf.* question 5) qu'il y a exactement quatre caractères de degré 1. Donc les quatre fonctions que l'on obtient en considérant chacun des couples (c, d) possibles sont toutes des caractères. On obtient la table de caractères suivante :

	Id	$\{R, R^3\}$	R^2	$\{\sigma_1, \sigma_3\}$	$\{\sigma_2, \sigma_4\}$
A	1	1	1	1	1
B	1	-1	1	1	-1
C	1	-1	1	-1	1
D	1	1	1	-1	-1
χ_1	2	0	-2	0	0