Outils mathématiques pour la chimie

(GLMA307 – Année universitaire 2011–2012)

Examen, 1ère session (16 janvier 2012)

Documents, notes de cours ou de TD, téléphones portables, calculatrices sont interdits. Justifiez toutes vos réponses.

Durée : 2h

Exercice 1

Soit f l'isométrie de matrice

$$\frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2 & -1 & -2 \\ -1 & 2 & -2 \\ -2 & -2 & -1 \end{pmatrix}.$$

1) Calculer le déterminant de f.
2) Calculer les valeurs propres de f.
3) Est-ce une rotation, une réflexion ou une rotation impropre ? Déterminer les éléments géométriques.

Exercice 2

Soit $G = \mathrm{Isom}(NH_3)$ le groupe des isométries de la molécule d'ammoniac. On rappelle sa table de caractères.

C_{3v}	Id	$2C_3$	$3\sigma_v$
χ_1	1	1	1
χ_2	1	1	-1
χ_3	2	-1	0

L'étude des vibrations internes de la molécule d'ammoniac conduit à introduire une représentation de degré 12 du groupe C_{3v} dont le caractère χ est donné par :

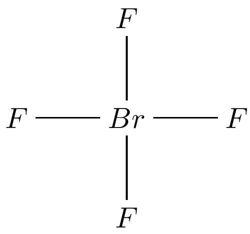
$$\begin{aligned} \chi(\mathrm{Id}) &= 12 \\ \chi(C_3) &= 0 \\ \chi(\sigma_v) &= 2 \end{aligned}$$

Décomposer ce caractère en somme de caractères irréductibles.

Exercice 3 (problème)

Soit $G = \mathrm{Isom}(BrF_5)$ le groupe des isométries de la molécule de pentafluorure de brome. On rappelle que la molécule BrF_5 a une structure de pyramide à base carrée.

On place la molécule dans un repère orthonormé de la manière suivante. L'atome Br est situé à l'origine O du repère. Les quatre atomes F qui forment la base carrée de la pyramide sont dans le plan $z = 0$, plus précisément aux points de coordonnées $(1, 0, 0), (0, 1, 0), (-1, 0, 0), (0, -1, 0)$. Le dernier atome F est situé au point de coordonnées $(0, 0, 1)$. On notera R la rotation d'angle $\frac{\pi}{2}$ autour de l'axe (Oz), et σ_i la réflexion de plan P_i pour $i \in \{1, 2, 3, 4\}$, où P_1, P_2, P_3 et P_4 sont les plans « verticaux » d'équations $y = 0$ pour P_1, $x = y$ pour P_2, $x = 0$ pour P_3 et $x = -y$ pour P_4. Ci-dessous on a représenté le plan $z = 0$ et la trace des P_i dans ce plan.



1) Faire la liste des huit éléments de G.
2) Montrer les relations $R\sigma_1 = \sigma_2$, $R^2\sigma_1 = \sigma_3$ et $R^3\sigma_1 = \sigma_4$, puis compléter la table de multiplication de G suivante (la recopier sur votre copie).

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

3) Calculer l'ordre de chaque élément.
4) Calculer le produit $P = \sigma_1 R^3 \sigma_3 \sigma_2 R \sigma_1^{-1} \sigma_4 R^{-1}$.
5) Le groupe G est-il commutatif ? (Justifier soigneusement la réponse.)
6) a) Calculer la classe de conjugaison de σ_1.
   b) Regrouper les éléments de G en classes de conjugaison.
   c) Quel est le nombre de caractères irréductibles de G ?
   d) Quels sont les degrés des caractères irréductibles ?
7) Soit $\rho_1 : G \to \mathrm{GL}_2(\mathbb{R}) \subset \mathrm{GL}_2(\mathbb{C})$ la représentation de G obtenue en considérant l'action de chaque isométrie sur le plan $z = 0$ représenté ci-dessus.
   a) Donner les huit matrices associées à la représentation ρ_1 dans la base canonique $\mathcal{B} = (e_1, e_2)$.
   b) Calculer le caractère χ_1 de ρ_1.
   c) Montrer que ρ_1 est irréductible.
8) Déterminer tous les caractères de degré 1 de G.
9) Dresser la table des caractères de G.