Outils mathématiques pour la chimie

(GLMA307 – Année universitaire 2012–2013)

Feuille de TD 4 : Isométries de $\mathbb{R}^3$

Exercice 1

Parmi les matrices suivantes, lesquelles représentent des isométries ?

$$\frac{1}{3}\begin{pmatrix} -1 & 2 & -2 \\ 2 & -1 & -2 \\ -2 & -2 & -1 \end{pmatrix} \qquad \frac{1}{7}\begin{pmatrix} 3 & -6 & -2 \\ -6 & -2 & -3 \\ 2 & 3 & -6 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 2 & 1 & -2 \\ 2 & 2 & -3 \end{pmatrix}$$

Exercice 2

Dans $\mathbb{R}^3$ muni d'une base orthonormale (i, j, k), étudier les applications linéaires définies par les matrices

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \frac{1}{3}\begin{pmatrix} -2 & -2 & 1 \\ 1 & -2 & -2 \\ -2 & 1 & -2 \end{pmatrix} \qquad \frac{1}{3}\begin{pmatrix} -1 & 2 & -2 \\ 2 & -1 & -2 \\ -2 & -2 & -1 \end{pmatrix} \qquad \frac{1}{7}\begin{pmatrix} 3 & -6 & 2 \\ -6 & -2 & 3 \\ 2 & 3 & 6 \end{pmatrix}.$$

Exercice 3

Donner la matrice, dans la base canonique de $\mathbb{R}^3$, des isométries suivantes. Calculer la trace des matrices obtenues.

1) La rotation d'angle $\frac{\pi}{3}$ et d'axe (Oz).
2) La rotation d'angle $\frac{\pi}{2}$ et d'axe (Oy).
3) La réflexion de plan (Oxy).
4) La réflexion de plan passant par les points de coordonnées

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \text{ et } \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

5) La rotation d'angle π et d'axe perpendiculaire au plan décrit à la question précédente.
6) La composée de la rotation d'angle $\frac{\pi}{3}$ et d'axe (Ox), suivie de la réflexion de plan perpendiculaire à $(0x)$ (« rotation impropre »). Qu'obtient-on si l'on compose ces isométries dans l'autre sens ?
7) La composée de la rotation d'angle $\frac{\pi}{4}$ et d'axe (Oy), suivie de la réflexion de plan perpendiculaire au vecteur $(1, 1, 0)$ (« rotation impropre »). Vérifier le résultat en donnant d'abord la matrice A de la rotation, puis la matrice B de la symétrie, et en calculant le produit BA. Comparer la trace de la matrice produit et le produit des traces. Le produit AB est-il égal au produit BA ? Comparer la trace de AB et la trace de BA.

Exercice 4

Donner l'axe et l'angle des deux « rotations impropres » dont on a calculé les matrices (AB et BA) à la dernière question de l'exercice précédent.

Exercice 5

La rotation impropre $-\mathrm{Id}$ est parfois appelée *l'inversion*. Elle est très différente des autres rotations impropres car son espace propre E_{-1} est de dimension 3 et non 1. On dit qu'une molécule possède un centre d'inversion si l'inversion fait partie de son groupe d'isométries. On peut voir l'inversion comme la rotation impropre d'angle π autour de n'importe quel axe, ou bien comme la symétrie centrale de centre l'origine.

1) Vous convaincre à l'aide d'une figure que ce sont bien là deux descriptions de la même isométrie.
2) Parmi les molécules suivantes, le *trans*-1,2 dichloroéthylène, NH_3, le *cis-1,2-* dichloroéthylène et $CoCl_6^{3-}$, lesquelles possèdent un centre d'inversion ? Pour les molécules ayant un centre d'inversion, numérotez les atomes et dessinez la molécule avant et après l'opération.

Exercice 6

Dessiner la molécule de méthane CH_4 (tétraédrique), puis trouver un axe C_2 (axe de rotation d'angle π). Pouvez-vous trouver une isométrie qui réalise une permutation « circulaire » des atomes d'hydrogènes ? (*i.e.* qui envoie H_1 sur H_2, H_2 sur H_3, H_3 sur H_4, et H_4 sur H_1 pour une numérotation convenable).

Exercice 7

Donner tous les « éléments de symétrie » (plan de symétrie, axe de rotation...) de la molécule de benzène C_6H_6.

Exercice 8

Trouver un axe de rotation impropre S_6 dans le complexe octaédrique $CoCl_6^{3-}$. *Indication :* Commencer par chercher un axe de rotation d'ordre 3.