

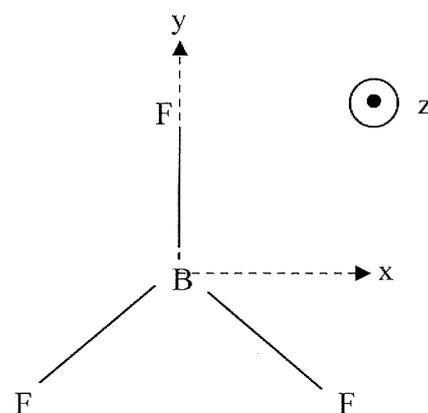
Examen de TG4

Question de cours ;

1. Qu'est ce qu'une représentation d'une opération de symétrie, Qu'est ce que la table de caractère d'un groupe de symétries ?
2. Sur quel type d'espace vectoriel peut on représenter l'action des opérations de symétrie d'une molécule, donner quelques exemples ?
3. Quel défaut présente une représentation matricielle des OS d'une molécule, comment contourner ce problème ?
4. Y a-t-il une relation entre le nombre de classes d'équivalence d'un groupe et le nombre de représentations irréductibles. Si oui laquelle ?
5. Qu'est ce que la dimension d'une représentation des OS d'un groupe. Quelle relation vérifient les dimensions des représentations irréductibles d'un groupe ?

Exercice : Etude de la molécule de BF₃

6. Sachant que le Bore est dans la deuxième ligne et la 3^{ème} colonne de la classification périodique des éléments, Donner la représentation de Lewis de la molécule BF₃ ?
7. Sachant que cette molécule est plane, quel est le groupe ponctuel de symétrie de cette molécule ? Représenter sur plusieurs schémas l'effet de chaque opération de symétrie de cette molécule.
8. Représenter les OS du groupe de BF₃ par des matrices 3*3 sur la base {e₁, e₂, e₃} de l'espace physique engendrant les axes x, y et z de la figure précédente. Simplifier cette représentation en ne gardant que la trace de ces matrices. Cette représentation est elle réductible ? Si oui réduire cette représentation.



VIBRATIONS

9. Quel est le nombre de degrés de liberté de cette molécule ? Combien de modes de vibration doit-on trouver pour BF₃ ?
10. Déterminer le nombre d'atomes non déplacés pour chaque classe d'équivalence du groupe. En utilisant le tableau suivant, déterminer la contribution au caractère de la représentation de chaque atome non déplacé.

Symétrie	E	C _n	σ	S _n	i
Contribution	3	1+2 cos(2π/n)	1	-1+2 cos(2π/n)	-3

11. Déterminer les caractères de la représentation réductible correspondant aux coordonnées de déplacement. On note Γ₀ cette représentation.
12. Réduire la représentation réductible Γ₀

13. Identifier les représentations irréductibles correspondant aux translations le long d'un axe et aux rotations autour d'un axe du repère cartésien. On note Γ_T et Γ_R l'ensemble de ces RI.
14. En déduire l'ensemble des représentations irréductibles noté Γ_{vib} correspondant au mouvement de vibrations de la molécule. Retrouve-t-on bien le nombre de modes de vibration calculés en 3 ?
15. En déduire le nombre de modes de vibration actifs en IR de la molécule BF_3 . On donnera les détails du raisonnement permettant de déterminer ces modes de vibrations actifs en IR en précisant la symétrie des états vibrationnels fondamentaux et excités ainsi que la symétrie du moment dipolaire μ de la molécule et de la probabilité de transition en spectroscopie IR.

CONSTRUCTION DES ORBITALES MOLECULAIRES DE BF_3

16. A quelle représentation irréductible appartiennent les orbitales 2s, 2px, 2py, 2pz de l'atome de bore?
17. Construction des orbitales de symétrie des atomes de fluor.
 - a- Bâtir une représentation réductible des orbitales 2s des atomes de fluor.
 - b- Réduire cette représentation en représentations irréductibles.
 - c- Construire les combinaisons linéaires des orbitales atomiques servant de bases aux représentations irréductibles. On utilisera l'orbitale 2s d'un des 3 atomes de F comme élément générateur.
 - d- Bâtir une représentation réductible des orbitales 2pz des atomes de fluor, Réduire cette représentation en représentations irréductibles.
 - e- Bâtir une représentation réductible de dimension 6 à partir des orbitales 2px et 2py des atomes de fluor. Réduire cette représentation en représentations irréductibles.
18. Rappeler la propriété de symétrie des intégrales de recouvrement utilisée dans la construction de ces OMs. En déduire les Orbitales Atomiques susceptibles de se recouvrir pour générer des orbitales moléculaires et le nombre d'Orbitales moléculaires de la molécule de BF_3 . Tracer un diagramme qualitatif des niveaux d'énergie de la molécule. *On considèrera que les énergies des OA 2s et 2p associées aux 3 atomes F sont plus basses que les niveaux d'énergie des OA 2s et 2p de l'atome de B.*