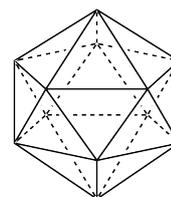
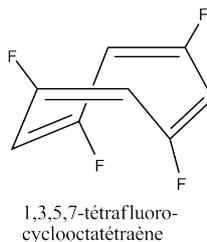
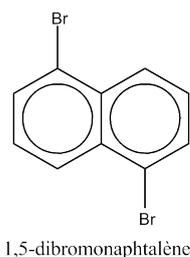
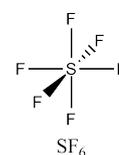
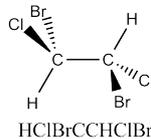
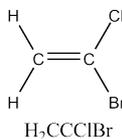
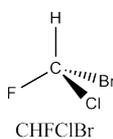
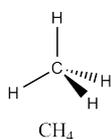
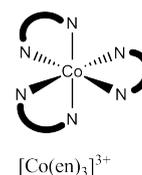
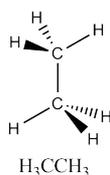
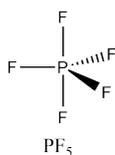
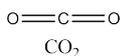


Corrigés 1 et 2 : Symétrie et groupes ponctuels

Exercice 1.1

Pour les molécules suivantes, identifiez

- les axes de rotation propres
- les plans de réflexion
- les centres d'inversion
- les axes de rotation impropres



dodécahydro-closo-dodécarborate (2-) ion, B₁₂H₁₂²⁻ (chaque sommet est composé d'une unité BH)

* (en), l'éthylènediamine, est représenté par : N

Tableau de résumé :

Molécule	Axes de rotation propres	Plans de réflexion	Centre d'inversion	Axes de rotation impropres	Groupe ponctuel
HCl	C _∞	σ _v	non	non	C _{∞v}
CO ₂	C _∞ , ∞ × C ₂	σ _h , ∞ × σ _v	oui	S _∞	D _{∞h}
PF ₅	C ₃ , 3C ₂	σ _h , 3σ _v	non	S ₃	D _{3h}
H ₃ CCH ₃	C ₃ , 3C ₂	3σ _d	oui	S ₆	D _{3d}
Co(en) ₃	C ₃ , 3C ₂	non	non	non	D ₃
CH ₄	4C ₃ , 3C ₂	6σ _d	non	3S ₄	T _d
CHFCIBr	non	non	non	non	C ₁
H ₂ CCCIBr	non	σ	non	non	C _s
HCIBrCCHCIBr	non	non	oui	non	C _i
SF ₆	3C ₄ , 4C ₃ , 3C ₂ ² ≡ C ₂ , 6C ₂ ¹	3σ _h , 6σ _d	oui	4S ₆ , 3S ₄	O _h
C ₁₀ H ₆ Br ₂	C ₂	σ _h	oui	non	C _{2h}
C ₈ H ₄ F ₄	C ₂	non	non	S ₄	S ₄
B ₁₂ H ₁₂	6C ₅ , 10C ₃ , 15C ₂	15σ	oui	6S ₁₀ , 10S ₆	I _h

Description détaillée :

- HCl** : Axe de rotation : dans la liaison H-Cl. Les plans de réflexion σ_v incluent l'axe de rotation.
- CO₂** : Axe de rotation principal (et axes de rotations impropres) : dans la liaison C=O. Axes de rotation C_2 : perpendiculaires à l'axe principal à travers le carbone. Plans de réflexion σ_v : incluent l'axe principal et un des axes C_2 . Plan de réflexion σ_h : perpendiculaire à l'axe principal passant par C, inclut tous les axes C_2 .
- PF₅** : Axe de rotation principal (et axe de rotation impropre) : F-P-F. Axes de rotation C_2 : Dans les liaisons P-F perpendiculaires à l'axe F-P-F. Plan de réflexion σ_h : perpendiculaire à l'axe principal, incluant l'atome de phosphore et trois atomes de fluor. Plans de réflexion σ_v : incluent l'axe principal et un atome de fluor.
- H₃CCH₃** : Axe de rotation principal (et axe de rotation impropre) : le long de la liaison C-C. Axes de rotation C_2 : perpendiculaires à l'axe principal, passent à travers le centre de la liaison C-C entre les deux liaisons C-H en *gauche* des deux atomes de carbones. Plans de réflexion σ_d : dans les plans H-C-C-H, coupant en son milieu l'angle entre deux axes C_2 .
- Co(en)₃** : Axe de rotation principal : du centre du triangle N-N-N (où les trois ligands "en" ont tous un partenaire en arrière du plan) à travers l'atome central. Axes de rotation C_2 : à travers le milieu d'un ligand "en" et l'atome central.
- CH₄** : Axes de rotation principaux : liaisons C-H. Axes de rotation C_2 (et axes de rotation impropres) : bissectent deux liaisons C-H (coupent en deux l'angle H-C-H). Plans de réflexion σ_d : incluent H-C-H, au milieu de deux axes C_2 .
- CHFCIBr** : Pas d'élément de symétrie supérieur à l'identité.
- H₂CCClBr** : Plan miroir dans le plan de la molécule, désigné σ_h par convention.
- HCIBrCCHClBr** : Le centre d'inversion est le seul élément de symétrie supérieur à l'identité dans cette molécule.
- SF₆** : Axes de rotation principaux (et axes de rotation impropres S_4) : F-S-F. Axes de rotation C_3 (et axes de rotation impropres S_6) : à travers deux faces parallèles définies par trois atomes de fluor. Axes de rotations C_2' ($\neq C_4$) : bissectrices des angles droits F-S-F. Plans de réflexion σ_d : incluent deux axes C_3 , un axe C_2' et bissectent les angles de deux paires d'autres axes C_2' . Plans de réflexion σ_h : contiennent S et quatre F. Centre d'inversion : S.
- C₁₀H₆Br₂** : Axe de rotation : perpendiculaire au plan de la molécule, au milieu de la liaison C=C centrale. Plan miroir : plan de la molécule.
- C₈H₄F₄** : Axe de rotation (et axe de rotation impropre) : perpendiculaire au plan formé par deux liaisons doubles parallèles.
- B₁₂H₁₂** : Axes de rotation principaux (et axes de rotation impropres S_{10}) : à travers deux sommets et le centre de l'icosaèdre. Axes de rotation C_3 (et axes de rotation impropres S_6) : à travers deux faces parallèles définies par trois sommets. Axes de rotation C_2 : à travers deux arêtes parallèles. Plans miroirs : incluant deux arêtes parallèles, coupant en tout 4 faces triangulaires en deux. Centre d'inversion : centre de l'icosaèdre.

Exercice 1.2

Déterminez les éléments de symétrie du cyclohexane (conformation chaise et bateau)

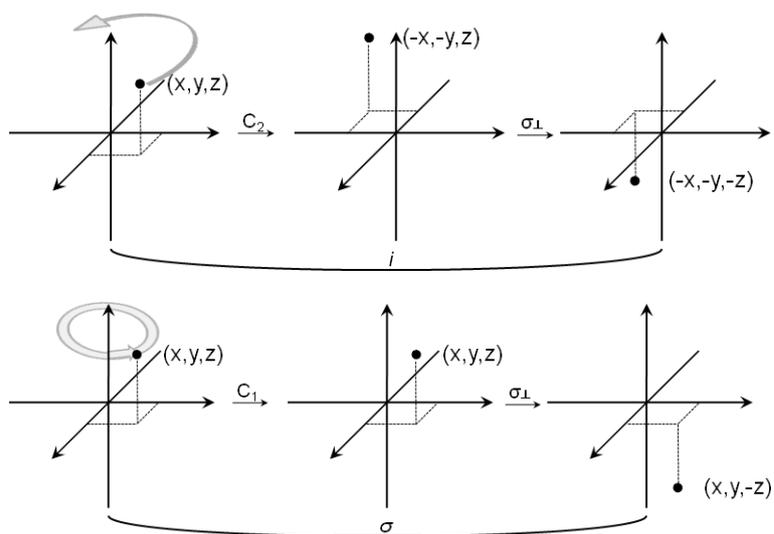
Le cyclohexane dans la conformation bateau a un axe C_2 perpendiculaire au plan des quatre carbones formant la base du bateau ainsi que deux plans miroirs qui incluent cet axe et sont perpendiculaires l'un à l'autre. Le cyclohexane dans la conformation chaise a un axe C_3 perpendiculaire au plan moyen du cycle (incluant un carbone sur deux), trois axes C_2 passant au centre des liaisons diamétralement opposées et trois plans miroirs passant à travers les atomes de carbone diamétralement opposés, perpendiculairement au plan moyen du cycle. La molécule contient également un centre d'inversion et un axe S_6 .

Exercice 1.3

Démontrez à l'aide d'un diagramme de coordonnées que $S_2 \equiv i$ et $S_1 \equiv \sigma$.

S_2 se décompose en C_2 suivi d'une réflexion par un plan perpendiculaire à l'axe, ce qui correspond à une inversion i .

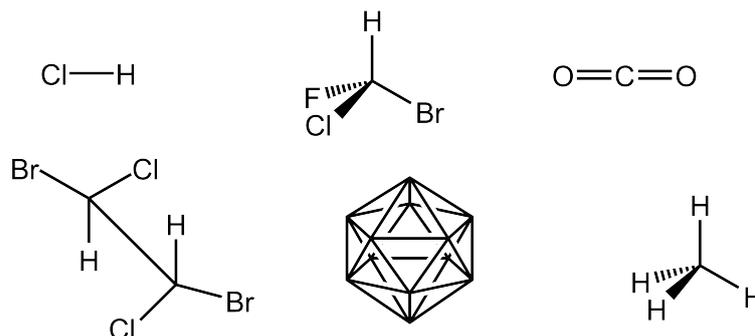
S_1 se décompose en C_1 suivi d'une réflexion par un plan perpendiculaire à l'axe, ce qui correspond à une réflexion par rapport au plan xy dans notre exemple.



Exercice 2.1

Divisez les molécules suivantes en deux groupes :

- cas de basse symétrie (identité plus zéro ou une opération)
- cas spéciaux de symétrie élevée (groupes T_d , O_h , I_h ou linéaires)



Toutes les molécules, sauf les deux alcanes halogénés, appartiennent à des groupes de symétrie élevée.

Exercice 2.2

Déterminez les groupes ponctuels pour les molécules de l'exercice 1.1.

Voir correction de l'exercice 1.1.

Exercice 2.3

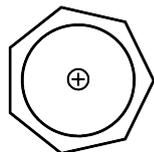
Déterminez le groupe ponctuel des objets suivants et encerclez les objets chiraux :

- | | |
|------------------------------------|--|
| Une paire de lunettes
C_s | Un Erlenmeyer sans label
$C_{\infty v}$ |
| Une vis
C_1 | Le chiffre 96
C_{2h} |
| Une balle de tennis
D_{2d} | Une cuillère
C_s |
| L'extérieur d'une voiture
C_s | Une page de papier imprimé
C_1 |
| | L'intérieur d'une voiture
C_1 |

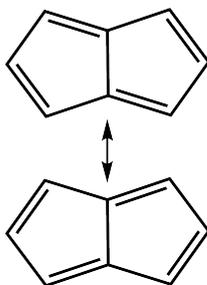
Exercice 2.4

Pour les molécules d'hydrocarbures suivantes, indiquez :

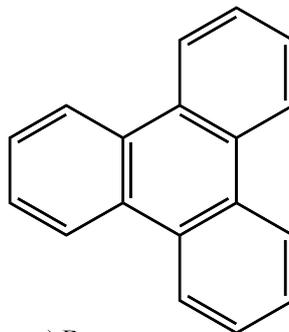
- Le groupe ponctuel
- La liste des opérations de symétrie
- Le nombre d'atomes de carbone chimiquement distincts
- Le nombre de signaux ^1H NMR (sans changement conformationnel)



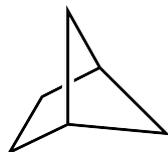
- D_{7h}
- $\{E, C_7, S_7, 7C_2, \sigma_h, 7\sigma_v\}$
- 1
- 1



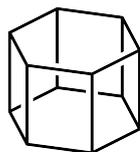
- D_{2h}
- $\{E, C_2, C'_2, C''_2, i, 3\sigma\}$
- 3
- 2



- D_{3h}
- $\{E, C_3, S_3, 3C_2, \sigma_h, 3\sigma_v\}$
- 3
- 2



- C_{2v}
- $\{E, C_2, 2\sigma_v\}$
- 3
- 4



- D_{6h}
- $\{E, C_6, S_6, C_3, i, S_3, C_6^3=C_2, 3C'_2, 3C''_2, 3\sigma_d, 3\sigma_v, \sigma_h\}$
- 1
- 1