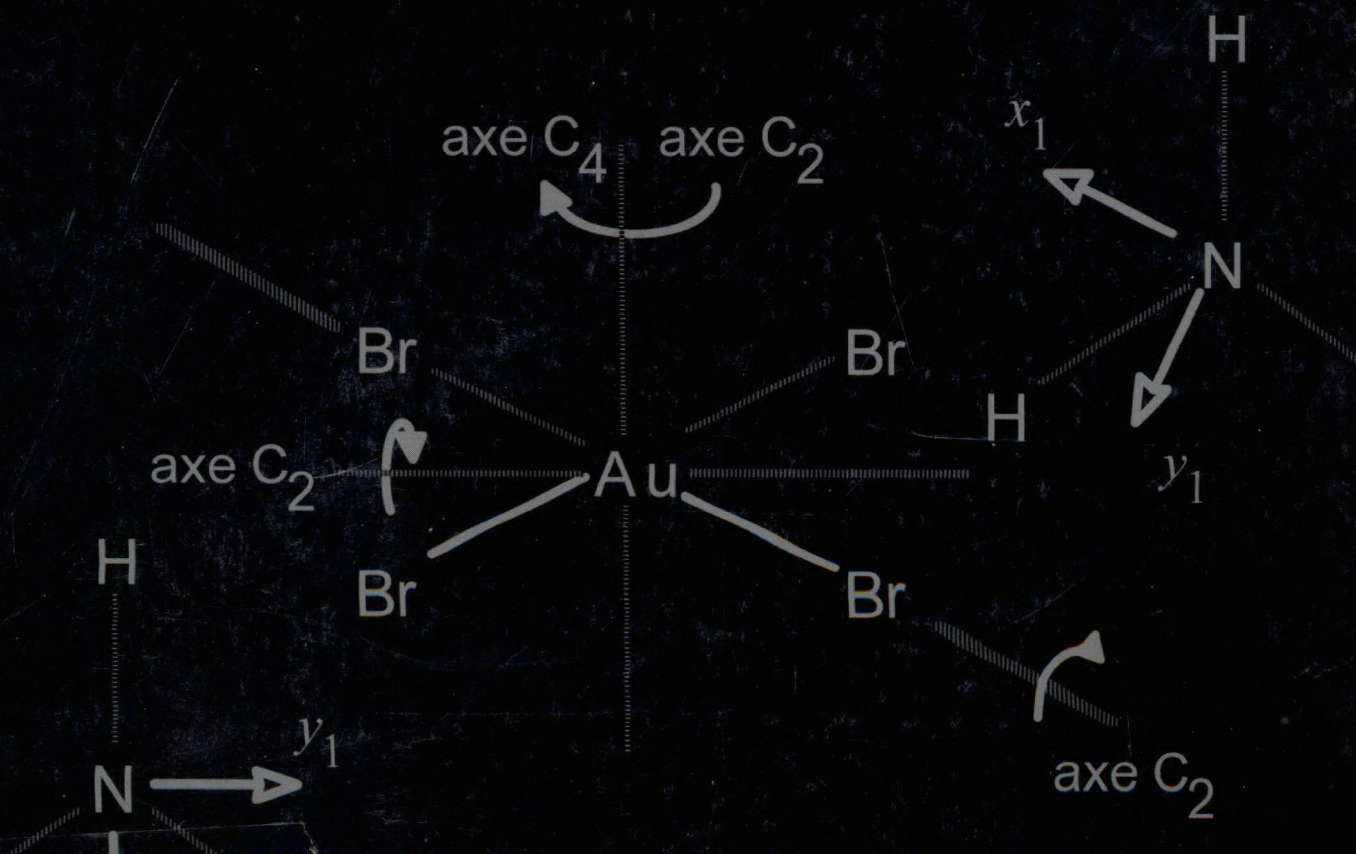


CHIMIE ET THÉORIE DES GROUPES

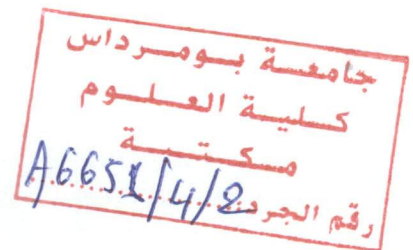
• Paul H. WALTON •

Traduit de l'anglais par François X. Sauvage



CHIMIE ET THÉORIE DES GROUPES

• Paul H. WALTON •



Traduit de l'anglais par François X. Sauvage
(École des Hautes Études Industrielles, Lille)

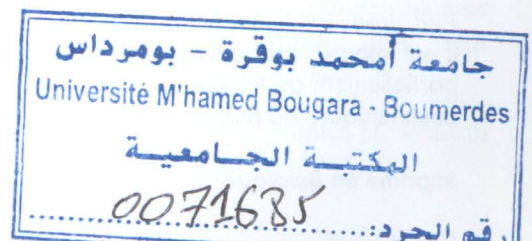
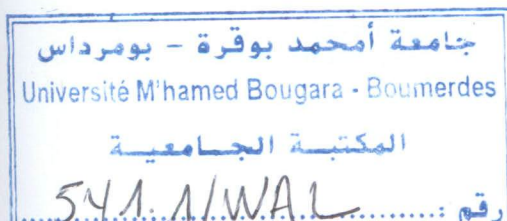


Table des matières

	Page
Avant-propos	5
Avant-propos à l'édition française.....	6
<u>Qu'est-ce que la théorie des groupes ?</u>	7
<u>Chapitre 1 - Symétrie : le début</u>	9
1.1. Une initiation à la symétrie	9
1.2. Axes de rotation	9
1.3. Plans de réflexion	12
1.4. Centres d'inversion	18
1.5. Axes de rotation impropres	23
1.6. Opérations successives, identité, inverse et classe	30
1.6.1 Opérations successives	30
1.6.2. Identité	34
1.6.3. Inverse.....	35
1.6.4. Classe.....	35
1.7. Groupes ponctuels	36
1.8. Résumé	41
<u>Chapitre 2 - Qu'est-ce qu'un groupe ?</u>	42
2.1. Qu'est-ce qu'un groupe ?	42
2.2. Un exemple de groupe.....	42
2.3. Propriétés d'un groupe	44
2.4. Représentations d'un groupe	45
2.5. Représentations de la symétrie moléculaire	48
2.6. Résumé	52
<u>Chapitre 3 - D'autres représentations</u>	53
3.1. D'autres représentations et bases de représentation	53
3.2. Représentations matricielles.....	57
3.3. Représentations matricielles de la symétrie moléculaire.....	60
3.4. Représentations réductibles et représentations irréductibles.....	68
3.5. Caractères	70
3.6. Résumé	73
<u>Chapitre 4 - Le cœur de la théorie des groupes</u>	74
4.1. Que nous ont appris les mathématiques ?	74
4.2. Tables de caractères, représentations irréductibles et symboles de Mulliken	74
4.3. La formule de réduction	76
4.4. L'équation de Schrödinger et la théorie des groupes	78
4.5. Résumé	83
<u>Chapitre 5 - La théorie des groupes à l'ouvrage : vibrations moléculaires</u>	84
5.1. Quelques généralités.....	84
5.2. Vibrations moléculaires.....	84
5.2.1. Une base pour décrire les vibrations.....	84
5.2.2. Création d'une représentation réductible.....	86
5.2.3. Réduction de la représentation.....	87
5.2.4. Examen des représentations irréductibles.....	88

5.3. Coordonnées internes	92
5.4. Opérateurs de projection	96
5.5. Spectroscopie et règles de sélection	106
5.5.1. Spectroscopie infrarouge.....	106
5.5.2. Spectroscopie Raman.....	108
5.6. Résumé	115
Chapitre 6 - La théorie des groupes à l'ouvrage : orbitales moléculaires	117
6.1. Quelques généralités.....	117
6.2. Molécules avec un atome « central ».....	117
6.3. Molécules à liaisons π et sans atome « central »	129
6.4. Résumé	138
Annexe 1 - Tables de caractères d'usage courant en chimie	139
Annexe 2 - Tables de produits directs	146
Annexe 3 - Organigramme de recherche d'un groupe de symétrie	148
Table des matières	149

CHIMIE ET THÉORIE DES GROUPES

• Paul H. WALTON •

La théorie des groupes appartient essentiellement aux mathématiques, mais son utilisation revêt une importance primordiale en chimie. Elle a joué un grand rôle dans l'élaboration des théories du champ cristallin et des orbitales moléculaires. Son utilisation en spectroscopie électronique ou de vibration permet, entre autres, de déterminer la structure et la géométrie des molécules.

Cet ouvrage présente les concepts de base de la théorie des groupes et ses applications à la chimie. Il aborde successivement la notion de symétrie dans les molécules, les éléments et les opérations de symétrie, les groupes de symétrie, la représentation d'un groupe, les représentations réductibles et représentations irréductibles, la réduction des représentations. Il développe ensuite deux applications de la théorie des groupes : le calcul des vibrations moléculaires et des orbitales moléculaires.

Ce manuel est plus particulièrement destiné aux professeurs et étudiants des 2^e et 3^e cycles en chimie, physique, sciences et techniques, ainsi qu'à tous les débutants dans ce domaine. Les connaissances mathématiques habituellement utilisées en théorie des groupes ont été ici réduites à leur plus simple expression.

Présenté sous forme de cours et d'exercices d'applications, ce livre permet au lecteur d'acquérir progressivement des bases solides nécessaires pour aborder d'autres ouvrages plus ardues.

Paul H. WALTON

Professeur de chimie bioinorganique à l'Université de York (Grande-Bretagne), il anime un groupe de recherche travaillant principalement dans le domaine de la catalyse et de la chimie de coordination.

François X. SAUVAGE

Chercheur au CNRS, il enseigne la théorie des groupes à l'École des Hautes Études Industrielles à Lille (France).