MATHÉMATIQUES POUR LA CHIMIE - Chapitre1

Bouchaib FERRAHI/// www.ferrahi.ma

14 novembre 2017

Présentation du module

- Filière : SMC
- Semestre :S3
- Code : M20
- intitulé : MATHÉMATIQUES POUR LA CHIMIE
- Objectifs :
  1. Maîtrise des outils Mathématiques utilisés en Physique et en Chimie
  2. Application de démarches scientifiques face à des problèmes théoriques et expérimentaux variés.
- Pré-requis :Analyse 1 et 2, Algèbre 1 et 2
- Volume horaire : 21H de cours + 21H de TD

Contact

Bouchaib FERRAHI

- Département de Mathématiques - Faculté des Sciences - Tétouan
- ferrahi@yahoo.com
- www.ferrahi.ma
- www.facebook.com/bouchaib.ferrahi
- www.linkedin.com/in/bouchaib-ferrahi-ph-d-hdr-99aa2320

Plan

Introduction

- Pourquoi un cours de Mathématiques pour les étudiants de la filière SMC ?
- Quelle approche pédagogique ?

Théorie des groupes

Théorie des groupes

La théorie des groupes est une discipline mathématique, partie de l'algèbre générale, elle étudie les structures algébriques des ensembles appelés "Groupes".

La théorie des groupes est très utilisée en chimie :

• Elle permet de simplifier l'écriture de l'Hamiltonien d'une molécule en exploitant ses symétries;

• Elle permet de calculer les orbitales moléculaires comme somme d'orbitales atomiques;

• En spectroscopie vibrationnelle, elle permet de prédire le type de déformation que peut subir une molécule et selon la symétrie de sa déformation elle permet de prévoir si une transition peut etre visible dans les spectres.

Définition :

Soit G un ensemble non vide, et $\star : G \times G \to G$ une application de composition interne de G : $(a, b) \to a \star b \in G$.

$(G, \star)$ est un **Groupe** si :

- $\star$ est associative : pour tout a, b et c dans G on a : $a \star (b \star c) = (a \star b) \star c$;
- G possède un élément neutre pour $\star$: il existe e dans G tel que : $e \star a = a \star e = a$ pour tout a dans G ;
- Tout a dans G admet un symétrique (par rapport à $\star$) : pour tout a dans G, il existe b dans G tel que : $a \star b = b \star a = e$.

Remarques :

- Si, de plus, la loi $\star$ est commutative (i.e. $a \star b = b \star a$ pour tout a et b dans G) alors on dit que G est un groupe Commutatif ou Abélien ;
- Lorsque G à un nombre fini d'éléments, on dit que $(G, \star)$ est un Groupe fini et il est plus pratique de construire la table de la loi $\star$ (sur G) :

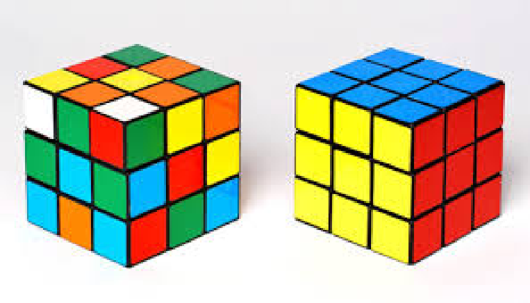
$\star \ulcorner$	a_1	a_2	...	a_n
a_1	$a_1 \star a_1$	$a_1 \star a_2$	...	$a_1 \star a_n$
a_2	$a_2 \star a_1$	$a_2 \star a_2$	...	$a_2 \star a_n$
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
a_n	$a_n \star a_1$	$a_n \star a_2$	...	$a_n \star a_n$

Exemples :

- $(\mathbb{Z},+)$, $(\mathbb{Q},+)$ et $(\mathbb{R},+)$ sont des Groupes Abéliens ;
- $(\mathbb{Q}^*,\times)$ et $(\mathbb{R}^*,\times)$ sont des Groupes Abéliens ;
- $(\mathbb{Z}/n\mathbb{Z},+)$ est un Groupe Abélien ;
- $\mathbb{Z}_n^*$ est un Groupe Abélien ;

Rubik's cube :

- Groupe "Rubik's cube"



Si on considère l'ensemble de toutes les manoeuvres du Rubik's cube, on peut observer que :

Rubik's cube :

- Une manoeuvre suivie d'une autre manoeuvre est encore une manoeuvre. (On dit que l'ensemble des manoeuvres est stable par l'opération "suivie de " ou que cette opération est une opération interne à l'ensemble des manoeuvres)
- L'opération "suivie de " est associative : la manoeuvre 1 suivie de la manoeuvre 2, suivie de la manoeuvre 3 est la même que la manoeuvre 1, suivie de la manoeuvre 2 suivie de la manoeuvre 3 (Pour bien comprendre, attention à la place de la virgule !).
- La manoeuvre qui consiste à ne rien faire ne fait rien ... On l'appelle la manoeuvre identité.
- Chaque manoeuvre peut être faite à l'envers. On obtient alors la manoeuvre inverse. (En composant une manoeuvre et son inverse, on obtient le manoeuvre identité)

Exemples :Groupes symétriques :

Si E un ensemble, l'ensemble $\mathcal{S}(E)$ des bijections de E dans E, muni de la composition des applications est un Groupe, appelé : Groupe symétrique de E.

Si E est un ensemble fini de n éléments on note le Groupe symétrique par $\mathcal{S}(E) = \mathcal{S}_n$ et ses éléments sont appelés permutations.

En général, le Groupe $\mathcal{S}_n$ n'est pas commutatif ;

Exemples :Groupes symétriques :

$E = \{a; b; c\}$, le Groupe des permutations $\mathcal{S}_3$ contient les 6 éléments suivants : $Id = \begin{pmatrix} a & \to & a \\ b & \to & b \\ c & \to & c \end{pmatrix}$; $\sigma_1 = \begin{pmatrix} a & \to & b \\ b & \to & c \\ c & \to & a \end{pmatrix}$;

$\sigma_2 = \begin{pmatrix} a & \to & c \\ b & \to & a \\ c & \to & b \end{pmatrix}$; $\tau_1 = \begin{pmatrix} a & \to & a \\ b & \to & c \\ c & \to & b \end{pmatrix}$;

$\tau_2 = \begin{pmatrix} a & \to & c \\ b & \to & b \\ c & \to & a \end{pmatrix}$; $\tau_3 = \begin{pmatrix} a & \to & b \\ b & \to & a \\ c & \to & c \end{pmatrix}$.

La table de $\mathcal{S}_3$ est donnée par :

Exemples :

$f \circ g$	Id	σ_1	σ_2	τ_1	τ_2	τ_3
Id	Id	σ_1	σ_2	τ_1	τ_2	τ_3
σ_1	σ_1	σ_2	Id	τ_3	τ_1	τ_2
σ_2	σ_2	Id	σ_1	τ_2	τ_3	τ_1
τ_1	τ_1	τ_2	τ_3	Id	σ_1	σ_2
τ_2	τ_2	τ_3	τ_1	σ_2	Id	σ_1
τ_3	τ_3	τ_1	τ_2	σ_1	σ_2	Id

Exemples :

- L'ensemble $\mathcal{M}_n$ des matrices carrées inversibles de rang n muni de la multiplication matricielle est un Groupe non-Abélien ;
- On montre que l'ensemble des opérations de transformations géométriques (rotation, réflexion, inversion), faisant coincider un objet symétrique, est un Groupe fini.

Exemples :

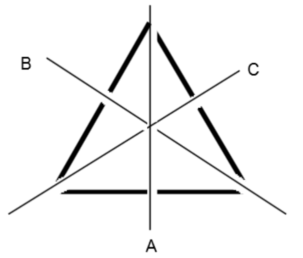
- Soit $G = \{A, B, C, D, E, F\}$, on considère la loi T définie sur G par la table suivante :

T ↱	A	B	C	D	E	F
A	E	D	F	B	A	C
B	F	E	D	C	B	A
C	D	F	E	A	C	B
D	C	A	B	F	D	ES
E	A	B	C	D	E	F
F	B	C	A	E	F	D

On vérifie que (G, T) est un Groupe fini.

Exemples :

Exactement la meme table de Groupe peut etre obtenue en considérant que les éléments de G représentent les opérations de symétrie faisant coincider un triangle équilatéral comme indiqué dans la figure ci-après :



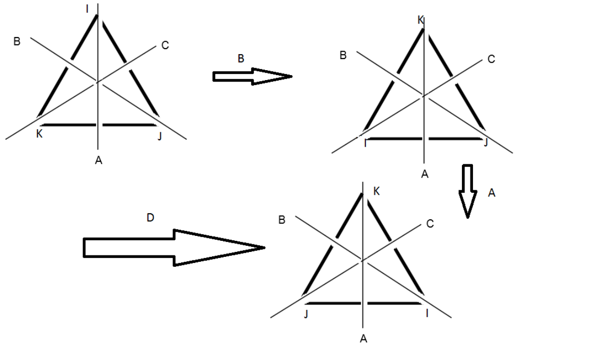
Les éléments A, B, ..., F représentent les transformations géométriques suivantes :

Exemples :

- A : Rotation de π autour de l'axe A ;
- B : Rotation de π autour de l'axe B ;
- C : Rotation de π autour de l'axe C ;
- D : Rotation de $\frac{2\pi}{3}$ dans le sens des aiguilles d'une montre et dans le plan du triangle ;
- E : l'identité, rotation de 2π dans le plan du triangle ;
- F : Rotation de $\frac{2\pi}{3}$ dans le sens contraire aux aiguilles d'une montre et dans le plan du triangle.

Exemples :

Exemple de vérification des calculs : $A \star B$, on commence par effectuer B puis A car il s'agit de composition de transformations. La transformation $A \star B$ est identique à la transformation D.



Exercice

Montrer que $G = \{E, A, B, C, D, F\}$ muni de la multiplication matricielle est un groupe. est-il commutatif ?

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \; D = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \; F = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Propriétés :

- L'élément neutre e est unique : $e' = e' \star e = e \star e' = e$;
- Le symétrique est unique : $b = (b' \star a) \star b = b' \star (a \star b) = b'$;
- L'équation $ax = b$ admet une solution unique : $x = a^{-1}b$ ou a^{-1} est le symétrique de a.

Sous-Groupe :

Soit $(G, \star)$ un Groupe. Une partie $H \subset G$ est un **Sous-Groupe** de G si :

- $e \in H$;
- $x \star y \in H$, pour tout x et y dans H ;
- le symétrique de x appartient à H, pour tout x dans H.

Remarques :

- Tout sous-Groupe H est aussi un Groupe $(H, \star)$ avec la loi induite par celle de G ;
- H est sous-Groupe Si et seulement s'il est non vide et vérifie : $x \star y^{-1} \in H$, pour tout x et y dans H (y^{-1} est le symétrique de y).

Exemples :

- $(\mathbb{Z}, +)$ est un sous-Groupe de $(\mathbb{R}, +)$;
- $(\mathbb{R}^{*+}, \times)$ est un sous-Groupe de $(\mathbb{R}^{*}, \times)$;
- L'ensemble des matrices carrées diagonales est un sous-Groupe de $\mathcal{M}_n$;
- $\mathcal{S}_3$ possède 6 sous-Groupes : $\{Id\}$, $\{Id, \tau_1\}$, $\{Id, \tau_2\}$, $\{Id, \tau_3\}$, $\{Id, \sigma_1, \sigma_2\}$, $\mathbb{S}_3$,

Exemple : Sous-Groupes de $\mathbb{Z}$

Les sous-Groupes de $\mathbb{Z}$ sont les ensembles $n\mathbb{Z}$, $n \in \mathbb{Z}$.
$n\mathbb{Z} = \{k.n, k \in \mathbb{Z}\}$ est l'ensemble des multiples de n.

Ordre d'un Groupe :

L'ordre d'un Groupe $(G, \star)$ est, par définition, le Cardinal de G.
L'ordre d'un sous-Groupe $H \subset G$ est le cardinal de H.

Propriété de l'ordre d'un Groupe :

L'ordre de tout sous-Groupe $H \subset G$ divise l'ordre du Groupe G.

sous-Groupe engendré :

Soit $(G, \star)$ un Groupe et $H \subset G$. Le sous-Groupe, de G, engendré par H est e plus petit sous-Groupe contenant H

Exemples :

- Dans $(\mathbb{R}^*, \times)$, le sous-groupe engendré par $E = \{2\}$ est $H = \{2^n, n \in \mathbb{Z}\}$;
- Dans $(\mathbb{Z}, +)$, le sous-groupe engendré par $E = \{2\}$ est $H = 2\mathbb{Z}$;
- Dans $(\mathbb{Z}, +)$, le sous-groupe engendré par $E = \{2, 8\}$ est $H = 2\mathbb{Z}$;
- Dans $(\mathbb{Z}, +)$, le sous-groupe engendré par $E = \{a, b\}$ est $H = d\mathbb{Z}$ avec $d = PGCD(a, b)$.

Groupe engendré par un élément :

Soit G un Groupe et $a \in G$. Le sous-Groupe engendré par a est le sous-Groupe engendré par l'ensemble $\{a\}$.
L'ordre d'un élément $a \in G$ est l'ordre du sous-Groupe engendré par a.
On démontre que l'ordre de a est égale au plus petit entier n tel que $\underbrace{a \star a \star a \star \ldots \star a}_{n \quad fois} = e$

Morphisme de Groupes :

Soient $(G, \star)$ et $(G', \diamond)$ deux groupes. Une application $f : (G, \star) \rightarrow (G', \diamond)$ est un morphisme de Groupes si, pour tout x et y dans G :

$$f(x \star y) = f(x) \diamond f(y)$$

Exemples :

- L'application $f : (\mathbb{Z}, +) \to (\mathbb{R}, +)$ telle que $f(n) = \frac{1}{2}.n$ est un morphisme de Groupes;
- L'application $f : (\mathbb{R}, +) \to (\mathbb{R}^{+*}, \times)$ telle que $f(x) = e^x$ est un morphisme de Groupes.

Propriétés :

Soit $f : (G, \star) \to (G', \diamond)$ un morphisme de Groupes alors :

- $f(e_G) = e_{G'}$;
- Pour tout x dans G, $f(x^{-1}) = (f(x))^{-1}$ où : x^{-1} est le symétrique de x dans G et $(f(x))^{-1}$ est le symétrique de $f(x)$ dans G'.

Exemples :

- $f(0_{\mathbb{Z}}) = \frac{1}{2}.0_{\mathbb{Z}} = 0_{\mathbb{Z}} = 0_{\mathbb{R}}$ et $f(-x) = \frac{1}{2}.(-x) = -\frac{1}{2}.X = -(\frac{1}{2}.x)$
- $f(0) = e^0 = 1$ et $f(-x) = e^{-x} = \frac{1}{e^x}$

Propriétés :

- Soient deux morphismes de Groupes $f : G \to G'$ et $g : G' \to G''$. Alors $gof : G \to G''$ est un morphisme de Groupes ;
- Soit $f : G \to G'$ un morphisme de Groupe bijectif. Alors $f^{-1} : G' \to G$ est un morphisme de Groupes.

Définition :

Un morphisme bijectif est appelé un **isomorphisme**. Deux Groupes sont isomorphes s'il existe un morphisme de Groupes $f : G \rightarrow G'$.

Définition (Noyau et Image) :

- Le noyau de f est :

$$Kerf = \{x \in G | f(x) = e_{G'}\}$$

- L'image de f est :

$$Imf = \{f(x) | x \in G\}$$

Propriétés :

Soit $f : G \to G'$ un morphisme de Groupes :

- $Kerf$ est un sous-Groupe de G ;
- Imf est un sous-Groupe de G' ;
- f est injectif si et seulement si $Kerf = \{e_G\}$;
- f est surjectif si et seulement si $Imf = G'$.

Applications en Chimie :

Propriété fondamentale :

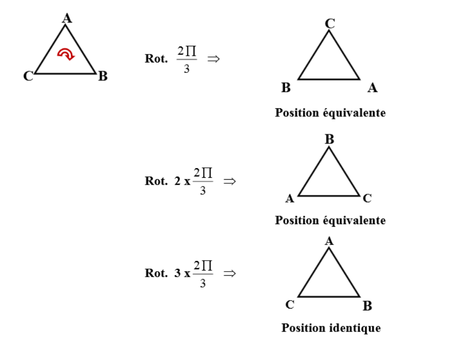
On montre que l'ensemble de tous les éleéments de symétrie d'un molécule menu de la composition est un Groupe (généralement non-Abélien).

Utilisation de la théorie des Groupes :

- Détermination de tous les éléments de symétrie de la molécule ;
- Construction de la table du Groupe ;
- Détermination des Sous-Groupe et leurs ordres

Opérations de symétrie :

Une opération de symétrie est le mouvement de déplacement d'un objet le conduisant soit à une position équivalente soit à une position identique :

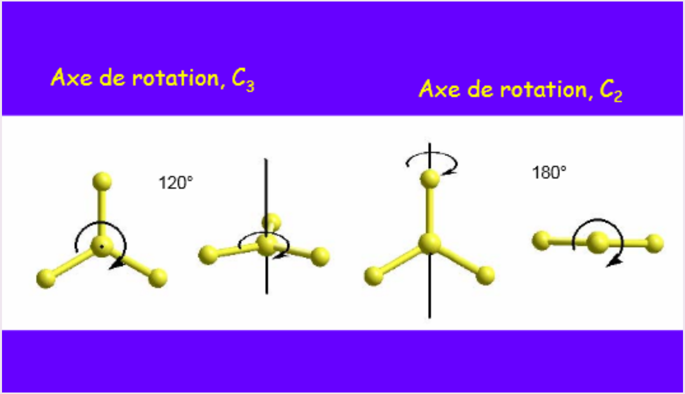


Éléments de symétrie :

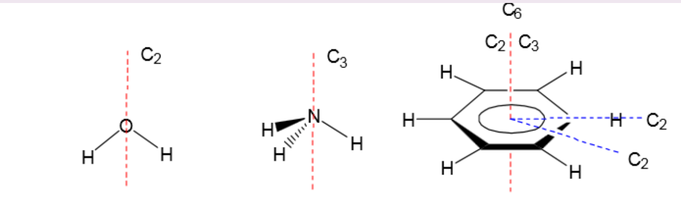
Un élément de symétrie est un objet géométrique qui sert à définir l'opération de symétrie : un point, une droite, un plan.

Élément de symétrie	Symbole	Opération
Axe de rotation (axe principal : $\ll n$)	C_n	Rotation d'un angle de $\frac{2\pi}{n}$ par rapport à l'axe de rotation
Axe de rotation impropre	S_n	Rotation de $\frac{2\pi}{n}$ puis réflexion par rapport au plan perpendiculaire à l'axe C_n
Plan "vertical" contenant l'axe principal	σ_v	Réflexion par rapport au plan
Plan "horizontal" $\perp$ à l'axe principal	σ_h	Réflexion par rapport au plan
Centre d'inversion	i	Inversion
Aucun	E	Ne rien faire

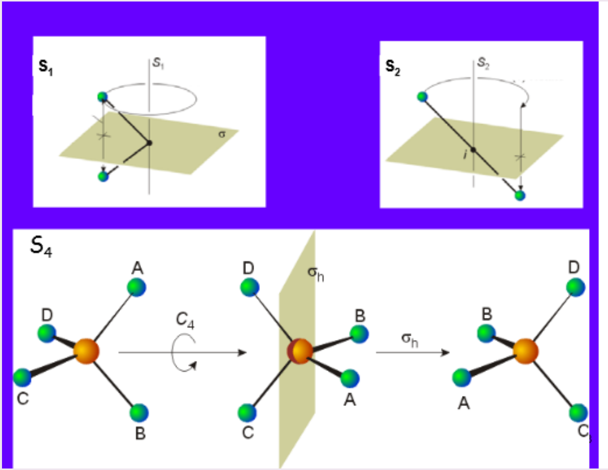
Exemples :



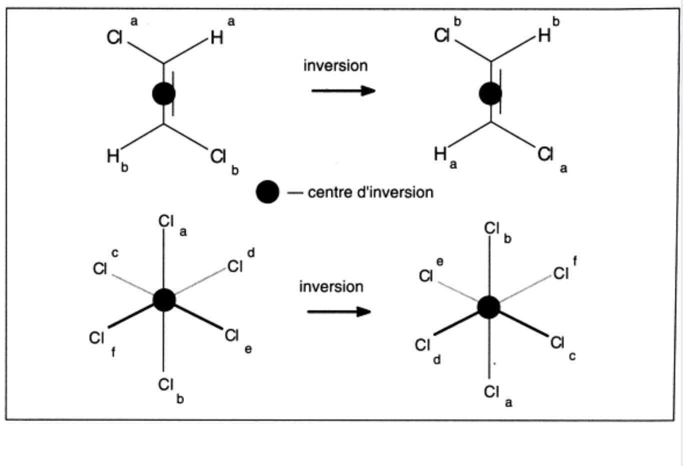
Exemples :



Exemples :



Exemples :


Cl
a
H
a
inversion
Cl
b
H
b
H
b
Cl
b
H
a
Cl
a
— centre d'inversion
Cl
a
Cl
c
Cl
d
inversion
Cl
f
Cl
e
Cl
b
Cl
b
Cl
e
Cl
f
Cl
d
Cl
c
Cl
a

Exemples :

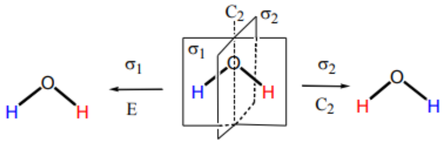


Fig. 3. Eléments et opérations de symétrie de H_2O.

Exemples :

	E	C_2	σ_1	σ_2
E	E	C_2	σ_1	σ_2
C_2	C_2	E	σ_2	σ_1
σ_1	σ_1	σ_2	E	C_2
σ_2	σ_2	σ_1	C_2	E

Table 1. Table de multiplication des opérations du groupe C_{2v}.

Exemples :

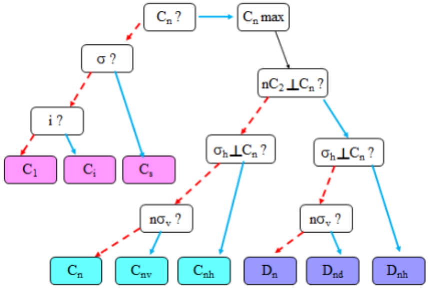


Fig. 4. Procédure dichotomique d'identification du groupe de symétrie d'une molécule. A chaque question (?) la réponse « oui » correspond à une flèche bleue, la réponse « non » à une flèche rouge pointillée.