

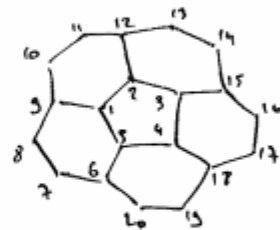
### Vers le diagramme du système $\pi$ du corannulène

13-  $C_{5v}$

14-  $\Gamma_{20p} = \{20, 0, 0, 2\} = 3A_1 \oplus A_2 \oplus 4E_1 \oplus 4E_2$   
 (on peut remarquer que  $E_1 \oplus E_2 = \{4, -1, -1, 0\}$ ).

$n_{E_1} = \frac{1}{10} 2 \times 20 + 2 \times 0 \times 1 \cos \frac{4\pi}{5} + 20 \times 1 \cos \frac{4\pi}{5} + 5 \times 2 \times 0 = \frac{20}{10} = 2.$

15- On utilise le projecteur sur les génératrices  $p_1, p_2$  et  $p_{10}$ .

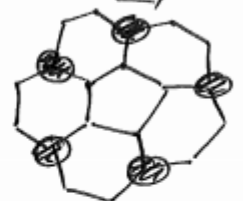


	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$\Sigma \sigma_v$
$A_1$	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1
$p_1$	$p_1$	$p_2+p_5$	$p_3+p_4$	$p_1+p_2+p_3+p_4+p_5$
$p_2$	$p_2$	$p_6+p_{12}$	$p_{15}+p_{18}$	$p_6+p_9+p_{12}+p_{15}+p_{18}$
$p_{10}$	$p_{10}$	$p_7+p_{13}$	$p_{16}+p_{19}$	$p_8+p_{11}+p_{14}+p_{17}+p_{20}$

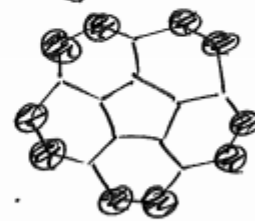
Ainsi,  $\hat{P}_{A_1}(p_1) \propto p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_5 \rightarrow$



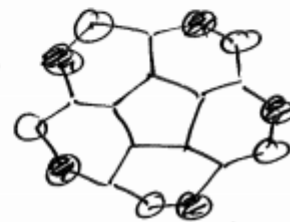
$\hat{P}_{A_1}(p_2) \propto p_6 + p_9 + p_{12} + p_{15} + p_{18} \rightarrow$



$\hat{P}_{A_1}(p_{10}) \propto p_7 + p_8 + p_{10} + p_{11} + p_{13} + p_{14} + p_{16} + p_{17} + p_{19} + p_{20}$



$\pi = \hat{P}_{A_2}(p_{10}) \propto p_7 - p_8 + p_{10} - p_{11} + p_{13} - p_{14} + p_{16} - p_{17} + p_{19} - p_{20}$



## Vibration du corannulène

18- On a  $N=30$  atomes pour une molécule non linéaire, donc  
 $3N-6 = 84$  modes normaux de vibration.

Utilisons la méthode cartésienne :

$$\Gamma_{\text{vib}} = \Gamma_{\text{vib}} \oplus \Gamma_{\text{rot}} \oplus \Gamma_{\text{trans}} = \Gamma_{\text{vib}} \oplus \Gamma_{\text{vib}}$$

$$\text{avec } \Gamma_{\text{vib}} = \{30, 0, 0, 2\}$$

$$\text{et } \Gamma_{\text{vib}} = \{3, 1-\eta^-, 1-\eta^+, 1\}$$

$$\text{donc } \Gamma_{\text{rot}} = \{9, 0, 0, -2\} = 8A_1 \oplus 10A_2 \oplus 18E_1 \oplus 18E_2$$

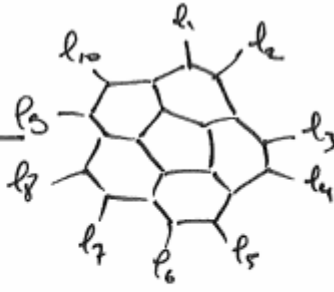
$$\text{or } \Gamma_{\text{rot}} \oplus \Gamma_{\text{trans}} = A_1 \oplus A_2 \oplus 2E_1 \text{ donc}$$

$$\Gamma_{\text{vib}} = 7A_1 \oplus 9A_2 \oplus 16E_1 \oplus 18E_2.$$

19- Utilisons une méthode coordonnées internes avec  $l_i$   
les longueurs de liaison C-H :

$$\Gamma_{\text{el}} = \{10, 0, 0, 0\} = A_1 \oplus A_2 \oplus 2E_1 \oplus 2E_2.$$

20. On utilise le projecteur sur le liaison  $l_i$ .

	E	$2C_3$	$2C_3^2$	$\Sigma \sigma$	
$l_1$	$l_1$	$l_3 + l_9$	$l_5 + l_7$	$l_2 + l_4 + l_6 + l_8 + l_{10}$	
$A_1$	1	1	1	1	
$A_2$	1	1	1	-1	

Ans  $\hat{P}_{A_1}(l_i) \propto l_1 + l_2 + l_3 + l_4 + l_5 + l_6 + l_7 + l_8 + l_9 + l_{10}$ .

or  $\hat{P}_{A_2}(l_i) \propto l_1 - l_2 + l_3 - l_4 + l_5 - l_6 + l_7 - l_8 + l_9 - l_{10}$

