



DS 3 – 14 novembre 2015

Orbitales atomiques et Orbitales moléculaires (PC - Problème)

Orbitales atomiques :

- Interpréter une courbe de densité de probabilité de présence d'un électron.
- Prévoir, pour l'atome d'hydrogène et les ions hydrogénoïdes, l'évolution du rayon et de l'énergie associés à une OA.
- Dessiner l'allure des orbitales atomiques s, p et d.
- Établir la configuration électronique d'un atome ou d'un ion dans son état fondamental.
- Connaître les évolutions de la charge effective, rayon atomique, électronégativité et polarisabilité dans la classification.
- Relier l'évolution de l'énergie associée à une orbitale atomique à l'électronégativité.
- Relier le rayon associé aux orbitales de valence d'un atome à sa polarisabilité.

Orbitales moléculaires :

- Reconnaître le caractère liant, antiliant, non liant d'une orbitale moléculaire.
- Identifier la symétrie σ ou π d'une orbitale moléculaire.
- Proposer une représentation conventionnelle d'une OM tenant compte d'une éventuelle dissymétrie du système.
- Justifier la dissymétrie d'une OM obtenue par interaction d'OA centrées sur des atomes d'éléments différents.
- Justifier l'existence d'interactions entre orbitales de fragments en termes de recouvrement ou d'écarts d'énergie.
- Peupler d'électrons un diagramme d'orbitales moléculaires.
- Etablir la configuration électronique d'une molécule.

Chimie des solutions - TP 1 à 3 (PCSI - Problème)

- Ecrire l'équation de réaction modélisant la transformation prépondérante en tenant compte des espèces majoritaires.
- Calculer et interpréter la valeur d'une constante d'équilibre.
- Déterminer la composition d'une solution à la fin d'une transformation totale ou équilibrée.
- Exploiter une courbe de titrage :
 - Reconnaître des cas de titrages simultanés ou successifs
 - Ecrire les relations aux équivalences
 - Utiliser les coordonnées d'un point pour déterminer la valeur d'une constante d'équilibre.
- Justifier l'allure d'une courbe de suivi conductimétrique

Premier principe de la thermodynamique (PC - Exercices)

- Associer les équations de réaction aux grandeurs tabulées de la thermodynamique chimique.
- Calculer le transfert thermique mis en jeu pendant une transformation chimique à température et pression constantes
- Reconnaître le caractère exo- ou endothermique d'une transformation.
- Utiliser des données expérimentales pour obtenir la valeur d'une enthalpie standard de réaction (expl : calorimétrie).
- Utiliser des données tabulées et la loi de Hess (avec une combinaison linéaire ou un cycle de transformations) pour obtenir la valeur d'une enthalpie standard de réaction.
- Évaluer la température atteinte par un système siège d'une transformation physico-chimique supposée isobare et réalisée dans un réacteur adiabatique.
- Utiliser les résultats d'une expérience de calorimétrie pour déterminer la valeur d'une enthalpie standard de réaction.

Symbolisme de la chimie organique :

- Connaître dans les groupes au programme de PCSI ceux qui sont utilisés comme nucléophiles et ceux qui sont utilisés comme électrophiles.
- Reconnaître une substitution, une élimination et une addition.
- Ecrire les formules mésomères possibles d'une structure.

Substitution nucléophile :

- Ecrire les mécanismes de S_N1 et S_N2 sur un exemple.
- Argumenter le choix d'un mécanisme S_N1 ou S_N2 (pas de « trucs », des arguments physique comme :

Eliminations :

- Elimination sur un dérivé halogéné : milieu basique et chauffage, mécanisme E2.
- Elimination sur alcool : milieu acide (pourquoi ?) et chauffage, mécanisme E1.

Additions nucléophiles :

- Ecrire le mécanisme d'addition d'un organomagnésien mixte ou d'un hydrure sur un aldéhyde ou une cétone.
- A partir de la structure d'un alcool, proposer des réactifs (RMgX ou hydrure sur carbonyle).

Conversion des alcools :

- Alcools en tant qu'électrophiles :
 - Proposer des conditions pour faciliter le départ du groupe -OH (activation électrophile)
 - Proposer des réactifs et conditions expérimentales pour convertir un alcool :
 - en dérivé halogéné
 - en alcène
- Alcools en tant que nucléophiles :
 - Proposer des conditions pour améliorer la nucléophilie des alcools : formation d'un alcoolate
 - Proposer une méthode pour former un étheroxyde ($R-OH \rightarrow R-O-R'$).

Composés carbonylés :

- Ecrire le mécanisme de l'acétalisation des carbonylés.
- Proposer des conditions expérimentales pour améliorer le rendement de cette réaction.

Spectroscopies IR et RMN 1H :

- Établir ou confirmer une structure à partir de tables de données spectroscopiques (nombres d'onde, déplacements chimiques, constantes de couplage).
- Justifier la multiplicité d'un signal (couplages AX ou AMX) en RMN 1H .