I- Structure des entités moléculaires

-Révisions PCSI- PC 1^{ère} année : *Modèle de Lewis , modèle VSEPR , modèle de la mésomérie (structure de Lewis , géométrie autour d'un atome et géométrie d'une molécule , moment dipolaire d'une liaison , d'une molécule)*

Programme PC 1^{ère} année

Notions et contenus	Capacités exigibles
Modèle de Lewis de la liaison covalente Liaison covalente localisée ; longueur et énergie de la liaison covalente. Schéma de Lewis d'une molécule ou d'un ion monoatomique ou polyatomique (étude limitée aux éléments des blocs s et p)..	Citer l'ordre de grandeur de longueurs et d'énergies de liaison covalente. Déterminer, pour les éléments des blocs s et p, le nombre d'électrons de valence d'un atome à partir de la position de l'élément dans le tableau périodique. Citer les éléments des périodes 1 à 3 du tableau périodique (nom, symbole, numéro atomique). Établir un ou des schémas de Lewis pertinent(s) pour une molécule ou un ion.
Liaison covalente délocalisée : mésomérie	Identifier et représenter les enchainements donnant lieu à une délocalisation électronique. Mettre en évidence une éventuelle délocalisation électronique à partir de données expérimentales
Géométrie et polarité des entités chimiques Structure géométrique d'une molécule ou d'un ion polyatomique. Modèle VSEPR. Représentation de Cram.	Associer qualitativement la géométrie d'une entité à la minimisation de son énergie. Prévoir et interpréter les structures de type AX _n avec n ≤ 4 et AX _p E _q , avec p+q = 3 ou 4.
Électronégativité : liaison polarisée, moment dipolaire, molécule polaire	Comparer les électronégativités de deux atomes à partir de données ou de leurs positions dans le tableau périodique. Prévoir la polarisation d'une liaison à partir des électronégativités comparées des deux atomes mis en jeu. Relier l'existence ou non d'un moment dipolaire permanent à la structure géométrique d'une molécule. Déterminer direction et sens du vecteur moment dipolaire d'une liaison ou d'une molécule

- Modèle quantique

Approximations ,notions d'OM et de recouvrement

Interactions entre 2 OA

Symétrie σ ou π , caractère liant ou anti-liant

Diagramme des OM pour A₂ sans interaction s-p

Indice ou ordre de liaison , propriétés par ou diamagnétiques , état de spin , HO , BV et SO : **simplement les identifier**

► ► **Méthode des fragments : totalité du programme , voir ci-dessous** .

Programme PC 2^{ème} année

Notions et contenus	Capacités exigibles
Construction des orbitales moléculaires Méthode de Combinaison Linéaire des Orbitales Atomiques. Interaction de deux orbitales atomiques sur deux centres : - recouvrement ; - orbitales liante, antiliante, non liante ; - énergie d'une orbitale moléculaire ; - orbitale σ , orbitale π ; - représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire par schématisation graphique de la combinaison linéaire des orbitales atomiques.	-Identifier les conditions d'interaction de deux orbitales atomiques : recouvrement et critère énergétique. -Construire des orbitales moléculaires de molécules diatomiques par interaction d'orbitales atomiques du même type (s-s, p-p). -Reconnaître le caractère liant, antiliant, non liant d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité. -Identifier la symétrie σ ou π d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité. -Proposer une représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire tenant compte d'une éventuelle dissymétrie du système. -Justifier la dissymétrie d'une orbitale moléculaire obtenue par interaction d'orbitales atomiques centrées sur des atomes d'éléments différents. -Prévoir ou interpréter l'ordre énergétique des orbitales moléculaires et établir qualitativement un diagramme énergétique d'orbitales d'une molécule diatomique.

<p>Interaction d'orbitales de fragments.</p> <p>Diagramme d'orbitales moléculaires : occupation des niveaux, orbitales frontalières haute occupée et basse vacante, cas des entités radicalaires.</p> <p>Ordre de liaison dans les molécules diatomiques.</p>	<p>-Justifier l'existence d'interactions entre orbitales de fragment en termes de recouvrement ou d'écart d'énergie.</p> <p>-Décrire l'occupation des niveaux d'un diagramme d'orbitales moléculaires.</p> <p>-Identifier les orbitales frontalières à partir d'un diagramme d'orbitales moléculaires de valence fourni.</p> <p>-Interpréter un diagramme d'orbitales moléculaires obtenu par interaction des orbitales de deux fragments, fournies.</p> <p>Relier, dans une molécule diatomique, l'évolution des caractéristiques de la liaison à l'évolution de l'ordre de liaison.</p>
---	---

II- Structure des molécules organiques

Familles fonctionnelles

Programme 2^{ème} année :

Familles fonctionnelles en chimie organique.	Identifier dans une entité donnée les familles fonctionnelles suivantes : alcène, alcyne, halogénoalcane, alcool, ester sulfonique, 1,2- diol, éther-oxyde, époxyde, hémiacétal, acétal, amine, aldéhyde, cétone, acide carboxylique, ester, amide, chlorure d'acyle, anhydride d'acide.
--	--

Isomérisation et stéréoisomérisation (de configuration seulement)

Connaitre précisément la définition de tous les termes liés à la stéréochimie des molécules organiques
Détermination des descripteurs stéréochimiques

Programme 1^{ère} année :

Notions et contenus	Capacités exigibles
<p>Structure des entités chimiques organiques</p> <p>Isomérisation de constitution.</p> <p>Stereoisomérisation de conformation en série aliphatique non cyclique : ordre de grandeur de la barrière conformationnelle.</p> <p>Représentation de Newman.</p> <p>Représentation topologique.</p>	<p>Comparer la stabilité de plusieurs conformations.</p> <p>Interpréter la stabilité d'un conformère donné</p>
<p>Stéréoisomérisation de configuration : chiralité, énantiomérisation, diastéréoisomérisation descripteurs stéréochimiques R, S, Z, E.</p>	<p>Attribuer les descripteurs stéréochimiques aux centres stéréogènes.</p> <p>Déterminer la relation d'isomérisation entre deux isomères.</p> <p>Représenter une entité chimique organique à partir de son nom, fourni en nomenclature systématique, en tenant compte de la donnée d'éventuelles informations stéréochimiques, en utilisant un type de représentation donnée.</p>
<p>Activité optique, pouvoir rotatoire, loi de Biot.</p>	<p>Relier la valeur du pouvoir rotatoire à la composition d'un mélange de stéréoisomères.</p> <p>Déterminer la composition d'un système chimique ou suivre une transformation chimique en utilisant l'activité optique</p>
<p>Séparation de diastéréoisomères et d'énantiomères.</p>	<p>Citer des analogies et différences de propriétés entre des diastéréoisomères et des énantiomères.</p> <p>Reconnaître des protocoles de séparation de stéréoisomères.</p>