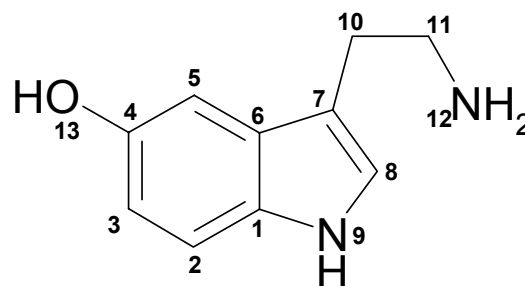


Documents autorisés : aucun document autorisé, calculatrices autorisées
(modèles moléculaires, pâte à modeler ou pommes de terre et allumettes autorisés)

Atomistique – Chimie Structurale

Commercialisé en France entre 1976 et 2009 par les laboratoires Servier, le Médiator était un médicament composé de benfluorex, mis en avant pour ses effets bénéfiques contre le surpoids du diabète. Toutefois, le benfluorex est métabolisé par l'organisme en une molécule dangereuse, la norfenfluramine, connue pour avoir une action néfaste sur les valves cardiaques. En se fixant sur des récepteurs à la sérotonine 5HT2B, la molécule favorise la prolifération des fibroblastes des valves cardiaques (fibrose), pouvant entraîner une insuffisance du cœur.



molécule de sérotonine

Données. Numéro atomique : ${}_6\text{C}$, ${}_7\text{N}$, ${}_8\text{O}$. ; Electronegativité : $\chi_{\text{H}} = 2,2$, $\chi_{\text{C}} = 2,5$, $\chi_{\text{N}} = 3,1$, $\chi_{\text{O}} = 3,5$.

Questions de cours :

1 – Ecrire les formules de Lewis des atomes de carbone, azote et oxygène. Pour chacun de ces atomes, écrire la structure électronique associée en faisant apparaître les électrons de cœur et les électrons de valence. D'une façon générale, quand ces atomes sont les atomes centraux d'un ensemble de liaisons, quelles sont les différentes formes VSEPR qui peuvent leur être associées? Justifiez vos réponses.

Question sur la structure moléculaire de la sérotonine (voir schéma ci-dessus) :

2 – En vous appuyant sur les données, indiquez quelles liaisons sont polarisées dans cette molécule. Justifier.

3 – **Sur votre copie**, compléter, si possible avec un crayon d'une autre couleur, la formule semi-développée de cette molécule afin d'obtenir sa formule de Lewis complète.

4 – Classer les atomes de carbone, d'azote et d'oxygène présents dans la sérotonine en différentes familles VSEPR distinctes. Donner la géométrie VSEPR idéale autour de l'atome central pour chacune de ces familles, en indiquant la valeur théorique des angles.

Pour la suite du sujet, on tiendra compte de la délocalisation maximale possible pour cette molécule:

5 – Déterminer l'hybridation de chacun des atomes de carbone de la sérotonine. Justifier.

6 – Déterminer l'hybridation de chacun des atomes d'azote et d'oxygène. Pour chacun des atomes d'azote, spécifier également dans quel type d'orbitale se trouvent les doublets libres (ou électrons non-liants). Justifier.

7 – Combien existe-t-il de systèmes π dans cette molécule? Sur quels atomes se délocalise(nt) le(s) système(s) π ? Décompter le nombre d'électrons présents dans ce(s) système(s) π délocalisé(s). Quels sont les atomes qui sont coplanaires? Justifiez vos réponses.

Thermodynamique – Chimie en solution

Remarque importante : Vérifier l'homogénéité des unités de vos résultats !!!!!

I. Explosion du T.N.T

Le 2,4,6-trinitrotoluène ($C_7H_5N_3O_6$), communément appelé T.N.T., est un explosif puissant. Il est à l'état solide à 298K. Sous l'effet d'un choc important, Il dégage instantanément et sans apport d'oxygène extérieur une grande quantité d'énergie sous forme de chaleur et de travail (grand volume de gaz formé), ce qui constitue une explosion.

- 1- Lorsque le T.N.T. explose, on suppose qu'il forme du carbone graphite (C), du monoxyde de carbone gazeux ($CO(g)$), du diazote gazeux ($N_2(g)$), de l'eau gazeuse ($H_2O(g)$). Ecrire l'équation bilan de cette réaction.
- 2- Calculer l'enthalpie standard de cette réaction à 298 K
- 3- Calculer le travail fourni à 298 K à pression constante par l'explosion d'une mole de T.N.T. Cette énergie mécanique est due à la formation des gaz, considérés comme parfaits.
- 4- Sachant qu'il faudrait 100 kg de T.N.T pour détruire l'amphi de physique 1 et ainsi ne plus avoir cours jusqu'à la fin de l'année, calculer l'énergie totale (chaleur et travail) en kJ libérée par cette quantité d'explosif.
- 5- *Question bonus (en plus du barème)* : A quantité égale, la combustion du sucre ou de la matière grasse dégage beaucoup plus d'énergie que le T.N.T, pourtant nous n'explosions pas lorsque notre organisme brûle ces composés. Expliquer.

Données:

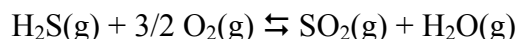
Constante des gaz parfaits : $R = 8,314 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$

Masse molaire T.N.T : 227 g.mol^{-1}

Enthalpie standard de formation $\Delta_f H^\circ$ (kJ.mol^{-1}) :

$C_7H_5N_3O_6(g)$ (T.N.T) : $-101,46$; $CO(g)$: $-110,52$; $H_2O(g)$: $-241,83$

II. Oxydation du sulfure d'hydrogène



- 1- Donner le signe de la variation d'entropie de la réaction chimique sans faire de calculs. Justifier.
- 2- Calculer cette variation d'entropie standard ($\Delta_r S^\circ$) à 298 K et à 550 K.
- 3- Sachant que l'enthalpie standard ($\Delta_r H^\circ$) de la réaction à 298 K vaut -518 kJ.mol^{-1} , déterminer la variation d'enthalpie libre standard ($\Delta_r G^\circ$) de la réaction à 298 K. La réaction est-elle spontanée ?

Données :

298 K, P=1 bar	$H_2S(g)$	$O_2(g)$	$SO_2(g)$	$H_2O(g)$
$S^\circ (\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1})$	205.79	205.138	248.22	188.83
$C_p (\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1})$	34.23	29.355	39.87	33.58

Remarque : Les C_p sont considérés constants sur l'intervalle de température considéré.

III. Calculs de pH

Calculer le pH des différentes solutions :

- 1- solution de HCl à $2,5 \cdot 10^{-3} \text{ mol.L}^{-1}$
- 2- solution de CH_3COOH à $10^{-5} \text{ mol.L}^{-1}$ ($pK_a = 4,7$)