ECOLE POLYTECHNIQUE-ESPCI ENS: ULM, LYON, PARIS-SACLAY

Composition de Chimie A, Filière PC (XEULS)

Commentaires généraux

L'épreuve de chimie A s'est organisée autour de différentes études autour de la thématique du complexe activé ou de l'état de transition. Chaque partie étant pleinement indépendante.

- 1. La première partie traitait d'une étude mécanistique d'échange de ligands de complexes permettant de faire le lien entre grandeurs cinétiques et thermodynamiques via la formule d'Eyring, et ainsi de trancher entre différents mécanismes possibles pour la substitution de ligands avec le solvant.
- 2. La deuxième partie traitait d'une approche théorique orbitalaire afin d'étudier les interactions entre une molécule de dihydrogène et un complexe de nickel (via la méthode des fragments), la comparaison avec une simulation numérique permettant de comparer leur importance. Ensuite, deux types de mécanismes concurrents étaient comparés : une addition oxydante classique d'une part et un mécanisme plus spécifique de rotation assistée par un atome de bore d'autre part.
- 3. La troisième partie traitait de la synthèse d'un inhibiteur enzymatique (analyse succincte des interactions moléculaires entre le substrat et la protéine puis synthèse en chimie moléculaire).
- 4. La dernière partie concernait un oxyde et ses propriétés pour former des batteries au lithium. (cristallographie et propriétés électrochimiques du matériau) .

Le sujet visait également à tester les candidats aussi bien sur des connaissances de base que leur capacité à avoir des raisonnements scientifiques plus poussés. Les questions posées dans le sujet peuvent se scinder en trois groupes :

- Les questions « socle », qui testaient des connaissances de base ou proches du cours. Il s'agit des questions 1, 2, 5, 7, 13, 21, 25, 26, 27, 28, 29, 37, 38, 43, 50, 51, 56, 57, 58.
- Les questions « standard » qui testaient les connaissances usuelles en chimie sous forme de questions.
- Les questions de type « problème » qui demandaient aux candidats une réflexion plus poussée ou plus ouverte. Ces questions étaient généralement plus spécifiques au sujet. Elles testaient la capacité des candidats à s'approprier des connaissances fournies sous forme de documents. Il s'agit des questions 8, 9, 12, 19, 20, 23, 40, 44, 45, 49, 53, 55, 60, 63, 65.

Commentaires détaillés

Partie 1 (Questions 1 à 12)

- 1. Ici, on demandait aux candidats de comparer la formulation d'Eyring et d'Arrhénius pour voir l'intérêt d'avoir des grandeurs thermodynamiques plutôt que purement phénoménologiques. La plupart des candidats ont réussi cette question.
- 2. La plupart des candidats ont réussi cette question. Pour les besoins du sujet, un code tronqué était fourni.
- 3. Questions portant sur les compétences en python nouvellement exigibles. Question de niveau standard. Ce genre de question pourrait être appelé à se multiplier et se complexifier légèrement dans les années à venir. Toutefois, environ la moitié des candidats n'ont pas réussi à répondre correctement à cette question.
- 4. Pour cette question, presque tous les candidats ont pu donner de bonnes réponses.
- 5. Trois mécanismes en compétition. La constante de vitesse est donc la somme des différentes vitesses. Une grande partie des candidats ont pu donner la bonne expression. Toutefois les explications ne

- sont pas toujours données.
- 6. Cette question et les suivantes visaient à montrer qu'un raisonnement simple permet à priori de prédire l'entropie de réaction. Mais l'interprétation microscopique pouvant parfois être plus complexe, le volume d'activation permet de confirmer cette première intuition. Pour cette question, presque tous les candidats ont pu donner de bonnes réponses.
- 7. Question largement abordable. Cependant, une partie importante des candidats n'a pas réussi à répondre correctement.
- 8. Pour cette question, environ 2/3 des candidats ont pu donner de bonnes réponses.
- 9. Uniquement une petite partie des candidats a réussi à calculer le volume molaire de l'eau.
- 10. Pour cette question, presque tous les candidats ont pu donner de bonnes réponses.
- 11. Pour cette question, presque tous les candidats ont pu donner de bonnes réponses.
- 12. Question ouverte. La conclusion de cette partie visait à laisser les candidats s'interrogersur le changement de mécanisme observé pour des ions au sein d'une même colonne du tableau périodique. Environ la moitié des candidats ont réussi à répondre correctement à cette question.

Partie 2 (Questions 13 à 24)

- 13-18. Questions classiques, proches du cours, qui ont été plutôt bien traitées. Presque tous les candidats ont réussi.
- 19-20. Questions centrales de la partie. Cette question a donné du mal aux candidats. Une partie importante des candidats n'a pas réussi.
- 21. Question plutôt bien traitée.
- 22-23. Peu de candidats ont pu donner une explication claire pour cette question.
- 24. Elle est assez bien traitée.

Partie 3 (Questions 25 à 49)

- 25-26-27 sont des questions proches du cours. Cependant peu de réponses sont correctes, avec une écriture des formules et structures inexactes et des états ioniques de chaines latérales aléatoires. Peu de candidats donnent une réponse complète. La mauvaise maîtrise de ces concepts de base est préoccupante.
- 28. Question bien traitée dans la plupart des copies (schéma rétrosynthétique).
- 29-30. La représentation de mécanisme des réactions a donné beaucoup de difficultés aux candidats. Si presque tout le monde traite ces questions, peu ont vraiment réussi.
- 31. Si presque tout le monde a réussi à décrire la réaction et les produits, très peu de candidats a pu bien discuter le choix des conditions réactionnelles (milieu non acide pour éviter hydrolyse acétals/pyridine pour piéger le proton).
- 32. idem question 29 & 30.
- 33. Question bien traitée.
- 34. Le produit issu de l'élimination est généralement trouvé mais pas le produit secondaire. Question peu réussie dans l'ensemble.
- 35-36. Ces questions ont bien été traités (environ 2/3 des copies).
- 37. La représentation de Newmann a pu de manière surprenante poser des difficultés à plus de la moitié des candidats.
- 38-39. Ces questions sont bien traitées.
- 40. Si une grande partie des candidats ont traité cette question, peu ont réussi à écrire le mécanisme correctement jusqu'au bout (difficultés à identifier le solvant comme réactif).

- 41. Question bien traitée.
- 42. Cette question a été majoritairement traitée, la partie RMN a été mieux traitée que la partie IR. Très peu de candidats ont totalement réussi.
- 43. Question bien traitée.
- 44 et 45. Les stratégies de synthèse impliquant l'utilisation de groupements protecteurs orthogonaux semblent peu maitrisées. Questions difficiles pour l'ensemble des candidats.
- 46. Question bien traitée.
- 47-49. Ces questions ont bien été traitées.

Partie 4 (Questins 50 à 63)

Partie finale moins traitée dans l'ensemble.

- 50. Question simple, cependant, beaucoup de candidats se sont lancés dans des explications/calculs compliqués et ont finalement donné un mauvais résultat.
- 51. Question abordable, pourtant peu réussie (calcul de l'aire d'un parallélogramme).
- 52 à 54. Peu de copies ont traité ces questions. Une très faible partie de candidats a réussi.
- 55 à 58. Ces questions proches du cours, notamment pour tester les connaissances en éléctrochimie, ont été dans l'ensemble correctement traitées.
- 59-60. Questions peu traitées. La question 60 ouverte demandait aux candidats de réfléchir sur la facilité d'insérer de nouveaux ions lorsque les canaux sont déjà remplis.
- 61. Ici, il fallait faire le lien entre enthalpie libre et potentiel électrochimique pour ensuite arriver à la formule. Question plutôt bien traitée avec la 62.
- 63-65. Ces questions sont très peu traitées.

STATISTIQUES

La moyenne des 1377 candidats français est de 10,07/20 avec un écart-type de 3,25.