

Définitions S2PC.2

Extrait programme officiel PCSI

3 Transformations de la matière : évolution d'un système et mécanisme réactionnel

Modélisation microscopique d'une transformation chimique

Modélisation d'une transformation par deux actes élémentaires opposés, état d'équilibre d'un système.

Modélisation d'une transformation par un mécanisme constitué par plusieurs actes élémentaires successifs ; étape cinétiquement déterminante, approximation de l'état quasi-stationnaire, équilibre rapidement établi, loi de vitesse associée.

Contrôle cinétique, contrôle thermodynamique.

Catalyse

Catalyse d'une transformation, intervention du catalyseur dans le mécanisme réactionnel, sélectivité.

Catalyse enzymatique, site actif d'une enzyme, complexe enzyme-substrat.

- Relier la constante thermodynamique d'équilibre aux constantes de vitesse dans le cas d'une transformation modélisée par deux actes élémentaires opposés.

- Reconnaître, à partir d'informations fournies, l'étape cinétiquement déterminante d'un mécanisme ou les conditions d'utilisation de l'approximation de l'état quasi-stationnaire d'un intermédiaire réactionnel.

- Établir la loi de vitesse de consommation d'un réactif ou de formation d'un produit à partir d'un mécanisme réactionnel simple et d'informations fournies.

- Reconnaître les paramètres qui favorisent la formation d'un produit dans le cas de deux réactions compétitives.

- Reconnaître un effet catalytique dans un mécanisme réactionnel ou sur un profil énergétique.

- Reconnaître un effet de sélectivité par action d'un catalyseur.

- Établir la loi de vitesse de consommation d'un réactif ou de formation d'un produit à partir d'un mécanisme de catalyse enzymatique fourni.

- Identifier, à partir d'informations structurales, les interactions mises en jeu entre le site actif d'une enzyme et son substrat et interpréter le rôle catalytique de l'enzyme.

Définitions

Équilibre rapide : on a un équilibre rapide lorsque la réaction directe et inverse sont plus faciles que les autres étapes élémentaires d'un mécanisme.

Étape limitante : c'est la réaction élémentaire supposée la plus lente/difficile (constante de vitesse la plus faible) d'un mécanisme réactionnel.

Catalyse homogène : le catalyseur, les réactifs et les produits appartiennent à la même phase. La concentration du catalyseur apparaît dans la loi de vitesse de la réaction catalysée.

Catalyse hétérogène : le catalyseur n'appartient pas à la même phase que les réactifs et les produits. Souvent le catalyseur sera solide et sa « concentration » n'apparaît pas dans la loi de vitesse de la réaction catalysée.

Site actif d'un enzyme : un enzyme est une macro-protéine de très grande taille, on appelle site actif la région particulière dont l'arrangement spatial et les fonctions chimiques permettent à l'enzyme de fixer spécifiquement le substrat et de catalyser la réaction.

Capacités numériques

- Établir un système d'équations différentielles et le résoudre numériquement afin de visualiser l'évolution temporelle des concentrations et de leurs dérivées dans le cas d'un mécanisme à deux actes élémentaires successifs. Mettre en évidence l'étape cinétiquement déterminante ou l'approximation de l'état quasi-stationnaire d'un intermédiaire réactionnel.
- Établir un système d'équations différentielles et le résoudre numériquement, avec un langage de programmation, afin de visualiser l'évolution des concentrations au cours du temps pour mettre en évidence les situations de contrôle cinétique ou thermodynamique.

Capacités exigibles

- Savoir définir un équilibre rapide.
- Savoir appliquer l'AEQS à un IR instable.
- Savoir appliquer l'AECD à une étape limitante.
- Savoir modéliser la cinétique enzymatique de Michaelis-Menten.