

Modélisation microscopique d'une transformation chimique

Notion d'acte élémentaire, molécularité. Loi de Van't Hoff.

Profil réactionnel : Energie potentielle en fonction de la coordonnée de réaction. Notion de complexe activé et d'intermédiaire réactionnel. Distinction.

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 (et AECD), approximation de l'état quasi-stationnaire (AEQS), équilibre rapidement établi (et AER), loi de vitesse associée. Applications

Réactions complexes. Détermination de la loi cinétique à partir du mécanisme.

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. Application : modèle de Michaelis-Menten.

Capacités exigibles :

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.

Organomagnésiens mixtes. Mécanisme d'Ad_N.

S15 : cours et applications directes uniquement ; S16 : cours et exercices

Préparations des organomagnésiens mixtes. Conditions expérimentales. Nucléophilie et basicité (Lewis et Brønsted) des réactifs de Grignard. Choix du solvant.

Réactions de substitution : réaction sur les acides de Brønsted. Application à la synthèse de magnésiens acétyléniques. Réactions sur les dérivés halogénés. Réactions secondaires pouvant intervenir pendant la préparation (cas des dérivés benzyliques et allyliques).

Réactions d'addition : réaction sur le groupe carbonyle (cétones, aldéhydes), sur le dioxyde de carbone. Schéma réactionnel.

Mécanismes supposés (radicalaire ou concerté à 6 centres) hors programme.

Et tous les chapitres précédents en chimie organique :

Représentation de Lewis des atomes et des ions

Géométrie des molécules et des ions polyatomiques. Applications

Interactions de faible énergie - Forces intermoléculaires

Formule des composés organiques

Stéréochimie des molécules organiques

Equilibres acido-basiques

Constante d'acidité.

Diagramme accepteur-donneur (DAD, gradué en pK_A). Diagramme de prédominance (DP).

Exemples usuels d'acides et bases : nom, formule et nature – faible ou forte – des acides sulfurique, nitrique, chlorhydrique, phosphorique, acétique, du dioxyde de carbone aqueux, de la soude, la potasse, l'ion hydrogénocarbonate, l'ion carbonate, l'ammoniac.

Réaction la plus favorisée entre les espèces introduites en solution (définie comme la réaction de plus grande constante d'équilibre).

Capacités exigibles :

Reconnaître une réaction acide-base à partir de son équation.

Écrire l'équation de la réaction modélisant une transformation en solution aqueuse en tenant compte des caractéristiques du milieu réactionnel (nature des espèces chimiques en présence, pH) et des observations expérimentales.

Utiliser des tables pour extraire les données thermodynamiques pertinentes pour étudier un système en solution aqueuse.

Déterminer la valeur de la constante thermodynamique d'équilibre pour une équation de réaction, combinaison linéaire d'équations dont les constantes thermodynamiques sont connues.

Programme du DS n°4 (Samedi 8 février 2025)

Modélisation microscopique d'une transformation chimique

Chimie organique (jusqu'aux organomagnésiens)

Equilibres acido-basiques, applications directes du cours
