

Cours :

CIN1 – MODÉLISATION MICROSCOPIQUE D'UNE TRANSFORMATION CHIMIQUE	CIN2 – MODÉLISATION MICROSCOPIQUE DE TRANSFORMATIONS COMPÉTITIVES
1. Mécanisme réactionnel	
1.1. Mise en évidence expérimentale	1. Mise en évidence expérimentale
1.2. Caractéristiques d'un acte élémentaire	2. Contrôles cinétique et thermodynamique
1.2.1. Molécularité	2.1. Modélisation – Mise en équation
1.2.2. Règle de Van't Hoff	2.2. Résolution numérique
1.2.3. Profil énergétique	2.3. Nature du contrôle
1.3. Élaboration d'un mécanisme	2.4. Facteurs d'influence
2. Cas d'actes élémentaires opposés	
2.1. Modélisation – Mise en équation	CIN3 – LA CATALYSE
2.2. Résolution analytique	
2.3. État d'équilibre	
3. Cas des deux actes élémentaires successifs	
3.1. Modélisation – Mise en équation	1. Réactions catalysées
3.2. Résolution numérique	1.1. Mise en évidence expérimentale
3.3. Cas général	1.2. Profil réactionnel
3.4. Cas limite : AEQS	1.3. Propriétés du catalyseur
3.5. Cas limite : AECD	
4. Cas d'un équilibre rapidement établi	
4.1. Modélisation – Mise en équation	2. Les différentes catalyses
4.2. Résolution numérique	2.1. Catalyse hétérogène
	2.2. Catalyse homogène
	2.3. Catalyse enzymatique
	2.3.1. Les enzymes
	2.3.2. Site actif
	2.3.3. Modèle cinétique de Michaelis et Menten

Questions de cours possibles :

- Caractéristiques d'un acte élémentaire (définition, molécularité, loi de Van't Hoff, profil)
- Cas d'actes élémentaires opposés, résolution analytique
- Cas d'actes élémentaires successifs ($A \rightarrow B \rightarrow C$), cas limite AEQS
- Cas d'actes élémentaires successifs ($A \rightarrow B \rightarrow C$), cas limite AECD
- Principe de la résolution numérique d'un système d'équations différentielles par la méthode d'Euler, programmation Python
- Contrôles thermodynamique et cinétique (modèle, allure des courbes, proportion des produits suivant nature du contrôle, facteurs influençant nature du contrôle)
- Propriétés d'un catalyseur
- Modèle cinétique de Michaelis Menten (hypothèses, expression de v_0 , allure courbe, détermination v_{max} et K_M)

Exercices :

CIN1, CIN2 et CIN3