



CHƯƠNG 4:
NGHĨA HỌC
& CÂN BẰNG NGHĨA HỌC

N i dung

I. NG HÓA H C

1. M t s khái ni m
2. Ph ng trình ng h c m t s ph n ng n gi n
3. Các y u t nh h ng n v n t c ph n ng

II. CÂN B NG HÓA H C

1. H ng s cân b ng
2. Các y u t nh h ng n cân b ng

I. NG HÓA H C

I.1. M t s khái ni m

❖ V n t c ph n ng



$$\bar{v} = \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t}$$

❖ Bi u th c v n t c ph n n g

Xét ph n n g: $A + B \rightarrow C + D$

$$v = k[A]^m[B]^n$$

Trong ó:

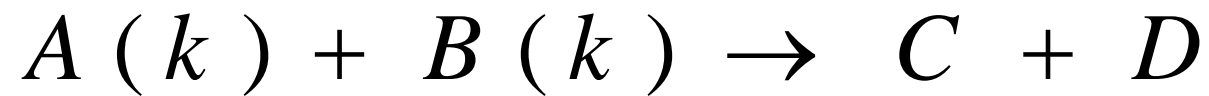
k: c g i là h n g s v n t c

m: b c ph n n g theo A

n: b c ph n n g theo B

(m+n): b c ph n n g t n g quát

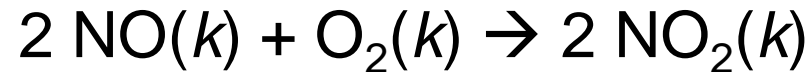
Nếu tác chất tham gia phản ứng là chất khí, thì dùng áp suất các khí tính vận tốc phản ứng



$$v = k \cdot p_A^m \cdot p_B^n$$

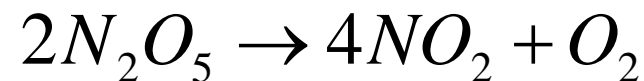
❖ Ph n ng n gi n & ph c t p

- **Ph n ng n gi n** (ph n ng s c p) là ph n ng x y ra m t giai o n
(b c ph n ng trùng v i h s t l ng c a ph n ng)



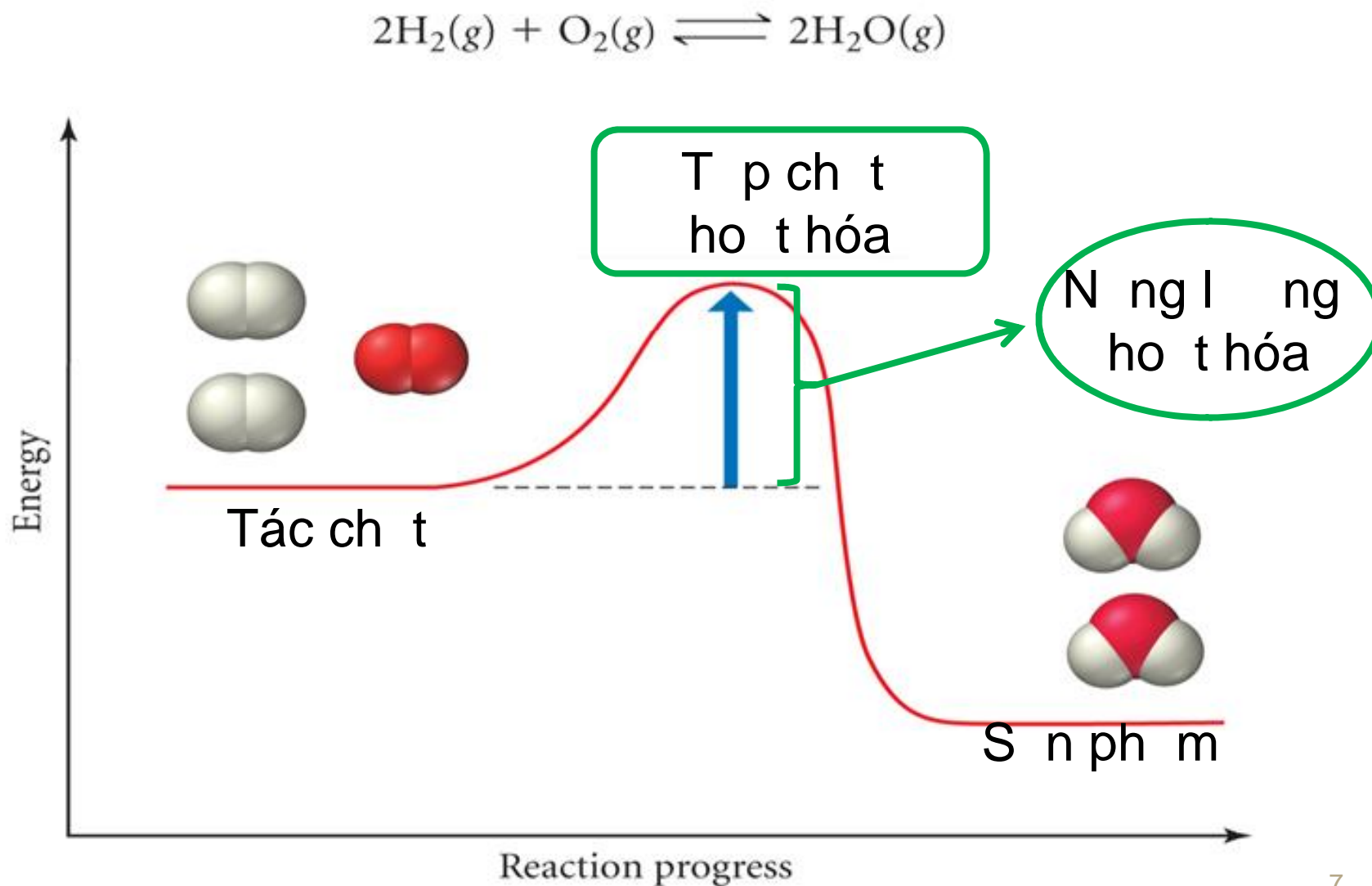
$$v = k \cdot p_{\text{NO}}^2 \cdot p_{\text{O}_2}$$

- **Ph n ng ph c t p** là ph n ng x y ra nhi u giai o n
(b c ph n ng là các **giá tr th c nghi m**)

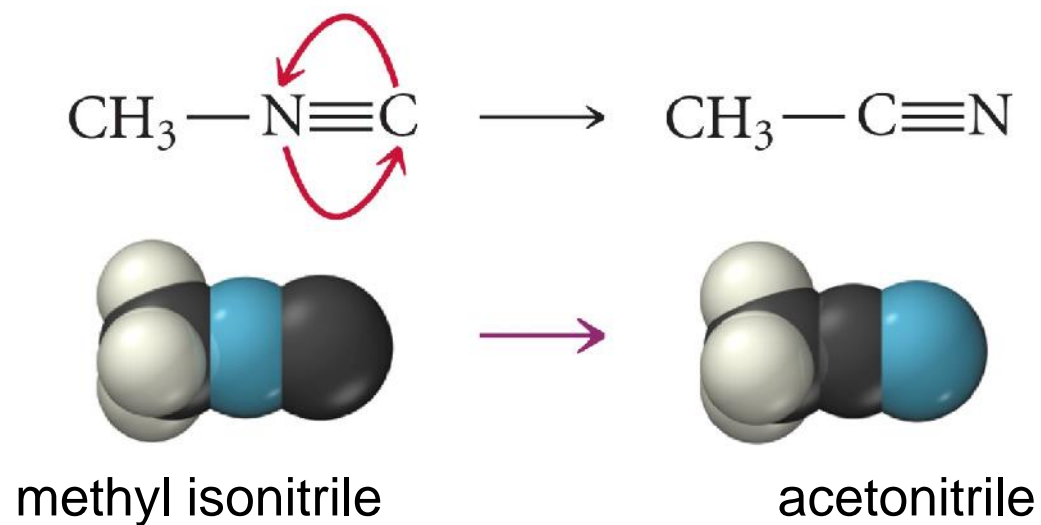


❖ T p ch t ho t hóa

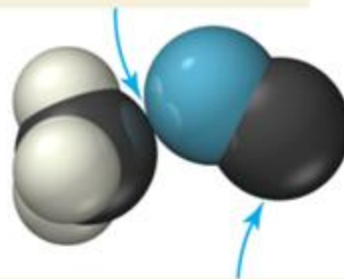
H p ch t trung gian & n ng l ng ho t hóa



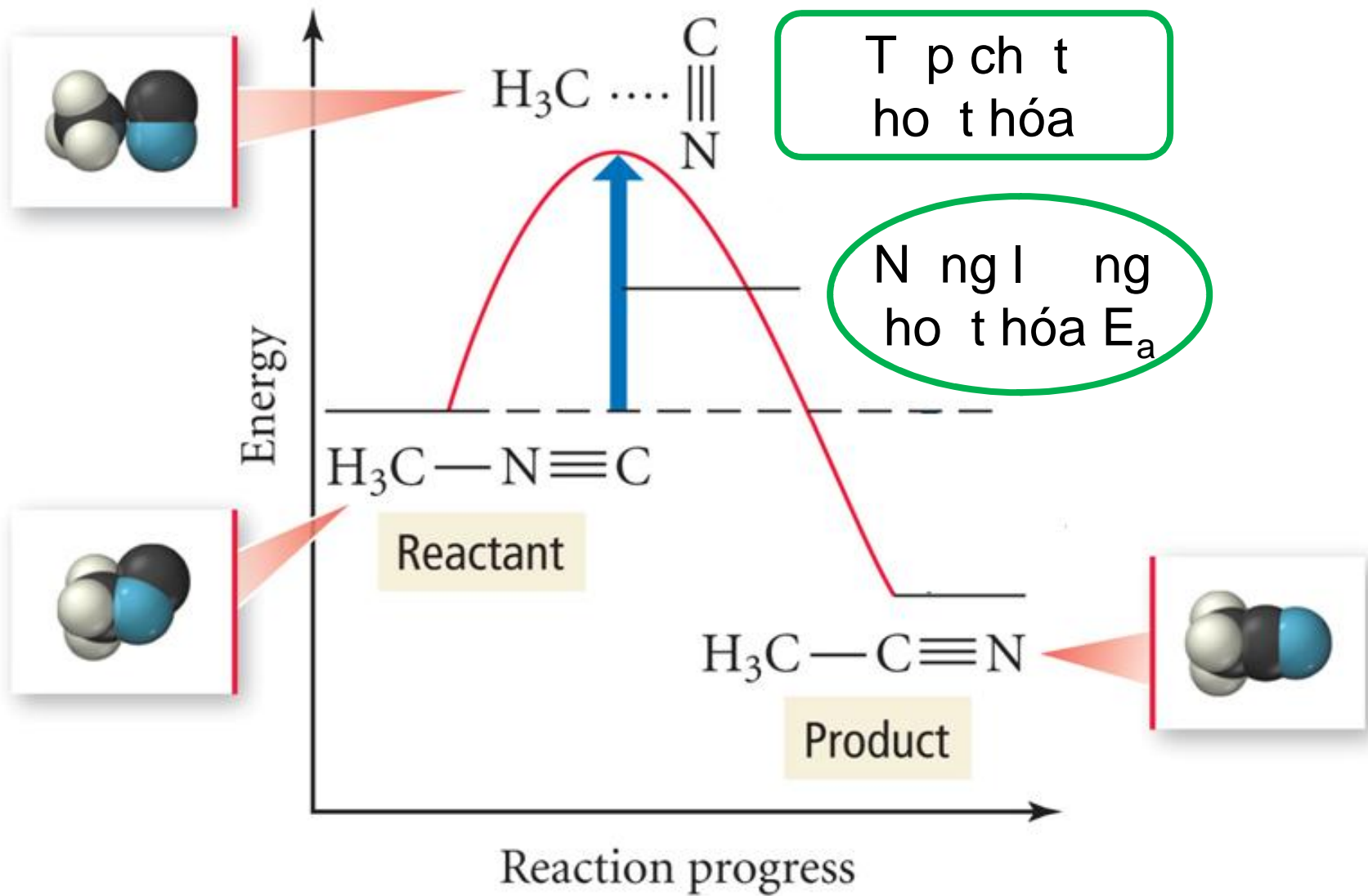
Víd :



Bond weakens

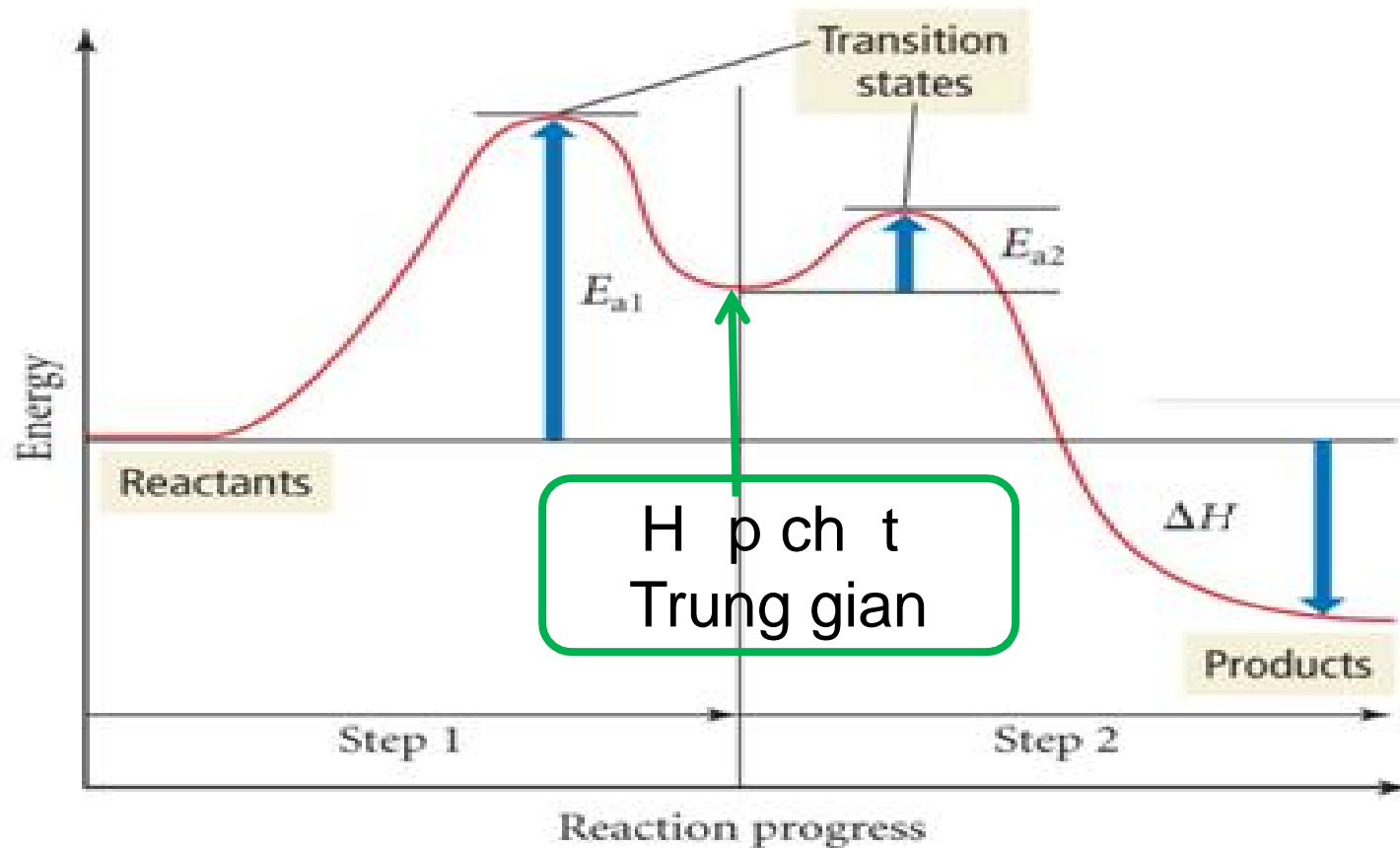


NC group begins to rotate



Energy Diagram for a Two-Step Mechanism

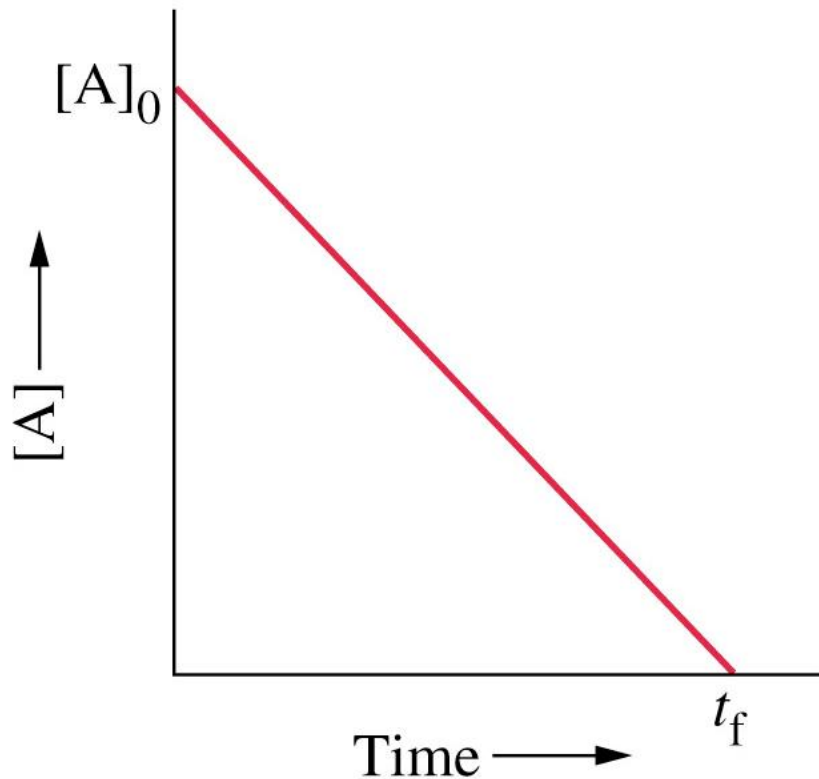
Because E_a for step 1 $>$ E_a for step 2, step 1 has the smaller rate constant and is rate-limiting.



I.2. Ph ản ứng trình độ bậc không

❖ Phản ứng bậc không

Tốc độ phản ứng không phụ thuộc vào nồng độ chất phản ứng



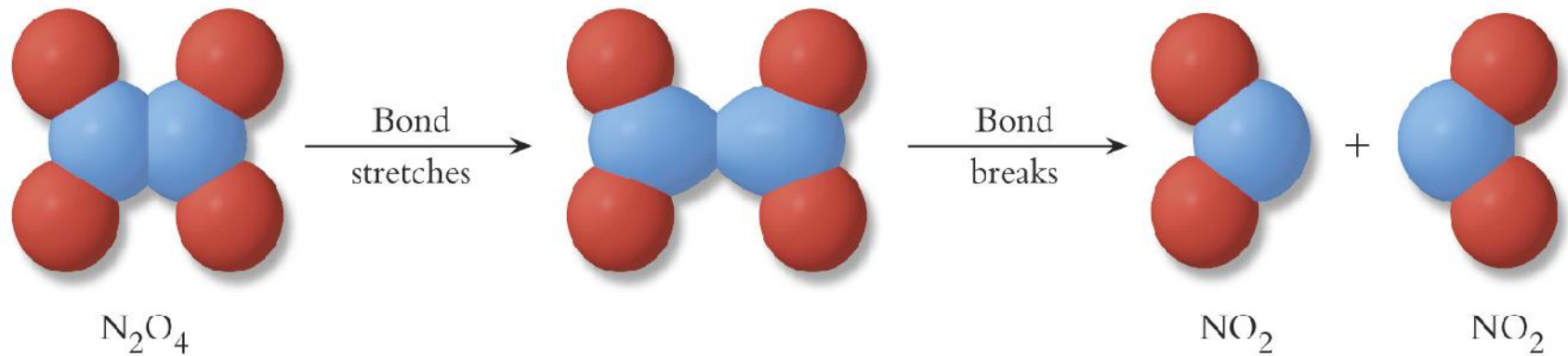
Phương trình

$$v = k[A]^0 = k = \text{const}$$

❖ Ph n ng b c m t

A S n ph m

$$v = k[A]$$

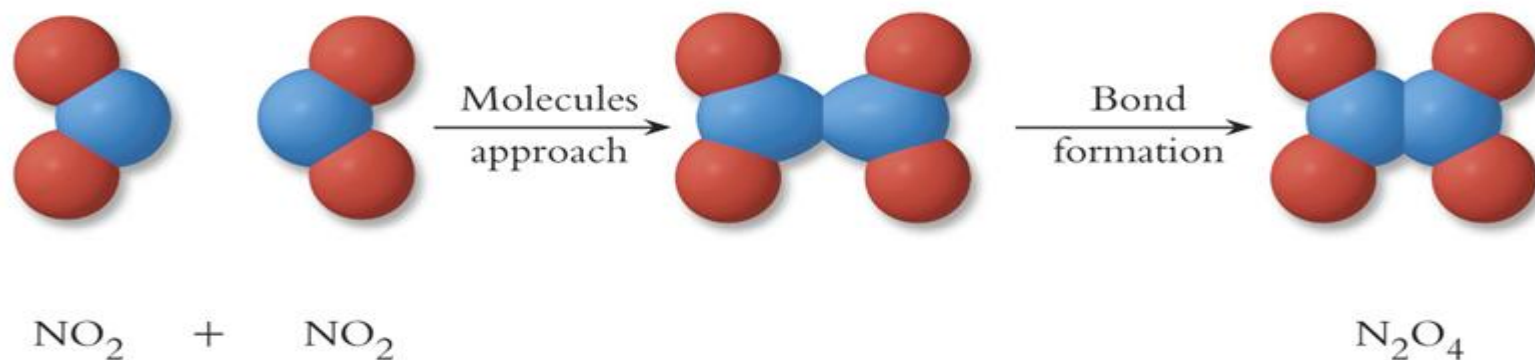


$$v = k [N_2O_4]$$

❖ Ph n ng b c hai



$$v = k[A]^2$$



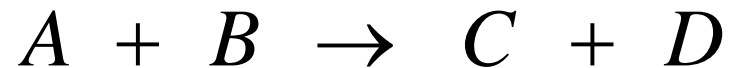
$$v = k[\text{NO}_2]^2$$



$$v = k[A][B]$$

I.3. Các yếu tố ảnh hưởng đến vận tốc phản ứng

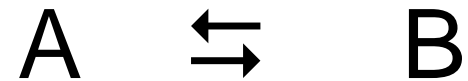
❖ **nh hình ảnh của nồng độ tác chất**



$$v = k[A]^m[B]^n$$

- Nồng độ tác chất tăng thì vận tốc phản ứng tăng
- Vận tốc phản ứng **giảm** theo thời gian

+ i v i ph n ng 2 chi u (thu n ngh ch)



Theo chi u thu n ($A \rightarrow B$) $v_{th} = k_{th} [A]^m$

Theo chi u ngh ch ($B \rightarrow A$) $v_{ng} = k_{ng} [B]^n$

Theo th i gian

- $[A]$ gi m $\rightarrow v_{th}$ gi m \searrow
- $[B]$ t ng $\rightarrow v_{ng}$ t ng \nearrow

Khi $v_{th} = v_{ng} \rightarrow$ ph n ng t **cân b ng**

❖ nh h ng c a nhi t

Quy t c Van't Hoff

Khi t ng nhi t lên 10^0 thì v n t c ph n ng t ng lên $2 \rightarrow 4$ l n

S l n t ng này g i là **h s nhi t** :

$$\frac{v_2}{v_1} = \frac{k_2}{k_1} = \chi^{\frac{\Delta T}{10}}$$

V i

v_2, k_2 là v n t c và h ng s v n t c c a ph n ng
nhi t T_2

v_1, k_1 là v n t c và h ng s v n t c c a ph n ng
nhi t T_1

$$T = T_2 - T_1$$

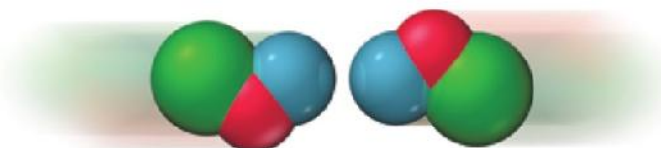
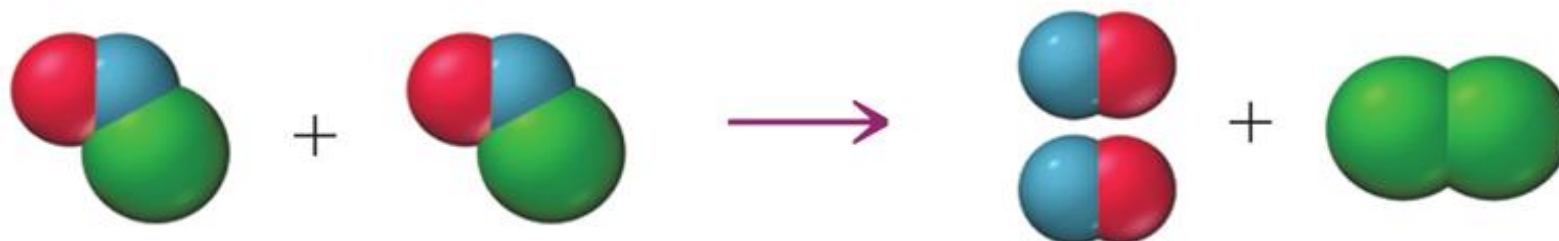
H th c Arrhenius

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

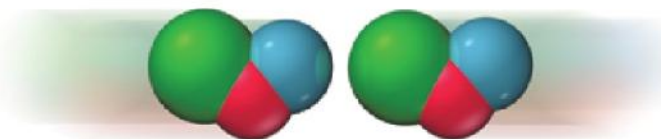
E_a : n ng l ng ho t hóa c a ph n ng

A : th a s t n s (th hi n ***xác suất va chạm hiệu u***
c a các phân t tham gia ph n ng)

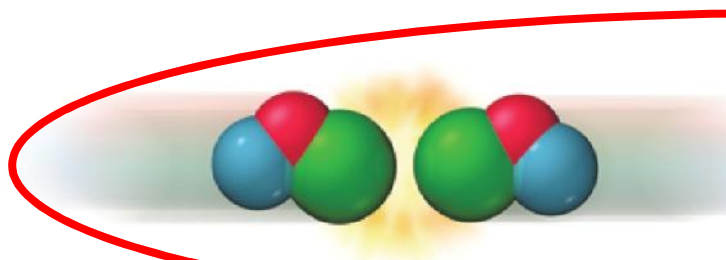
Ví d : Xét ph n ng



Ineffective collision



Ineffective collision



Effective collision

❖ **nh h ng c a xúc tác**

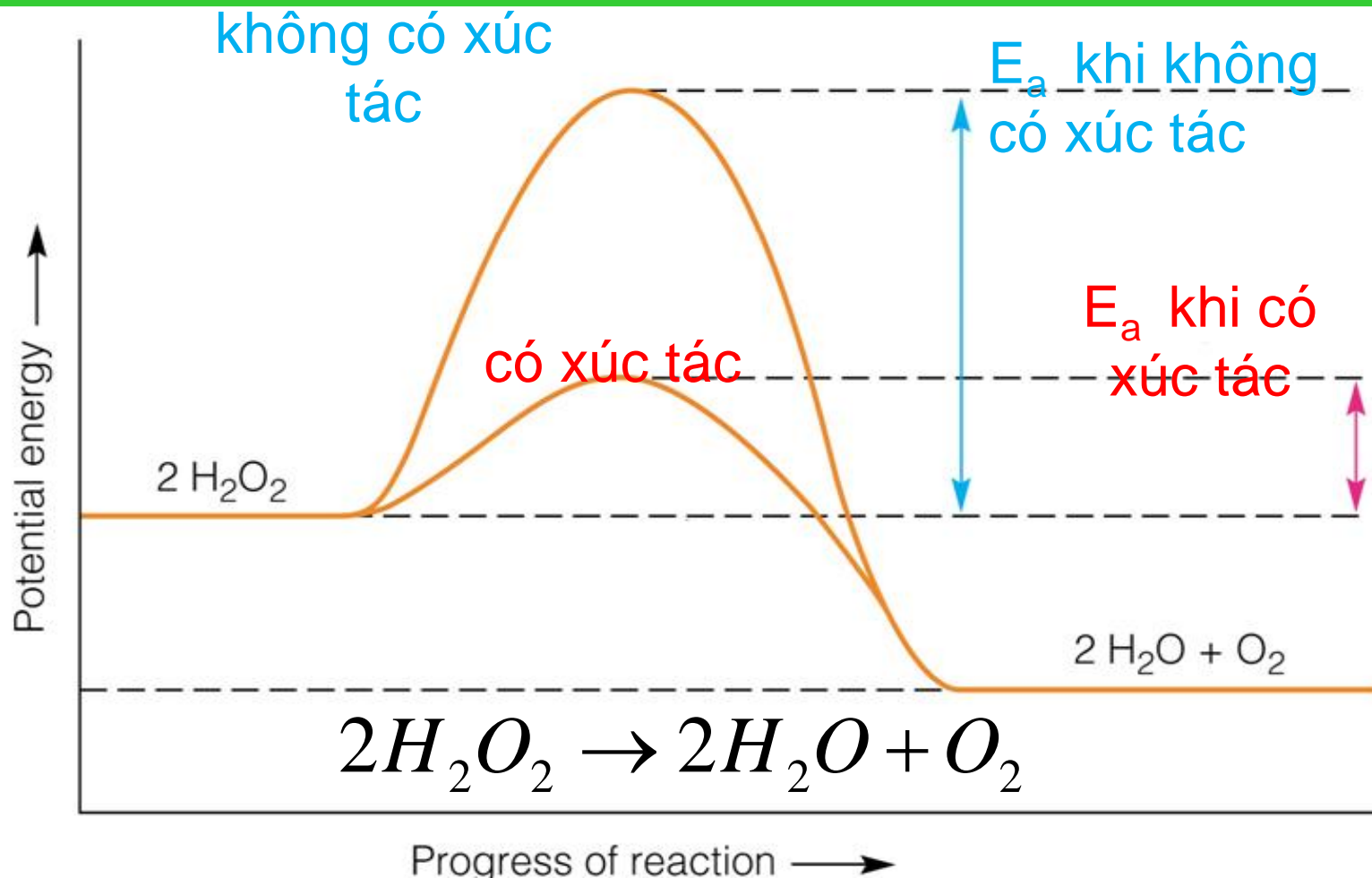
- Ch t xúc tác là nh ng ch t có kh n ng làm t ng v n t c ph n ng.
- Ch t xúc tác tham gia vào ph n ng, nh ng sau ph n ng c ph c h i, **không b bi n i v kh i l ng và ch t l ng**

Phân lo i ch t xúc tác:

- Xúc tác ng th : có cùng pha v i ch t tham gia ph n ng
- Xúc tác d th : không cùng pha v i ch t tham gia ph n ng, ph n ng hoá h c x y ra trên b m t ch t xúc tác
- Xúc tác enzym

Chất xúc tác làm thay đổi đường đi trong quá trình phản ứng (**thuận & nghịch**),
không làm thay đổi hằng số cân bằng của phản ứng thuận nghịch

Chất xúc tác làm thay đổi đường đi trong quá trình phản ứng bằng cách làm
giảm năng lượng hoạt hóa





T c p h n n g tr ê n th a y i n h th n à o k h i t n g th t í c h b ì n h p h n n g l ê n 2 l n

- a. *T n g l ê n 4 l n*
- b. *T n g l ê n 16 l n*
- c. *G i m x u n g 16 l n*
- d. *G i m x u n g 4 l n*

Ví dụ :

Một phần nghìn kết thúc sau **3h 20⁰C**. Nhiệt độ phần nghìn sau **20 phút**, tỉ lệ phần nghìn tăng là **3**.

- a. 30⁰C
- b. 40⁰C
- c. 50⁰C
- d. 60⁰C

Ví dụ :

Khi thể tích khí trong bình kín ở 20°C thì khối lượng của khí là k . Khi nhiệt độ tăng lên 30°C thì khối lượng khí tăng lên 2 l n .

Tính năng lượng hóa (kJ) của khí.

II. CÂN BẰNG HÓA HỌC

II.1. Hệ số cân bằng

Xét phản ứng (nhiệt độ) 2 chiều (thuận nghịch)



- $v_{th} = k_{th} [A]^a [B]^b$
- $v_n = k_n [C]^c [D]^d$

trạng thái cân bằng: $v_t = v_n$

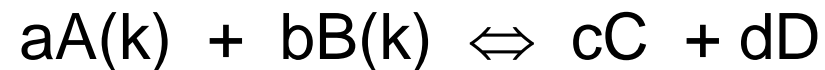
$$\Rightarrow k_t [A]^a [B]^b = k_n [C]^c [D]^d .$$

$$K = \frac{k_t}{k_n} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

+N u ph n ng trong dung d ch

$$K_c = \left[\frac{C_C^c C_D^d}{C_A^a C_B^b} \right]$$

+N u h n h p ph n ng là ch t khí



$$K_P = \frac{P_C^c \cdot P_D^d}{P_A^a \cdot P_B^b}$$

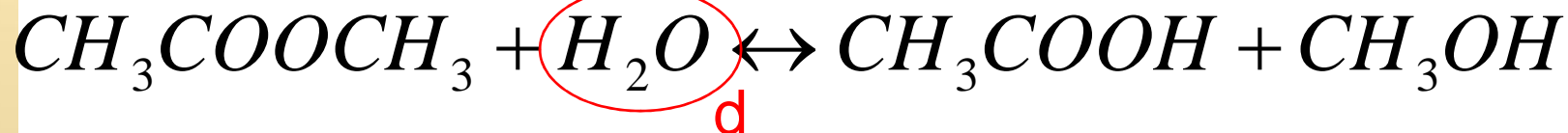
Cách viết biểu thức hằng số cân bằng



$$K_P = P_{CO_2}$$



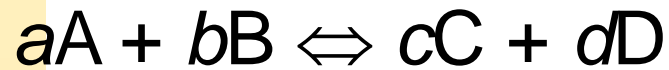
$$K_P = P_{NH_3} \cdot P_{HCl}$$



$$K_C = \frac{[CH_3COOH] \cdot [CH_3OH]}{[CH_3COOCH_3] \cdot [H_2O]}$$


$$K_C = \frac{[CH_3COOH] \cdot [CH_3OH]}{[CH_3COOCH_3]}$$

Mối liên hệ hằng số cân bằng K giữa các phản ứng



$$K_1 = \frac{[C]^c \times [D]^d}{[A]^a \times [B]^b}$$

$$K_2 = \frac{[A]^a \times [B]^b}{[C]^c \times [D]^d}$$



$$K_1 = \frac{1}{K_2}$$



$$K_1 = \frac{[C]^c}{[A]^a \times [B]^b}$$



$$\begin{aligned} K_2 &= \frac{[C]^{2c}}{[A]^{2a} \times [B]^{2b}} \\ &= \left(\frac{[C]^c}{[A]^a \times [B]^b} \right)^2 \end{aligned}$$


$$K_2 = K_1^2$$




$$K_1 = \frac{[B]^b}{[A]^a}$$

$$K_2 = \frac{[C]^c}{[B]^b}$$

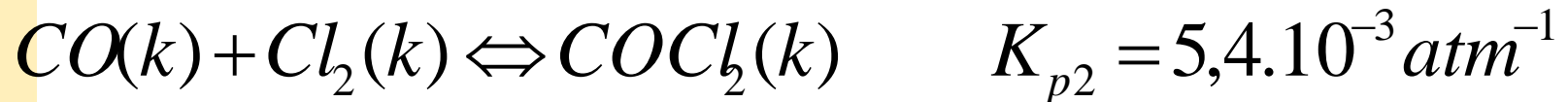
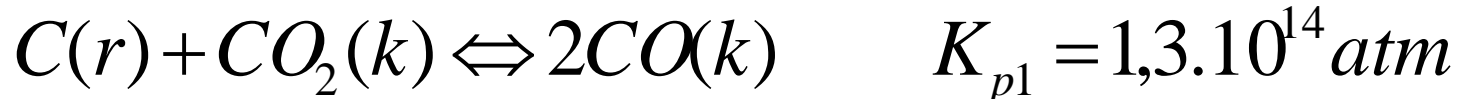


$$K_3 = \frac{[C]^c}{[A]^a}$$

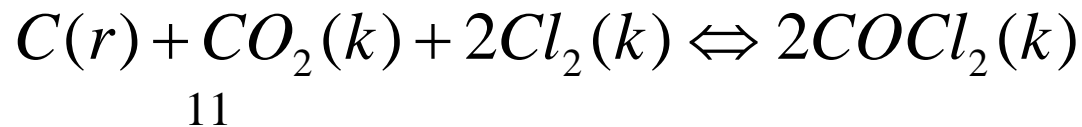
$$= \frac{[B]^b}{[A]^a} \times \frac{[C]^c}{[B]^b}$$


$$K_3 = K_1 \times K_2$$

Ví dụ : Cho các cân bằng ở 850°C



Tính hằng số cân bằng K_p của phản ứng:



a) $7,54 \cdot 10^{11}$

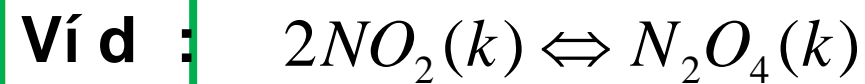
b) $3,79 \cdot 10^9$

c) $7,54 \cdot 10^{-11}$

d) $4,37 \cdot 10^{-9}$

S liên hệ giữa G^0 và K

$$\Delta G^0 = -RT \ln K$$



Có ΔH và ΔS là $-57,4\text{Kcal}$ và $-176,74\text{ cal.}^{-1}$

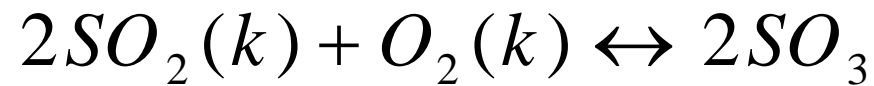
- Tính nhiệt độ cân bằng
- Tính giá trị hằng số cân bằng 25°C

II.2. Các yếu tố ảnh hưởng đến cân bằng

Nguyên lý Le Chatelier về sự chuyển dịch cân bằng:

Vì mặt khác trạng thái cân bằng, nếu ta thay đổi bất kỳ một yếu tố xác định điều kiện cân bằng (p , T , C) thì cân bằng sẽ dịch chuyển theo chiều ngược lại để thay đổi

Ví dụ :

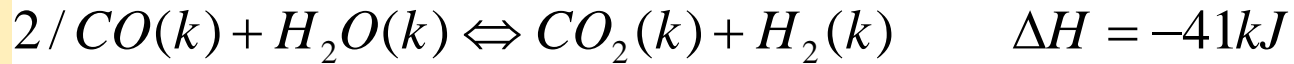
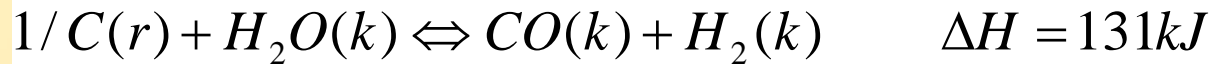


$$\Delta H_{pu}^0 = -198,4kJ$$

thụ nhiệt, cân bằng chuyển dịch:

- a) Tăng áp suất, tăng nhiệt
- b) Giảm áp suất, tăng nhiệt
- c) Tăng áp suất, giảm nhiệt
- d) Giảm áp suất, giảm nhiệt

Xét các hệ cân bằng sau trong bình kín



Các cân bằng trên sẽ chuyển dịch như thế nào khi thay đổi điều kiện trong các trường hợp sau:

- a. Tăng nhiệt độ
- b. Thêm lượng hơi nước vào
- c. Thêm khí H_2 vào
- d. Giảm thể tích của bình kín
- e. Dùng thêm chất xúc tác