



# **CHƯƠNG 4:**

# **ĐỘNG HÓA HỌC**

# **& CÂN BẰNG HÓA HỌC**

# Nội dung

## I. ĐỘNG HÓA HỌC

1. Một số khái niệm
2. Phương trình động học một số phản ứng đơn giản
3. Các yếu tố ảnh hưởng đến vận tốc phản ứng

## II. CÂN BẰNG HÓA HỌC

1. Hằng số cân bằng
2. Các yếu tố ảnh hưởng đến cân bằng

# I. ĐỘNG HÓA HỌC

## I.1. Một số khái niệm

❖ Vận tốc phản ứng



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

## ❖ Biểu thức vận tốc phản ứng

Xét phản ứng:  $A + B \rightarrow C + D$

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

Trong đó:

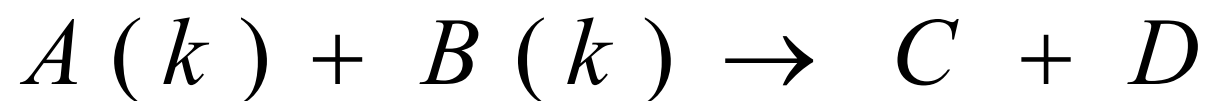
k: được gọi là hằng số vận tốc

m: bậc phản ứng theo A

n: bậc phản ứng theo B

(m+n): bậc phản ứng tổng quát

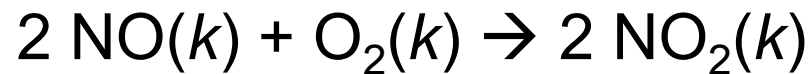
Nếu tác chất tham gia phản ứng là chất khí, thì dùng áp suất các khí để tính vận tốc phản ứng



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

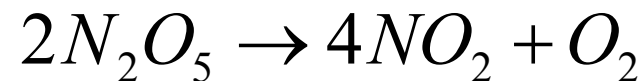
## ❖ Phản ứng đơn giản & phức tạp

- **Phản ứng đơn giản** (phản ứng sơ cấp) là phản ứng xảy ra một giai đoạn  
(*bậc phản ứng trùng với hệ số tỷ lượng của phản ứng*)



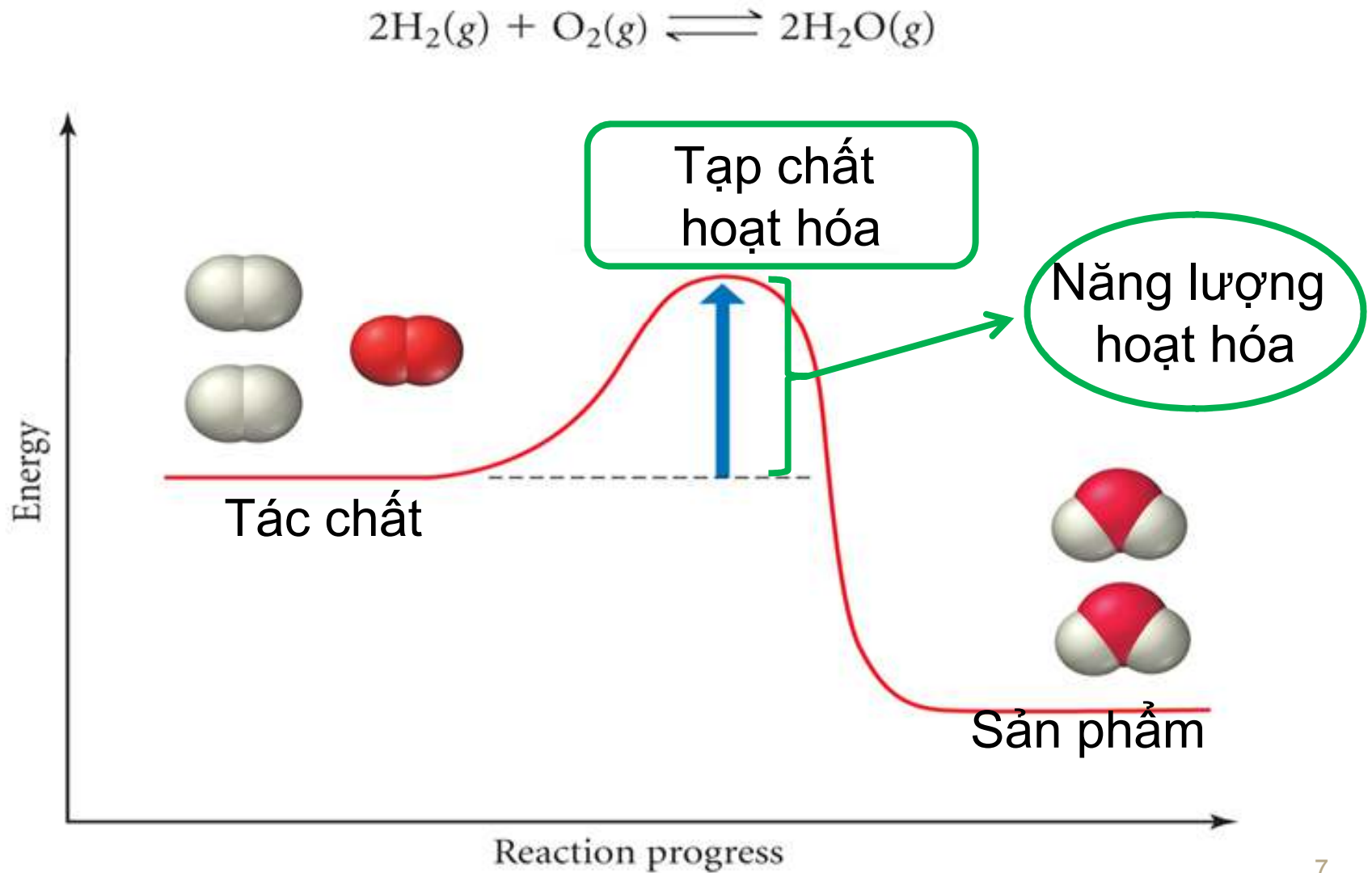
$$v = k \cdot p_{\text{NO}}^2 \cdot p_{\text{O}_2}$$

- **Phản ứng phức tạp** là phản ứng xảy ra nhiều giai đoạn  
(*bậc phản ứng là các giá trị thực nghiệm*)

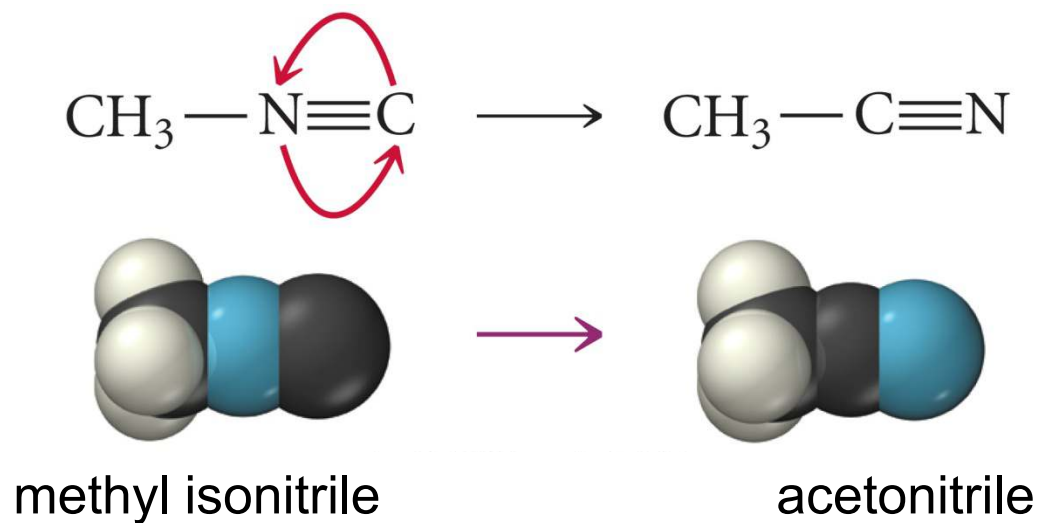


# ❖ TẠP CHẤT HOẠT HÓA

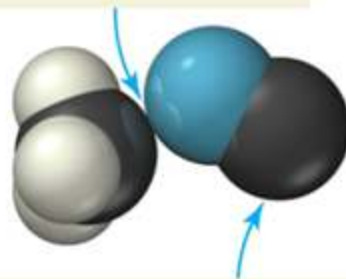
## HỢP CHẤT TRUNG GIAN & NĂNG LƯỢNG HOẠT HÓA



Ví dụ:

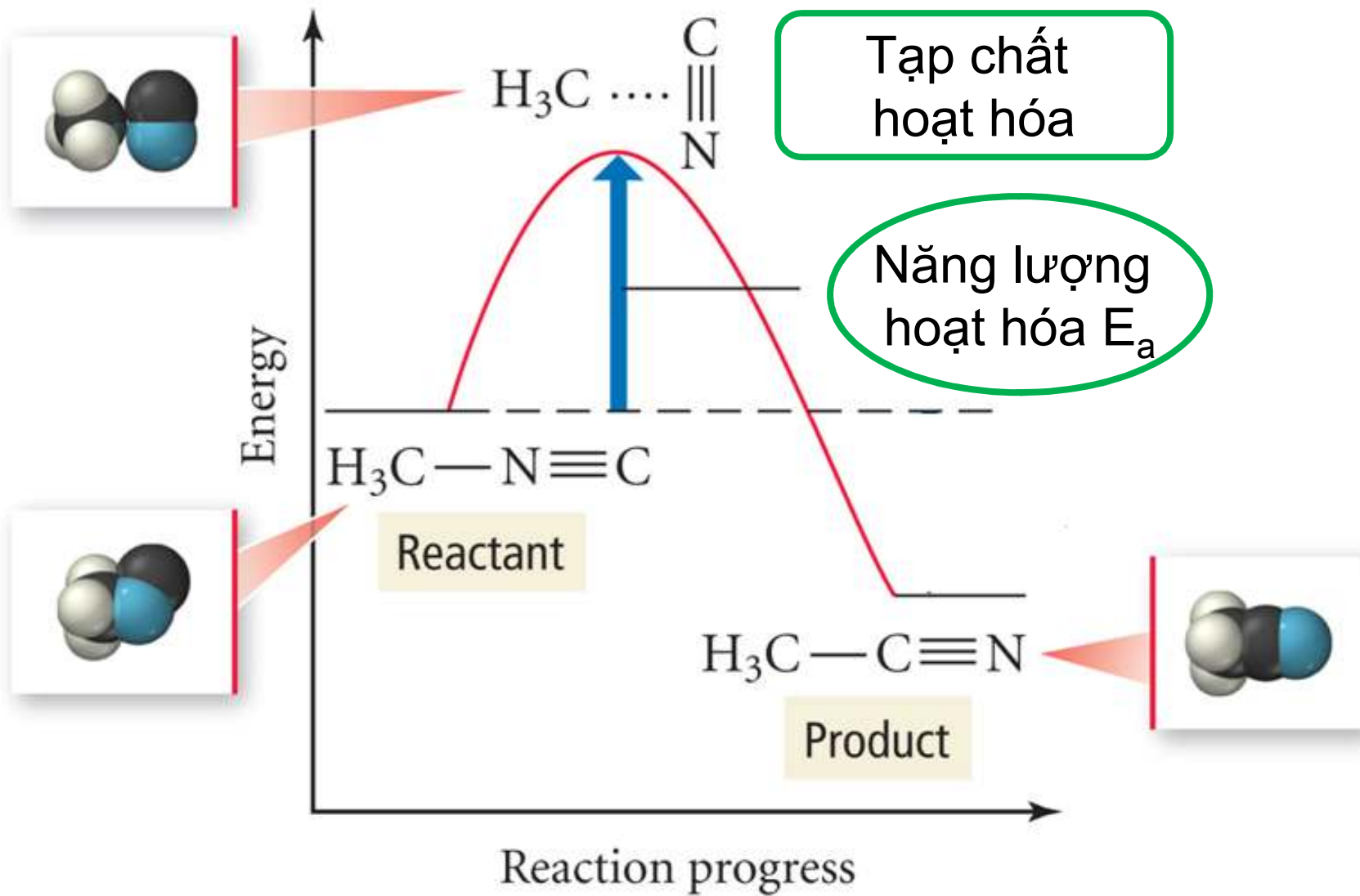


Bond weakens



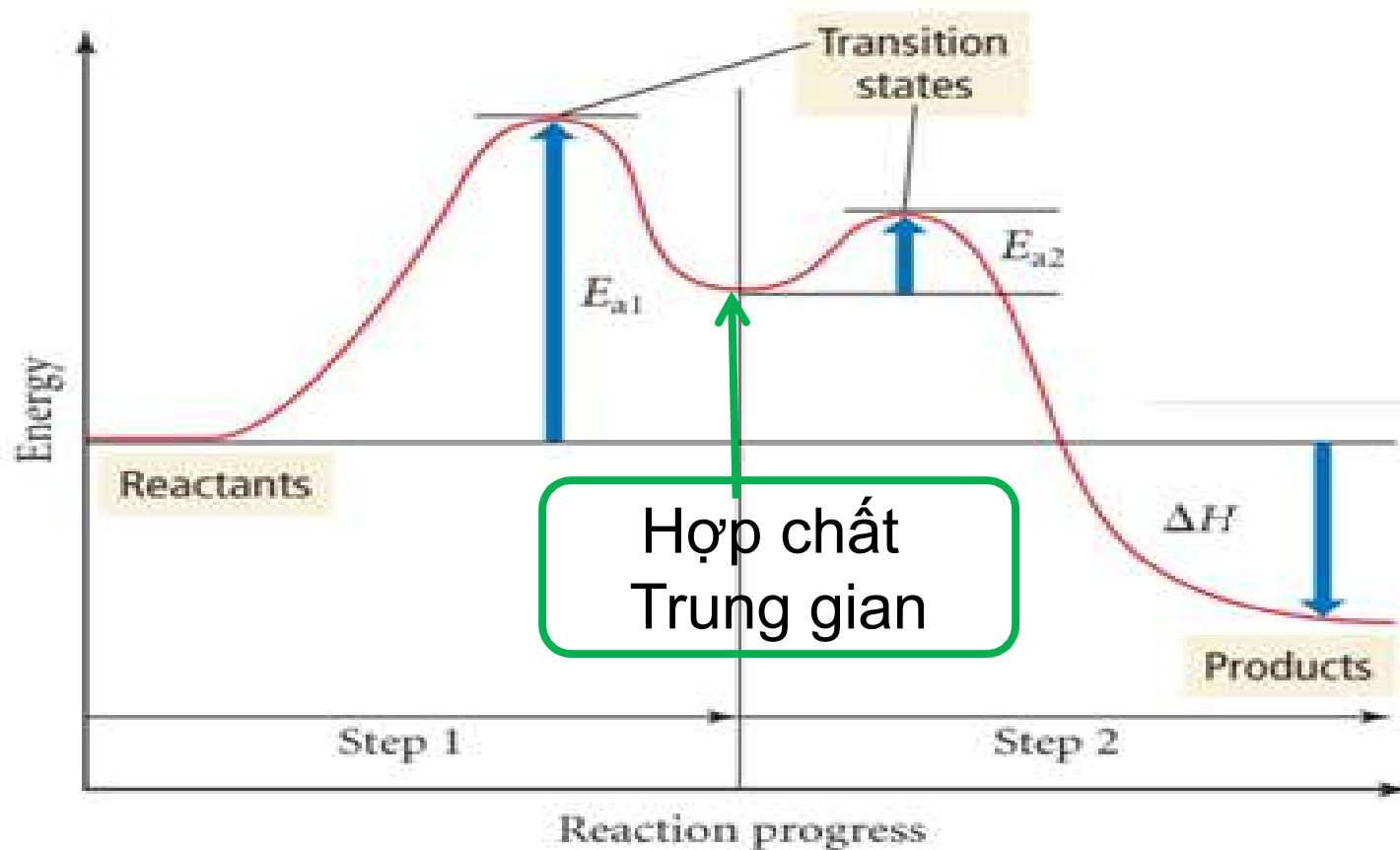
NC group begins to rotate





## 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.

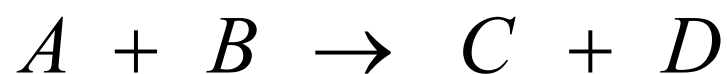


## I.2. Phương trình động học một số phản ứng đơn giản

- ❖ **Phản ứng bậc không**
- ❖ **Phản ứng bậc một**
- ❖ **Phản ứng bậc hai**

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

### ❖ Ảnh hưởng 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

## ❖ Ảnh hưởng của nhiệt độ

### Quy tắc Van't Hoff

Khi tăng nhiệt độ lên  $10^0$  thì vận tốc phản ứng tăng lên  $2 \rightarrow 4$  lần

Số lần tăng này gọi là **hệ số nhiệt độ:  $\gamma$**

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

Với

$v_2, k_2$  là vận tốc và hằng số vận tốc của phản ứng ở nhiệt độ  $T_2$

$v_1, k_1$  là vận tốc và hằng số vận tốc của phản ứng ở nhiệt độ  $T_1$

$$\Delta T = T_2 - T_1$$

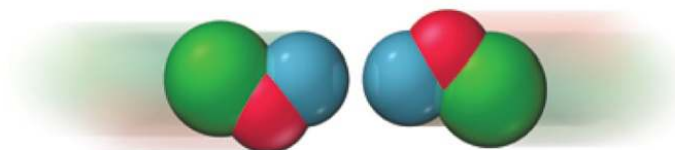
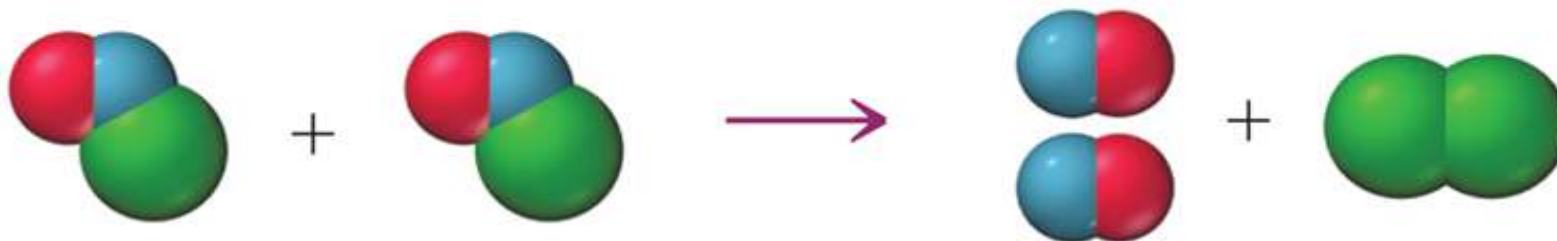
## Hệ thức Arrhenius

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

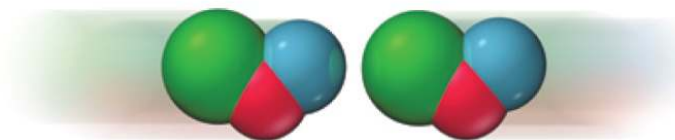
$E_a$  : năng lượng hoạt hóa của phản ứng

$A$  : thừa số tần số (thể hiện **xác suất va chạm hiệu quả** của các phân tử tham gia phản ứng)

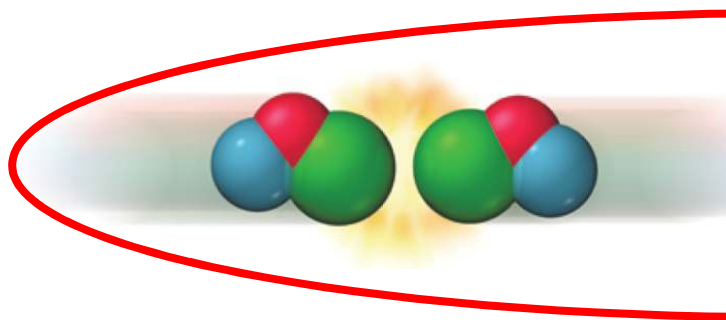
**Ví dụ**: Xét phản ứng



Ineffective collision



Ineffective collision



Effective collision

## ❖ Ảnh hưởng của xúc tác

- Chất xúc tác là những chất có khả năng làm tăng vận tốc phản ứng.
- Chất xúc tác tham gia vào phản ứng, nhưng sau phản ứng được phục hồi, ***không bị biến đổi về khối lượng và chất lượng***

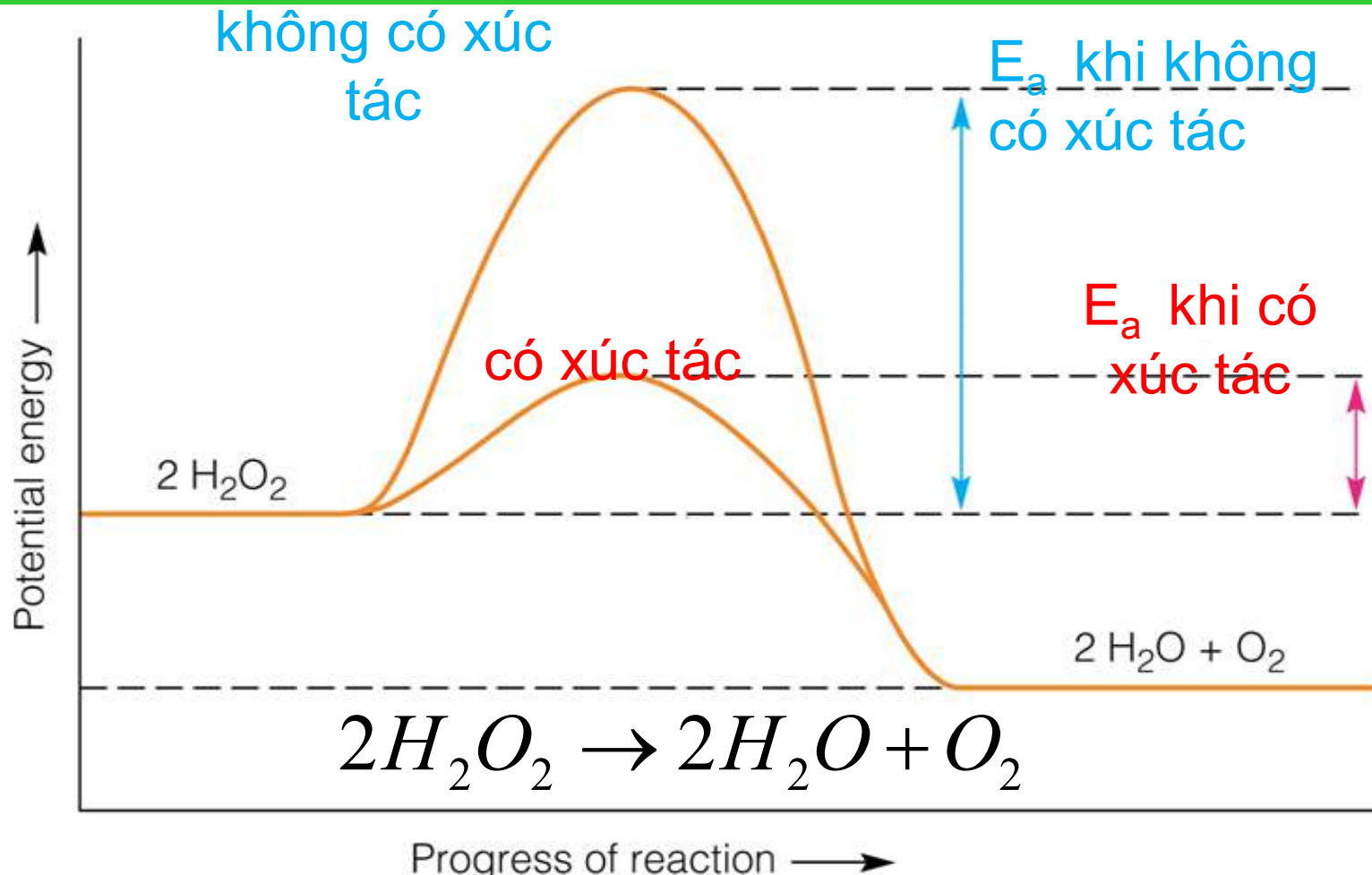
### Phân loại chất xúc tác:

- Xúc tác đồng thể: có cùng pha với chất tham gia phản ứng
- Xúc tác dị thể: không cùng pha với chất tham gia phản ứng, phản ứng hoá học xảy ra trên bề mặt chất xúc tác
- Xúc tác enzym



Chất xúc tác làm tăng vận tốc phản ứng (**thuận & nghịch**),  
không làm thay đổi hiệu suất phản ứng

Chất xúc tác làm tăng vận tốc phản ứng bằng cách làm  
giảm năng lượng hoạt hóa





Tốc độ phản ứng trên thay đổi như thế nào khi **tăng** thể tích bình phản ứng lên **2 lần**

- a. Tăng lên 4 lần
- b. Tăng lên 16 lần
- c. Giảm xuống 16 lần
- d. Giảm xuống 4 lần

## Ví dụ:

Một phản ứng kết thúc sau **3h ở 20°C**. Ở nhiệt độ nào phản ứng sẽ kết thúc sau **20 phút**, biết hệ số nhiệt độ của phản ứng là **3**.

- a. 30°C
- b. 40°C
- c. 50°C
- d. 60°C

## Ví dụ:

Khi thực hiện một phản ứng ở **20<sup>0</sup>C** thì hằng số tốc độ của phản ứng là **k**. Khi tăng nhiệt độ phản ứng lên **30<sup>0</sup>C** thì hằng số tốc độ phản ứng tăng lên **2 lần**.

**Tính năng lượng hoạt hóa (kJ) của phản ứng.**

# II. CÂN BẰNG HÓA HỌC

## II.1. Hằng số cân bằng

Xét phản ứng (đơn giản) 2 chiều (thuận nghịch)



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

Ở trạng thái cân bằng:  $v_t = v_n$

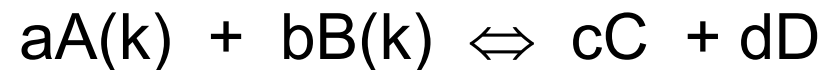
$$\Rightarrow k_t [A]^a[B]^b = k_n [C]^c[D]^d .$$

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

**+Nếu phản ứng trong dung dịch**

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

**+Nếu hỗn hợp phản ứng là chất khí**



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

## Tính hằng số cân bằng



ở nhiệt độ không đổi, áp suất của hỗn hợp cân bằng là 0,6 atm. Vậy hằng số cân bằng của phản ứng trên là

- A.** 0,10      **B.** 0,15      **C.** 0,09      **D.** 0,20

## Tính hằng số cân bằng

Trộn 1 mol A; 1,4 mol B và 0,5 mol C vào một bình có dung tích 1 lít. Phản ứng xảy ra:  $A + B \rightleftharpoons 2C$ .

Nồng độ cân bằng của C là 0,75 M. Hằng số cân bằng  $K_C$  là:

**A.** 50

**B.** 0,5

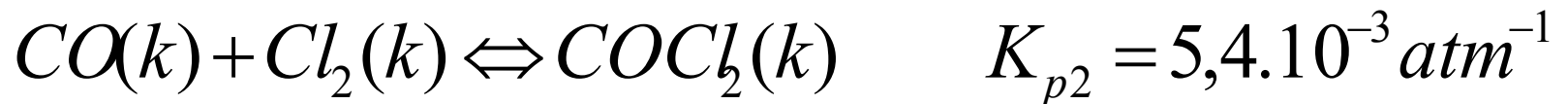
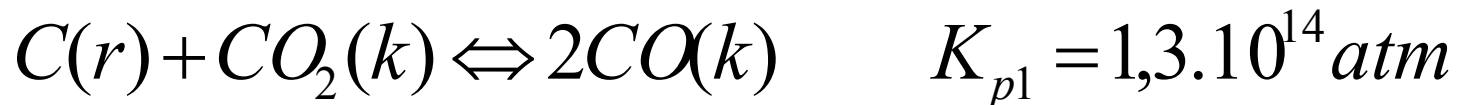
**C.** 5

**D.** 0,05

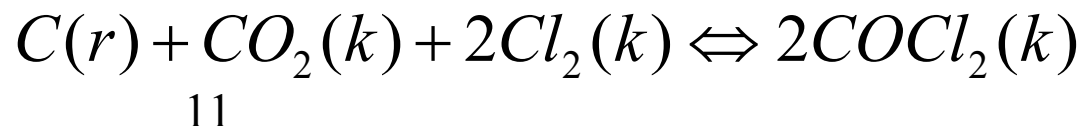


## Tính hằng số cân bằng

Cho các cân bằng ở  $850^{\circ}\text{C}$



Tính hằng số cân bằng  $K_p$  của phản ứng:



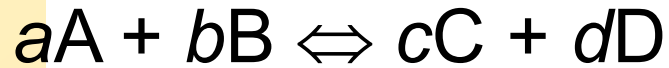
a)  $7,54 \cdot 10^{11}$

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

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


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

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



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

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



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



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



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


$$K_2 = K_1^2$$




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

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

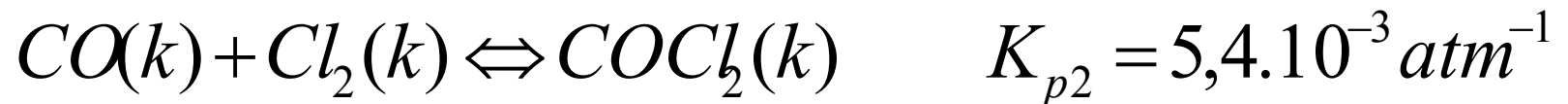
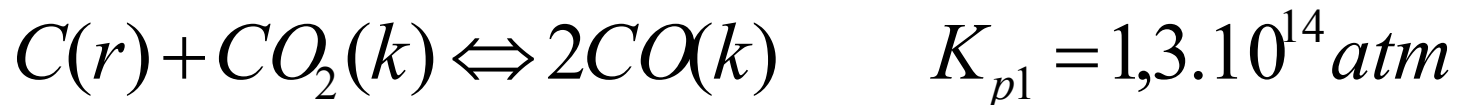


$$K_3 = \frac{[C]^c}{[A]^a}$$
$$= \frac{[B]^b}{[A]^a} \times \frac{[C]^c}{[B]^b}$$

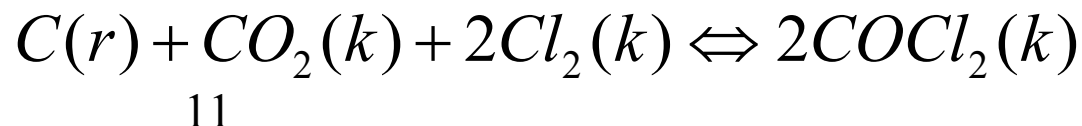

$$K_3 = K_1 \times K_2$$

## Tính hằng số cân bằng

Cho các cân bằng ở  $850^{\circ}\text{C}$



Tính hằng số cân bằng  $K_p$  của phản ứng:



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

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

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

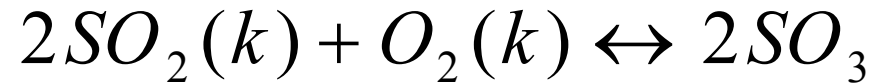
d)  $4,37 \cdot 10^{-9}$

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

**Nguyên lý Le Chatelier về sự chuyển dịch cân bằng:**

*Với một hệ ở 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 chống lại sự thay đổi đó*

**Ví dụ:**

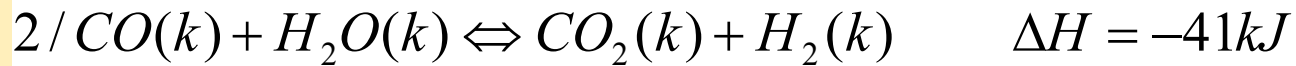
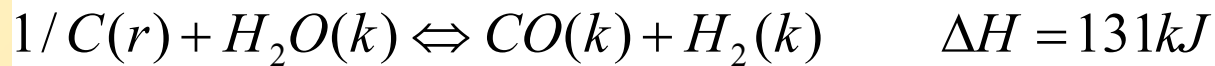


$$\Delta H_{pu}^0 = -198,4kJ$$

Để thu được nhiều  $SO_3$  cần phải:

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

Xét các hệ cân bằng sau trong một bình kín



Các cân bằng trên sẽ chuyển dịch như thế nào khi thay đổi một trong các điều kiện 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