



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



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

V n t c t c th i t i t h i i m t:

$$v = \frac{d[C]}{dt} = -\frac{d[A]}{dt}$$

❖ Bi u th c v n t c ph n ng

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

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

Trong ó:

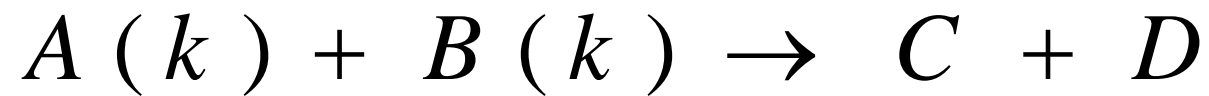
k: c g i là h ng s v n t c

m: b c ph n ng theo A

n: b c ph n ng theo B

(m+n): b c ph n ng t ng quát

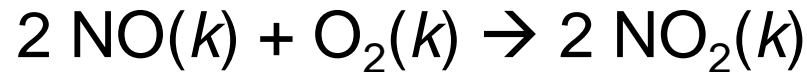
Nếu tác chất tham gia phản ứng là chất khí, thì dùng áp suất các khí tính vận tốc phản ứng



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

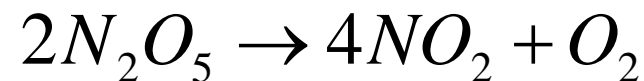
❖ Ph n ng n gi n & ph c t p

- **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)



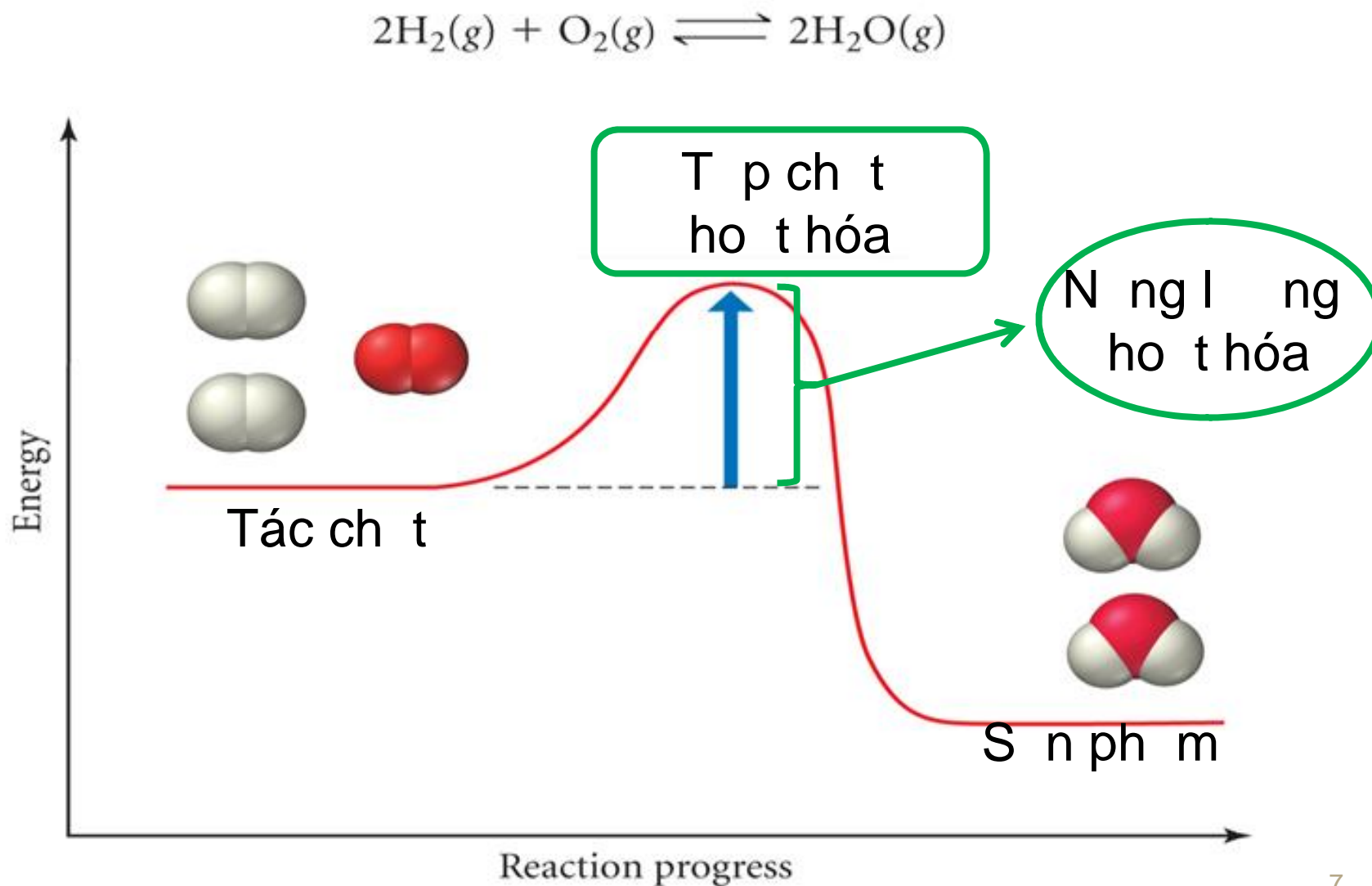
$$v = k \cdot p_{\text{NO}}^2 \cdot p_{\text{O}_2}$$

- **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**)

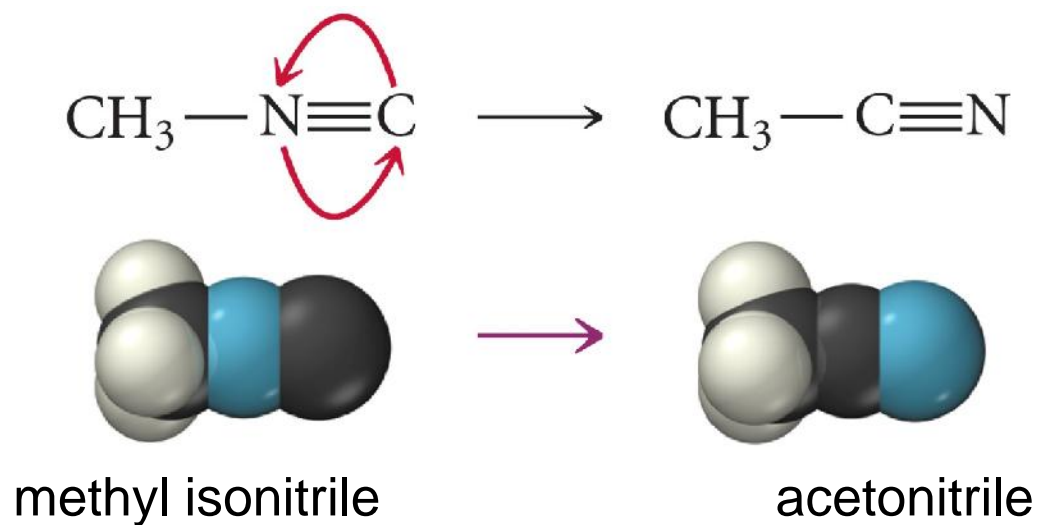


❖ T p ch t ho t hóa

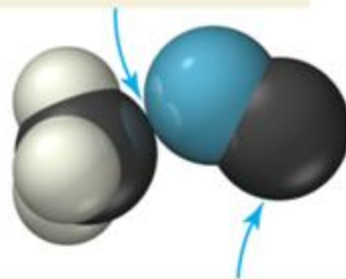
H p ch t trung gian & n ng l ng ho t hóa



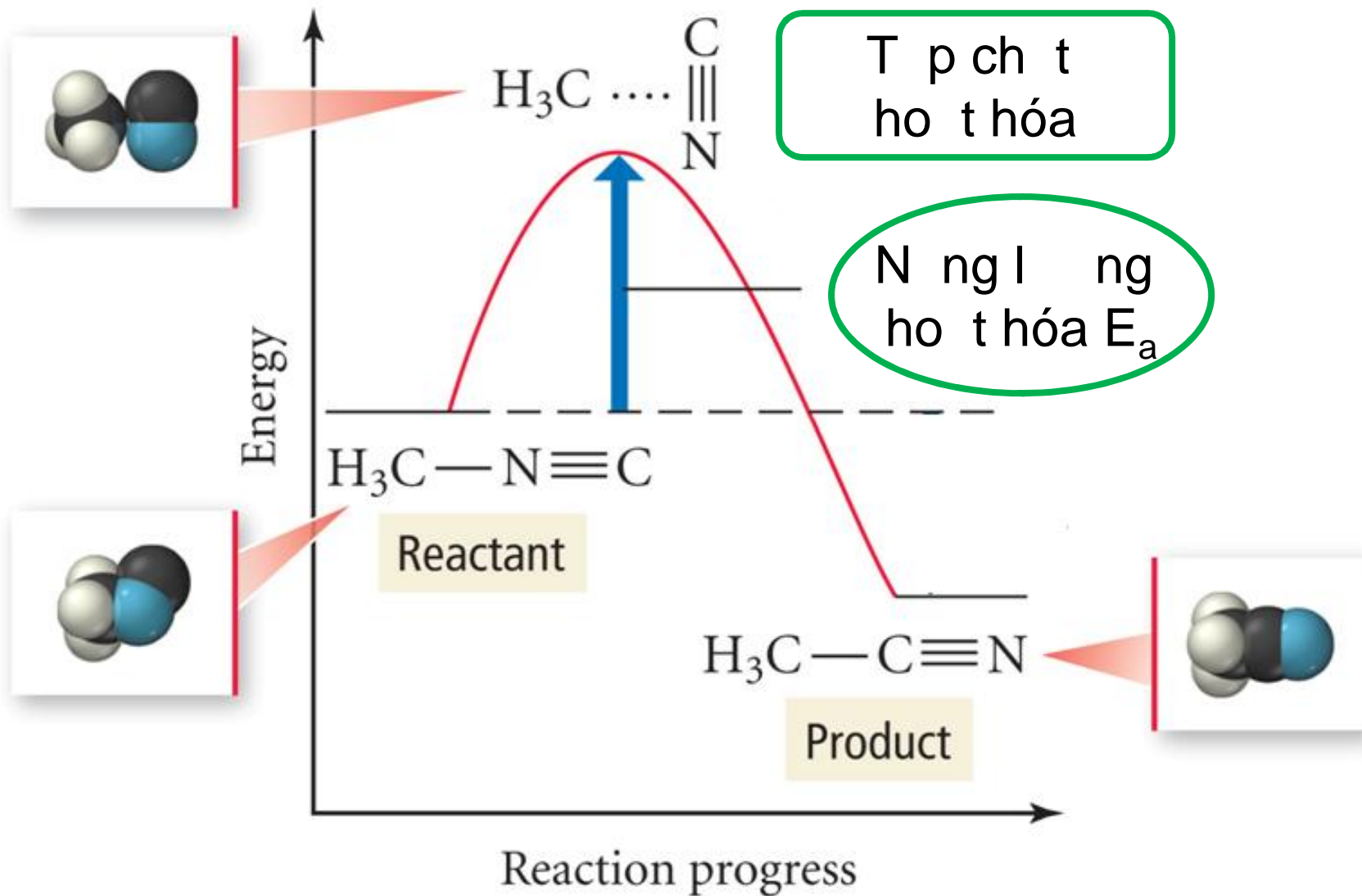
Víd :



Bond weakens

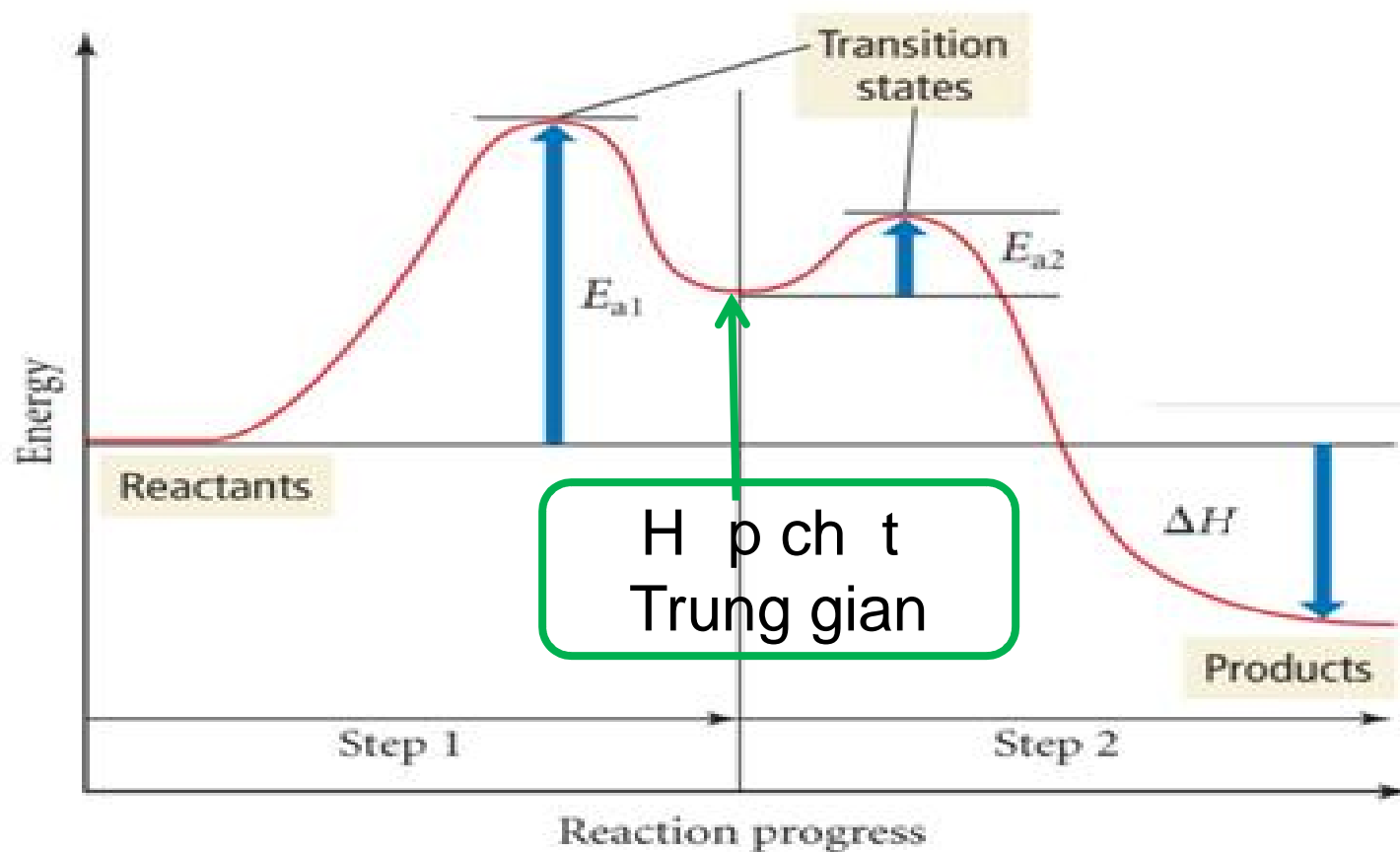


NC group begins to rotate



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.

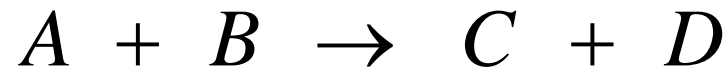


I.2. Phân trình nguyên tố phân nguyên

- ❖ Phân bố không
- ❖ Phân bố m t
- ❖ Phân bố hai

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

❖ 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

$$T = T_2 - T_1$$

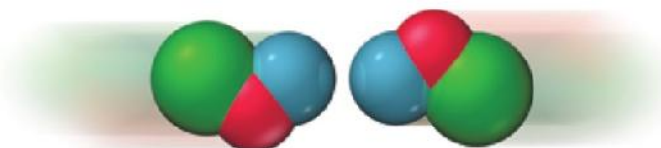
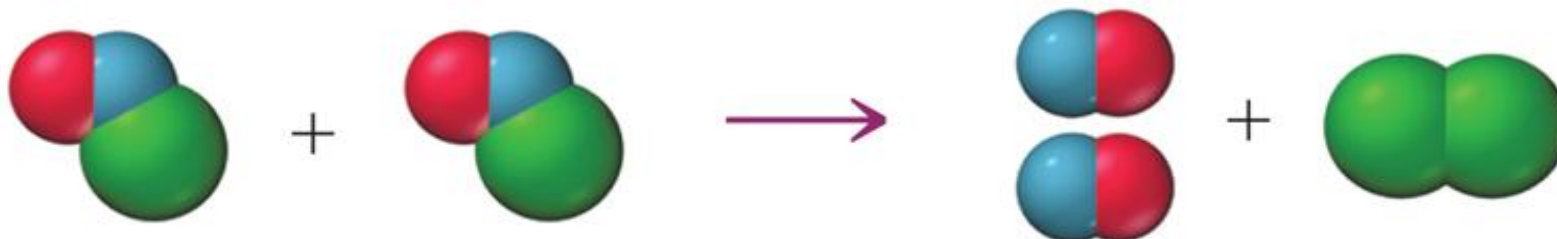
H th c Arrhenius

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

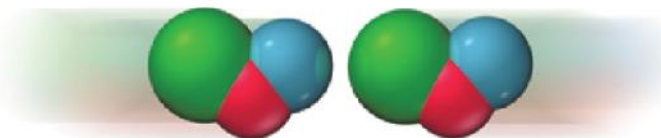
E_a : n ng l ng ho t hóa c a ph n ng

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

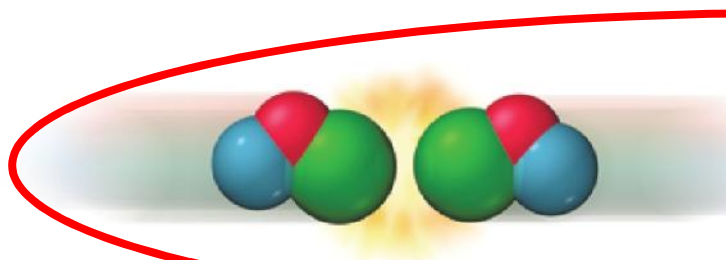
Ví d : Xét ph n ng



Ineffective collision



Ineffective collision



Effective collision

❖ **nh h ng c a xúc tác**

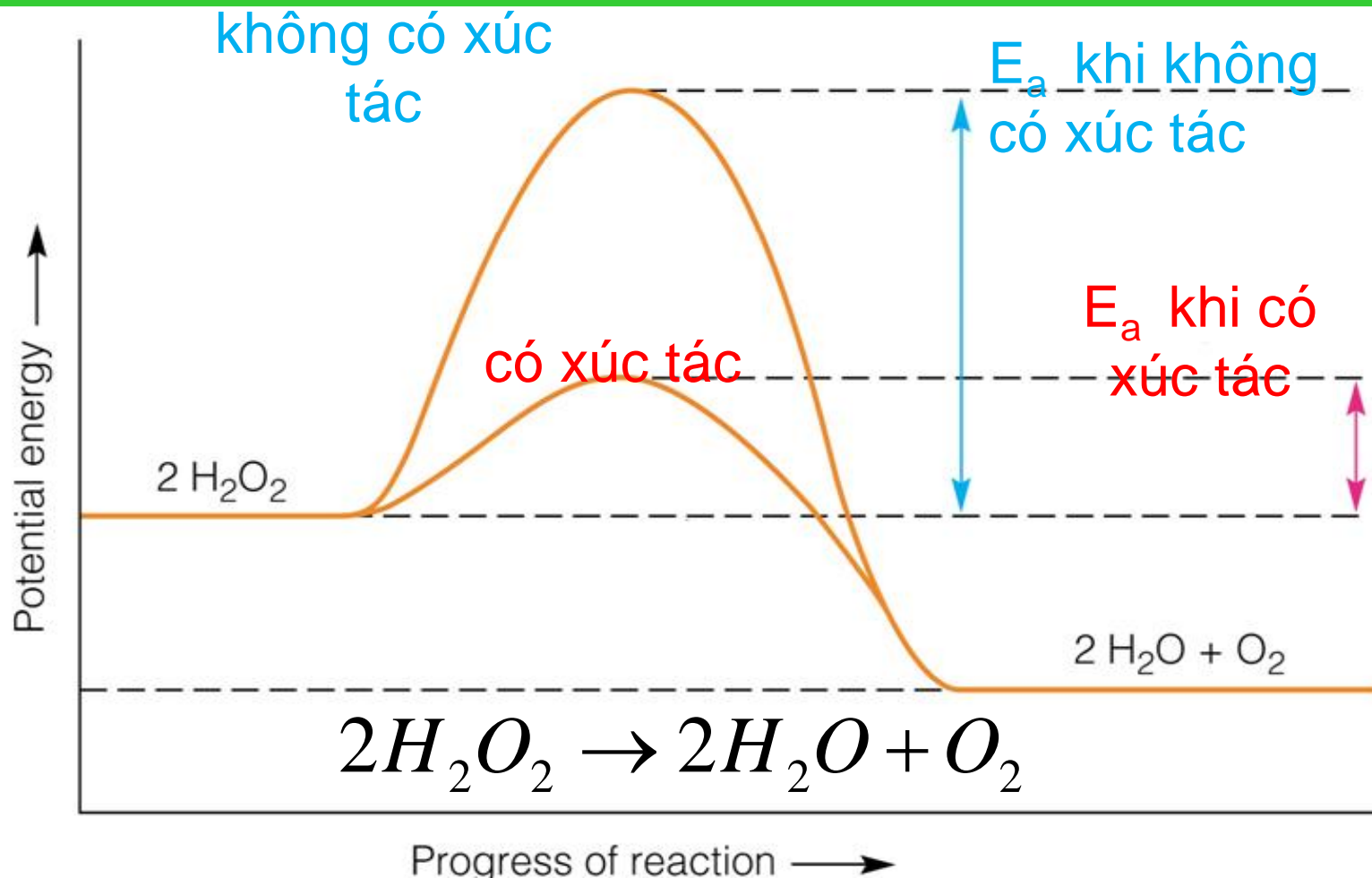
- Ch t xúc tác là nh ng ch t có kh n ng làm t ng v n t c ph n ng.
- Ch t xúc tác tham gia vào ph n ng, nh ng sau ph n ng c ph c h i, **không b bi n i v kh i l ng và ch t l ng**

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 hiệu suất phản ứng

Chất xúc tác làm thay đổi đường đi trong quá trình 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 l n**

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

Ví dụ :

Một phần nghìn kết thúc sau **3h** **20°C**. Nhiệt độ phần nghìn sau **20 phút**, biến thiên nhiệt độ phần nghìn là **3**.

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

Ví dụ :

Khi thể tích n m t ph n ng **20°C** thì h ng s t c c a ph n ng là **k**. Khi t ng nhi t ph n ng lên **30°C** thì h ng s t c ph n ng t ng lên **2 l n**.

Tính n ng l ng ho t hóa (kJ) c a ph n ng.

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: $v_t = v_n$

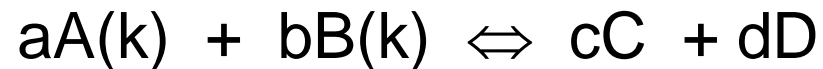
$$\Rightarrow k_t [A]^a [B]^b = k_n [C]^c [D]^d .$$

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

+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



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

Tính hằng số cân bằng



nhiệt không đổi, áp suất cân bằng là 0,6 atm. Tỷ lệ 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

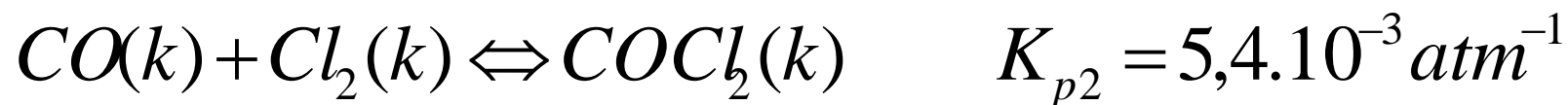
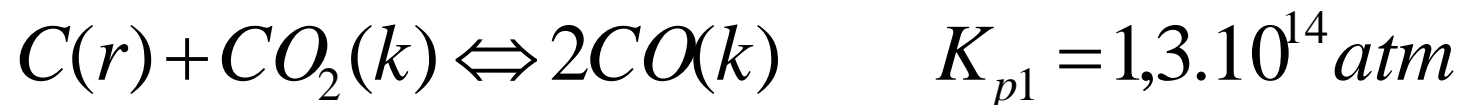
B. 0,5

C. 5

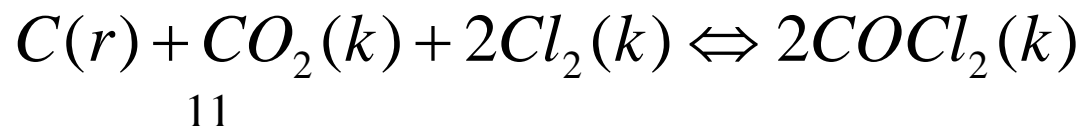
D. 0,05

Tính hằng số cân bằng

Cho các cân bằng ở 850°C



Tính hằng số cân bằng K_p của phản ứng:



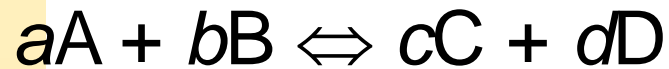
a) $7,54 \cdot 10^{11}$

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



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

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



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



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



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


$$K_2 = K_1^2$$




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

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



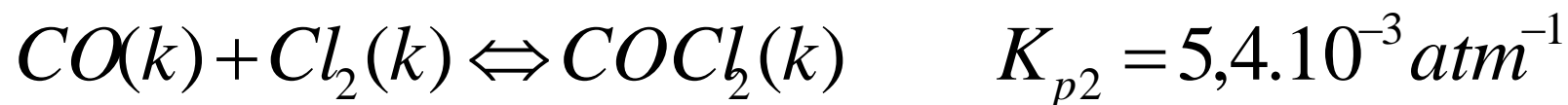
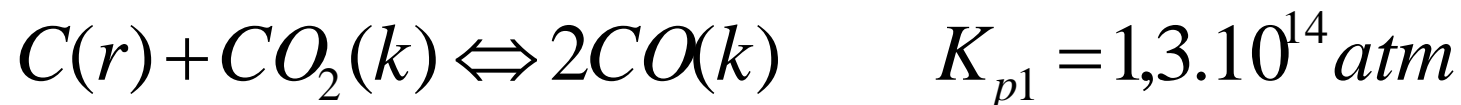
$$K_3 = \frac{[C]^c}{[A]^a}$$

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

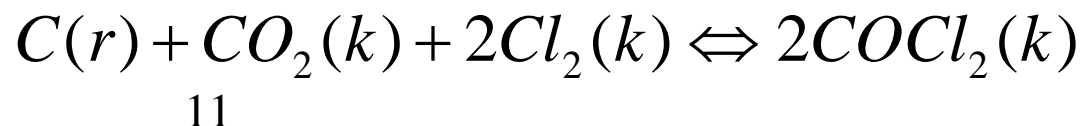

$$K_3 = K_1 \times K_2$$

Tính hằng số cân bằng

Cho các cân bằng ở 850°C



Tính hằng số cân bằng K_p của phản ứng:



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

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

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

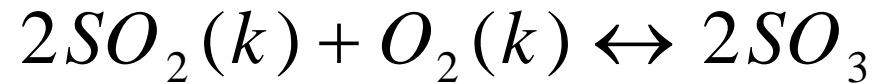
d) $4,37 \cdot 10^{-9}$

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

Nguyên lý Le Chatelier về sự chuyển dịch cân bằng:

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 :

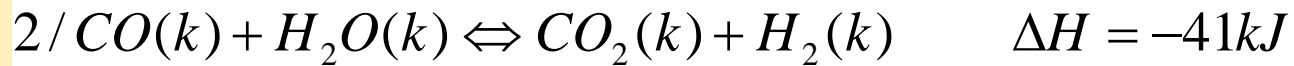
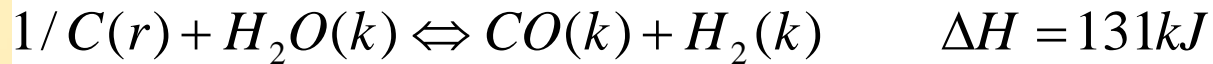


$$\Delta H_{pu}^0 = -198,4kJ$$

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