

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

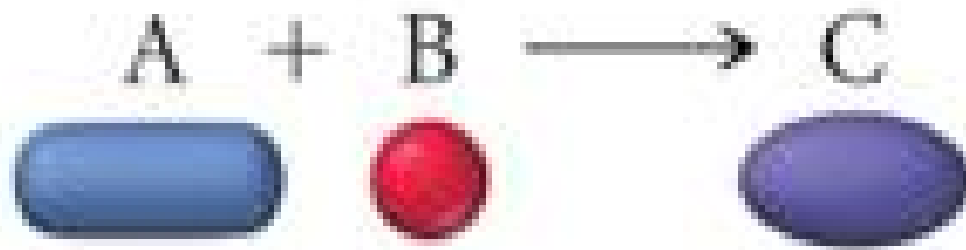
II. CÂN BẰNG HÓA HỌC

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



Tại $t = 0$

$[A] = 8$

$[B] = 8$

$[C] = 0$



Tại $t = 16$

$[A] = 4$

$[B] = 4$

$[C] = 4$

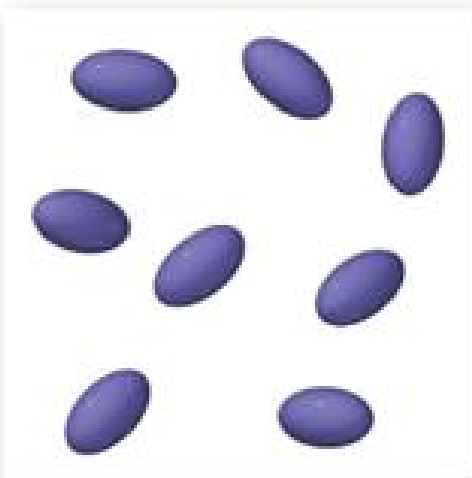


Tại $t = 32$

$[A] = 2$

$[B] = 2$

$[C] = 6$



Tại $t = 48$

$[A] = 0$

$[B] = 0$

$[C] = 8$

❖ Vận tốc phản ứng

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

Vận tốc tức thời tại thời điểm t:

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

❖ 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

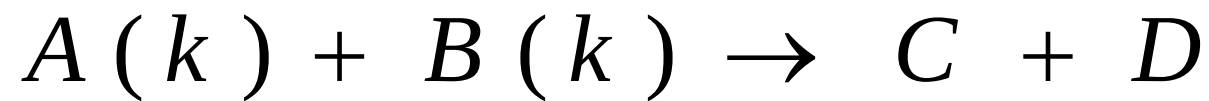
m: bậc phản ứng theo A

n: bậc phản ứng theo B

(m+n): bậc phản ứng tổng quát

Hai **giá trị m,n** được suy ra từ **giá trị thực nghiệm**, có thể mang giá trị dương, âm, là số nguyên hay số thập phân

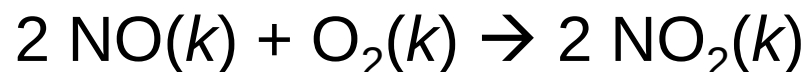
Nếu tác chất tham gia phản ứng là chất khí, thì dùng áp suất các khí để tính vận tốc phản ứng



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

❖ 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*)

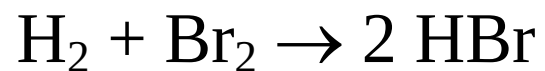
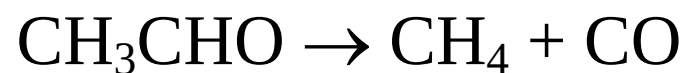


$$v = k[\text{NO}]^2[\text{O}_2]$$

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

Ví dụ:

Phản ứng



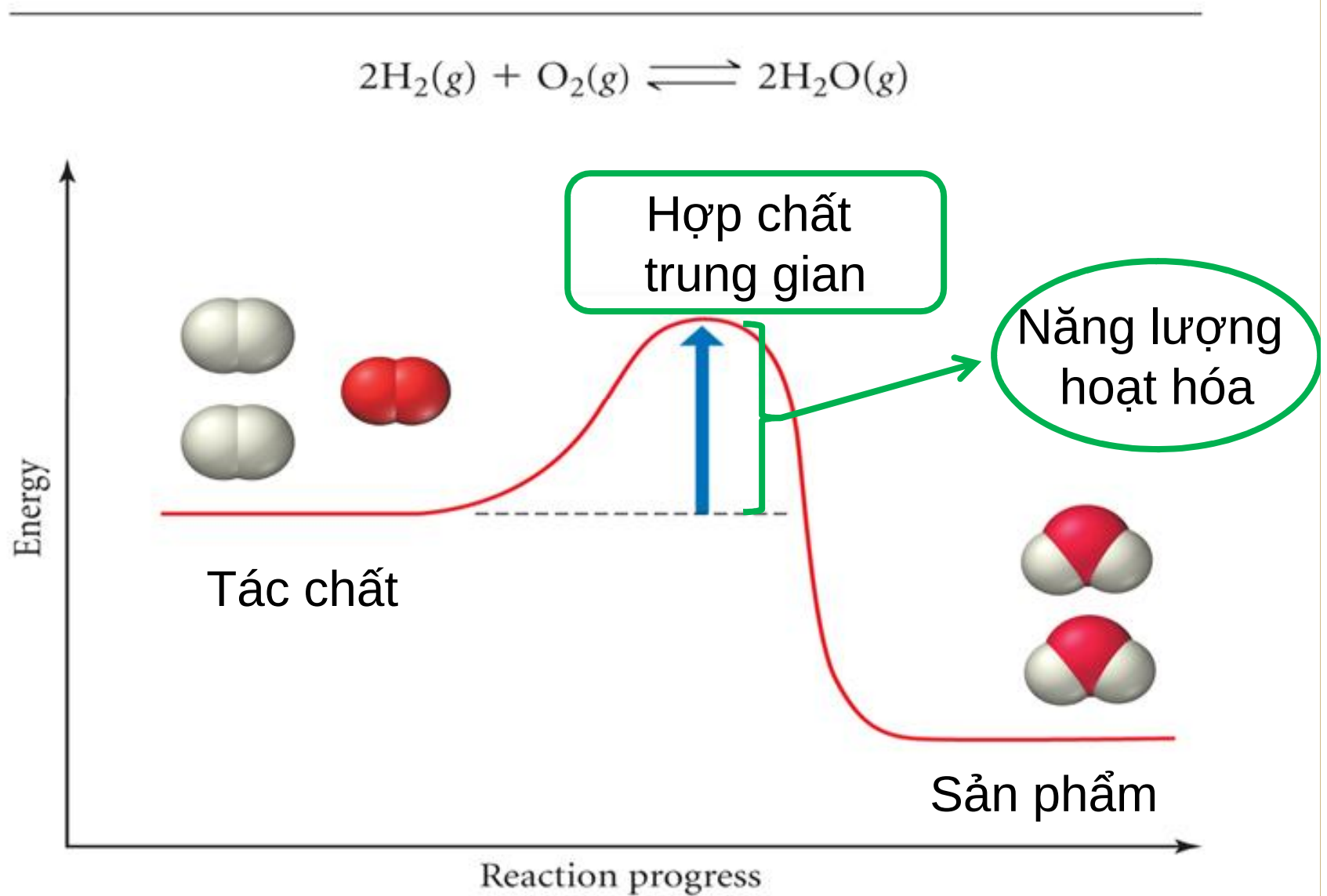
Pt vận tốc

$$v = k[\text{CH}_3\text{CHO}]^{3/2}$$

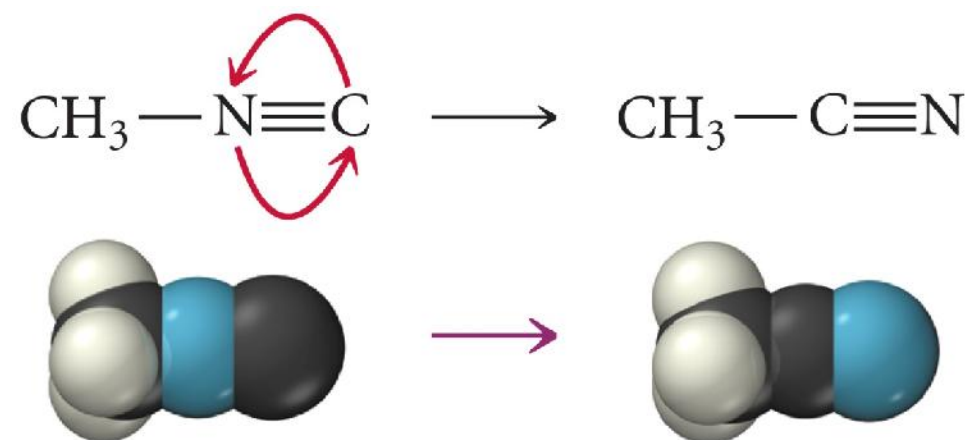
$$v = k[\text{N}_2\text{O}_5]$$

$$v = k[\text{H}_2][\text{Br}_2]^{1/2}$$

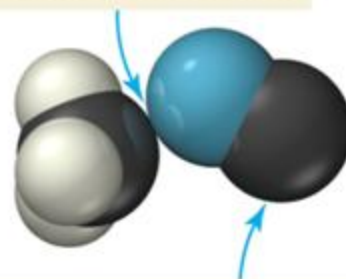
❖ Hợp chất trung gian & năng lượng hoạt hóa



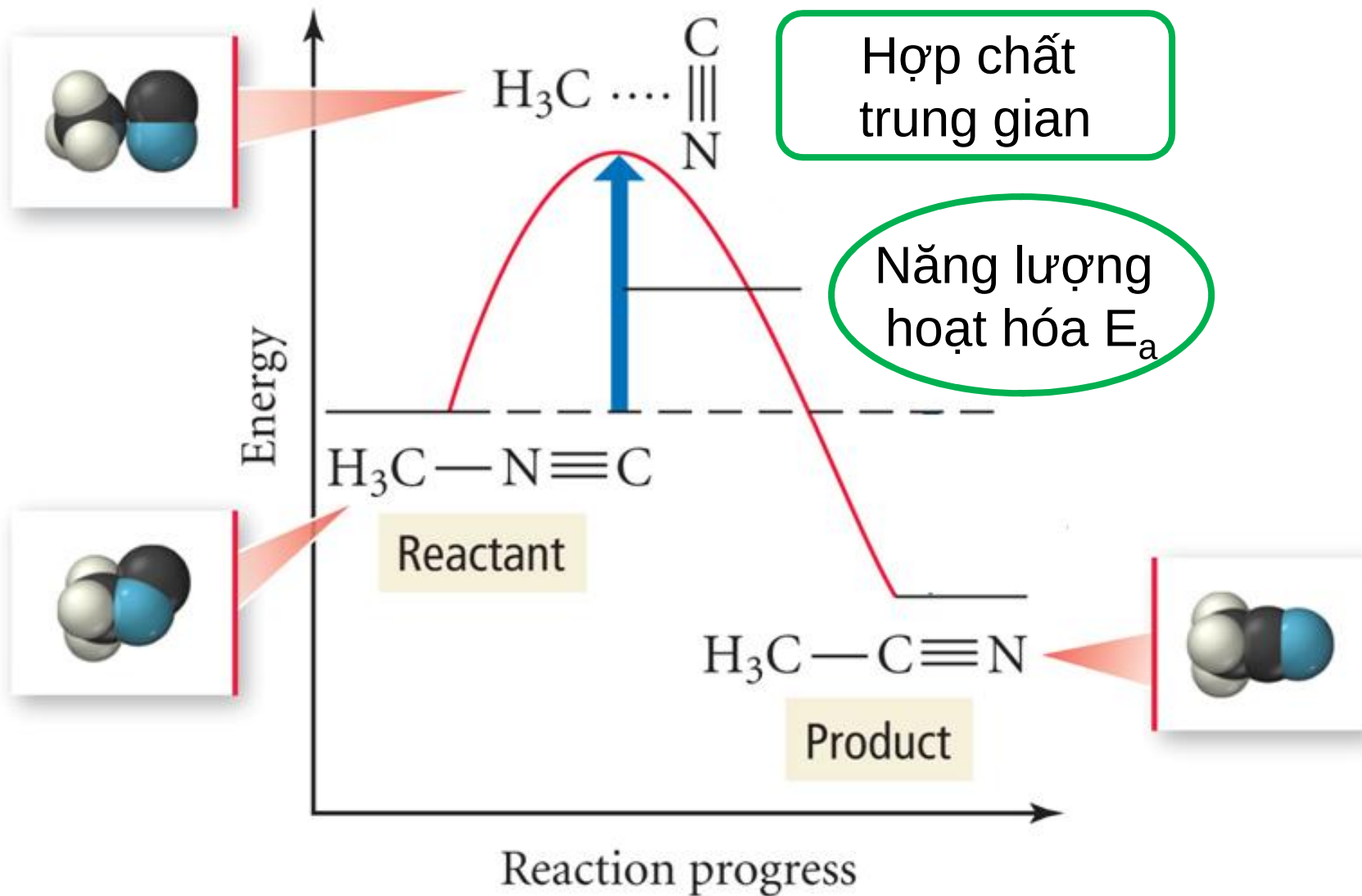
Ví dụ:



Bond weakens



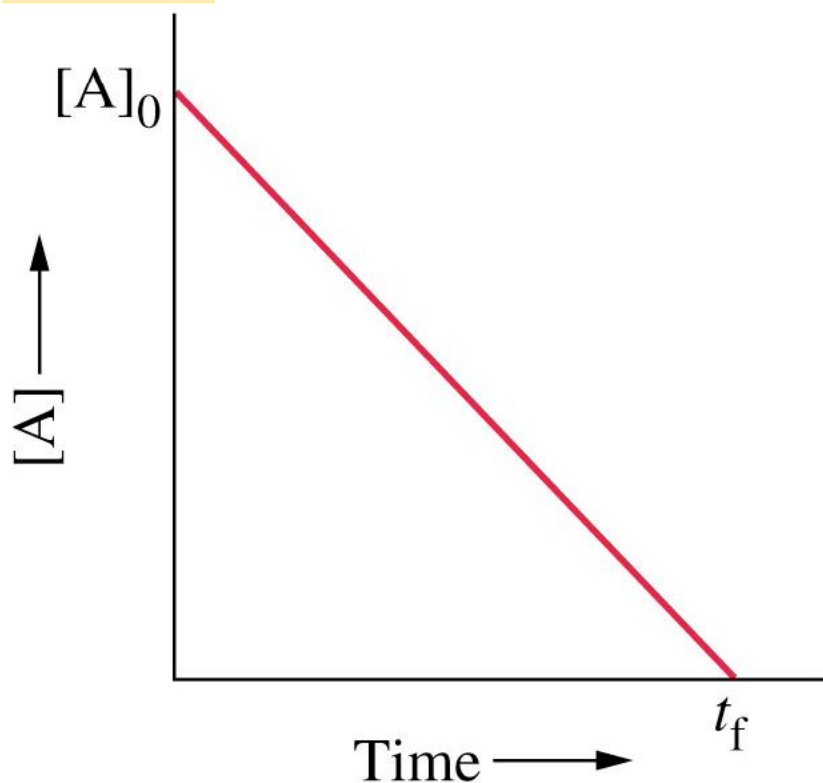
NC group begins to rotate



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

❖ Phản ứng bậc không

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



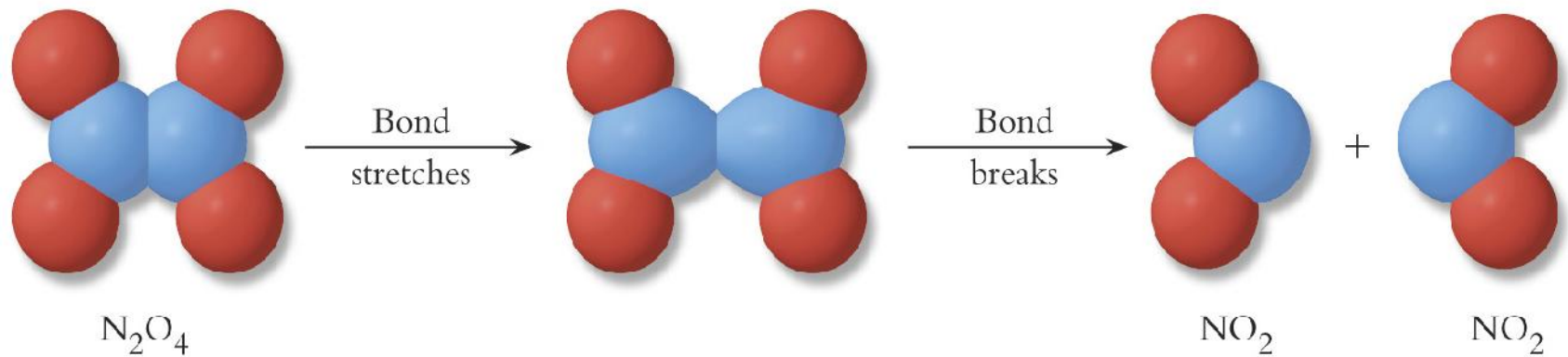
$A \rightarrow$ Sản phẩm

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

❖ Phản ứng bậc một

A → Sản phẩm

$$v = k[A]$$

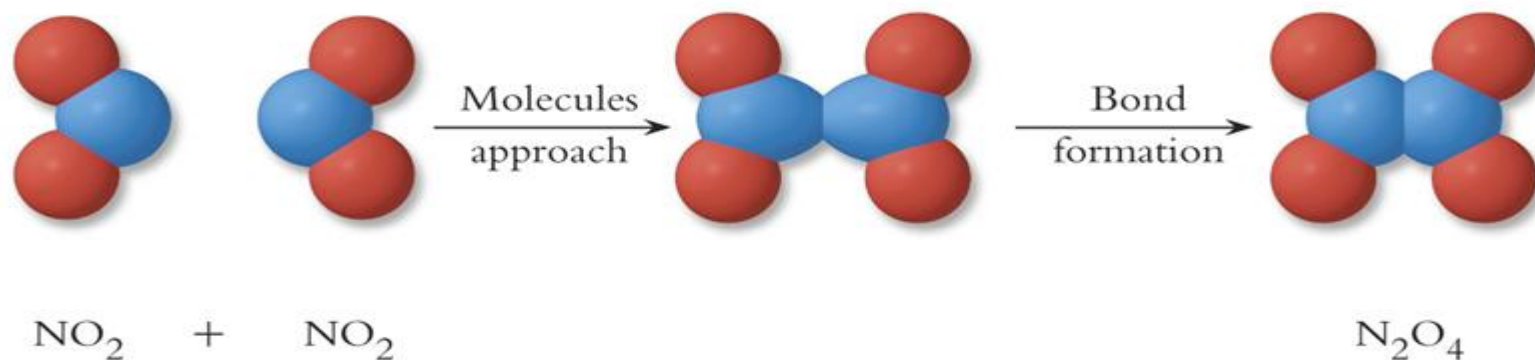


$$v = k [\text{N}_2\text{O}_4]$$

❖ Phản ứng bậc hai



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



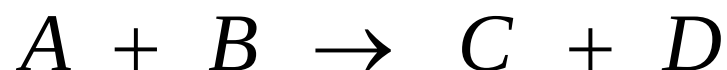
$$v = k [\text{NO}_2]^2$$



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

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

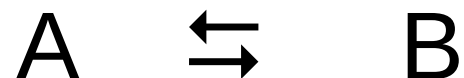
❖ Ảnh hưởng của nồng độ tác chất



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

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

+ Đối với phản ứng thuận nghịch



Theo chiều thuận ($A \rightarrow B$) $v_{th} = k_{th} [A]^m$

Theo chiều nghịch ($B \rightarrow A$) $v_{ng} = k_{ng} [B]^n$

Theo thời gian

- $[A]$ giảm $\rightarrow v_{th}$ giảm $\searrow$
- $[B]$ tăng $\rightarrow v_{ng}$ tăng $\nearrow$

Khi $v_{th} = v_{ng} \rightarrow$ phản ứng đạt **cân bằng**

❖ 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: γ**

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

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

$$\Delta T = T_2 - T_1$$

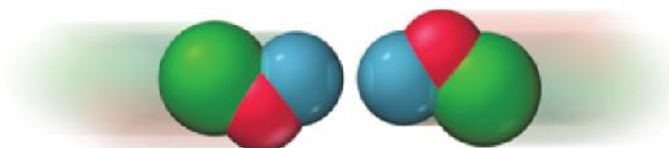
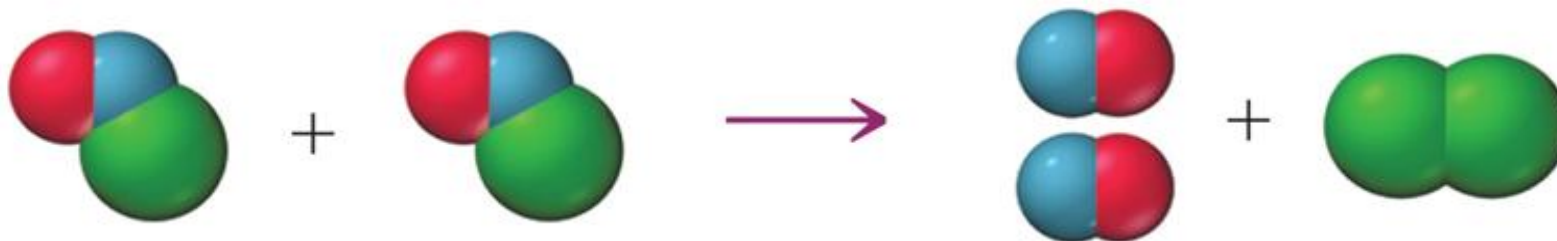
Hệ thức Arrhenius

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

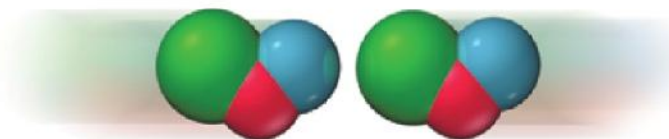
E_a : năng lượng hoạt hóa của phản ứng

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

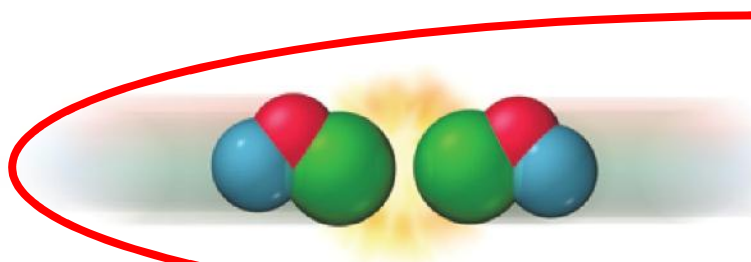
Ví dụ: Xét phản ứng



Ineffective collision



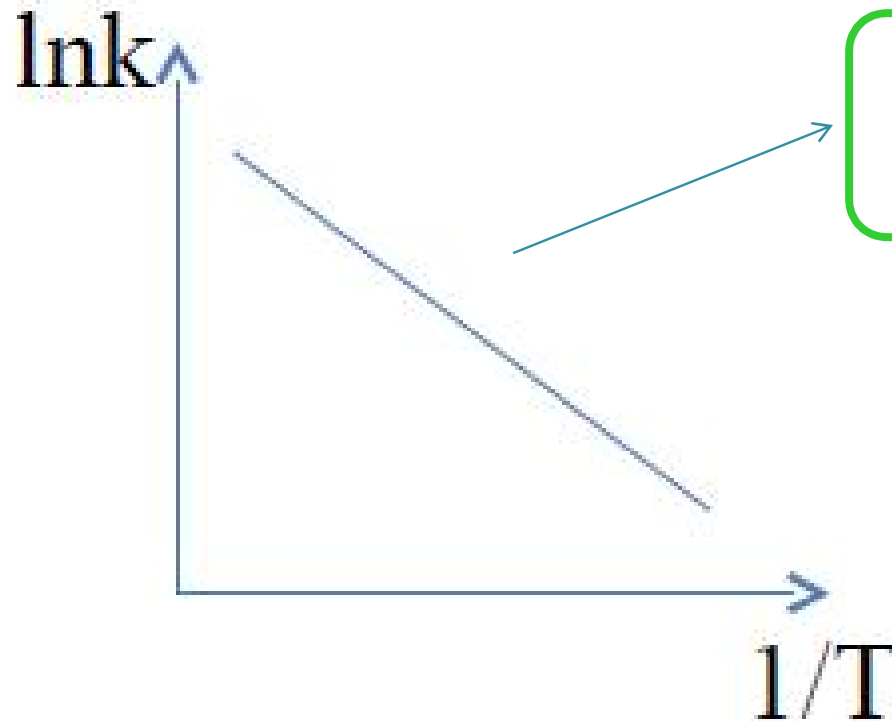
Ineffective collision



Effective collision

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


$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$



Xác định
được A & E_a

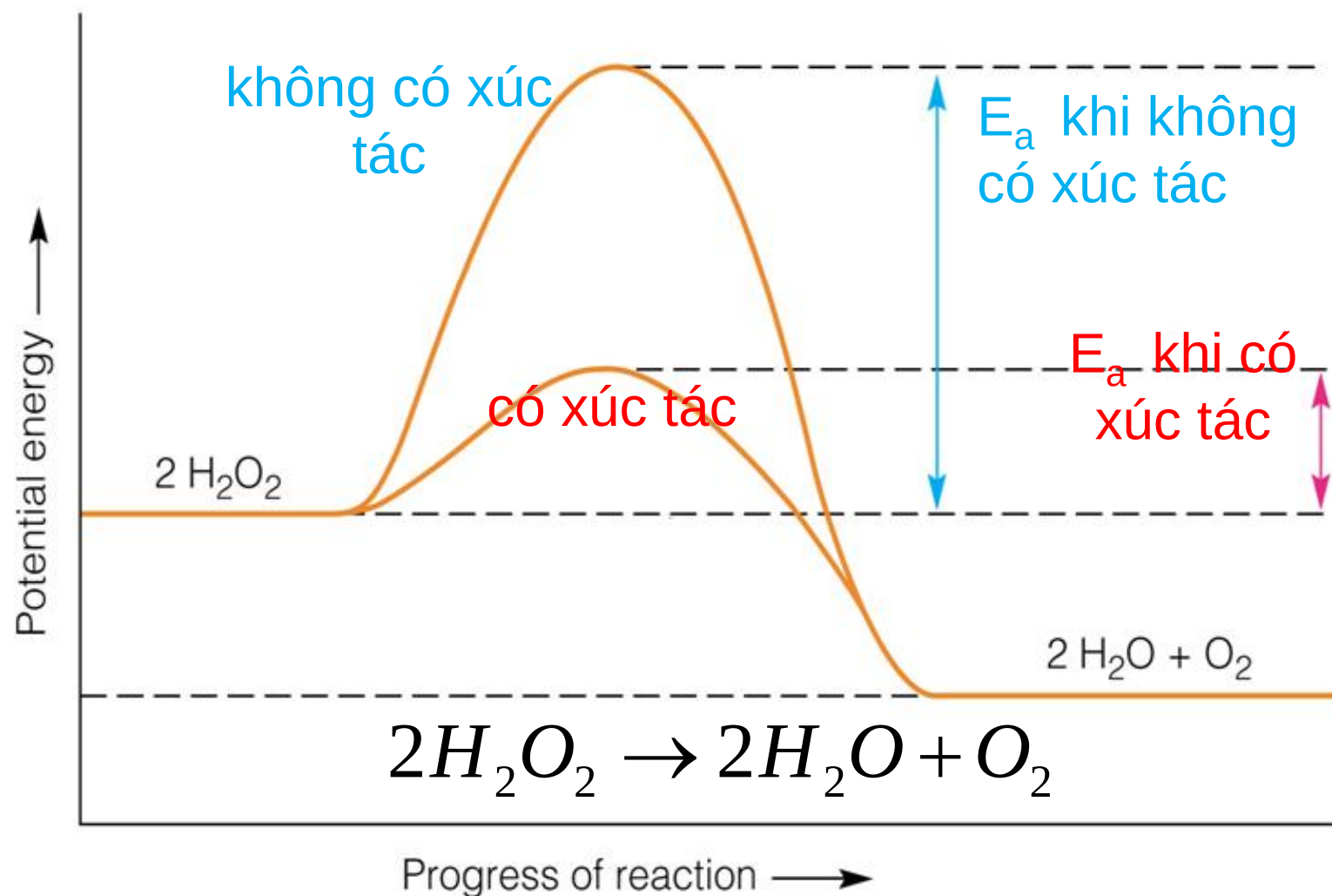
❖ Ảnh hưởng của xúc tác

- 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 mức độ cân bằng của phản ứng thuận nghịch
- ❖ 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:

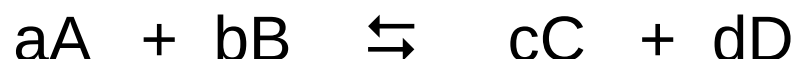
Khi thực hiện một phản ứng ở **20°C** thì hằng số tốc độ của phản ứng là **k**. Khi tăng nhiệt độ phản ứng lên **30°C** thì hằng số tốc độ phản ứng tăng lên **2 lần**.

Tính năng lượng hoạt hóa của phản ứng.

II. CÂN BẰNG HÓA HỌC

II.1. Hằng số cân bằng

Xét phản ứng (đơn giản) thuận nghịch



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

Ở trạng thái cân bằng: $v_t = v_n$

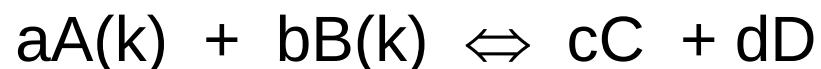
$$\Rightarrow k_t [A]^a [B]^b = k_n [C]^c [D]^d .$$

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

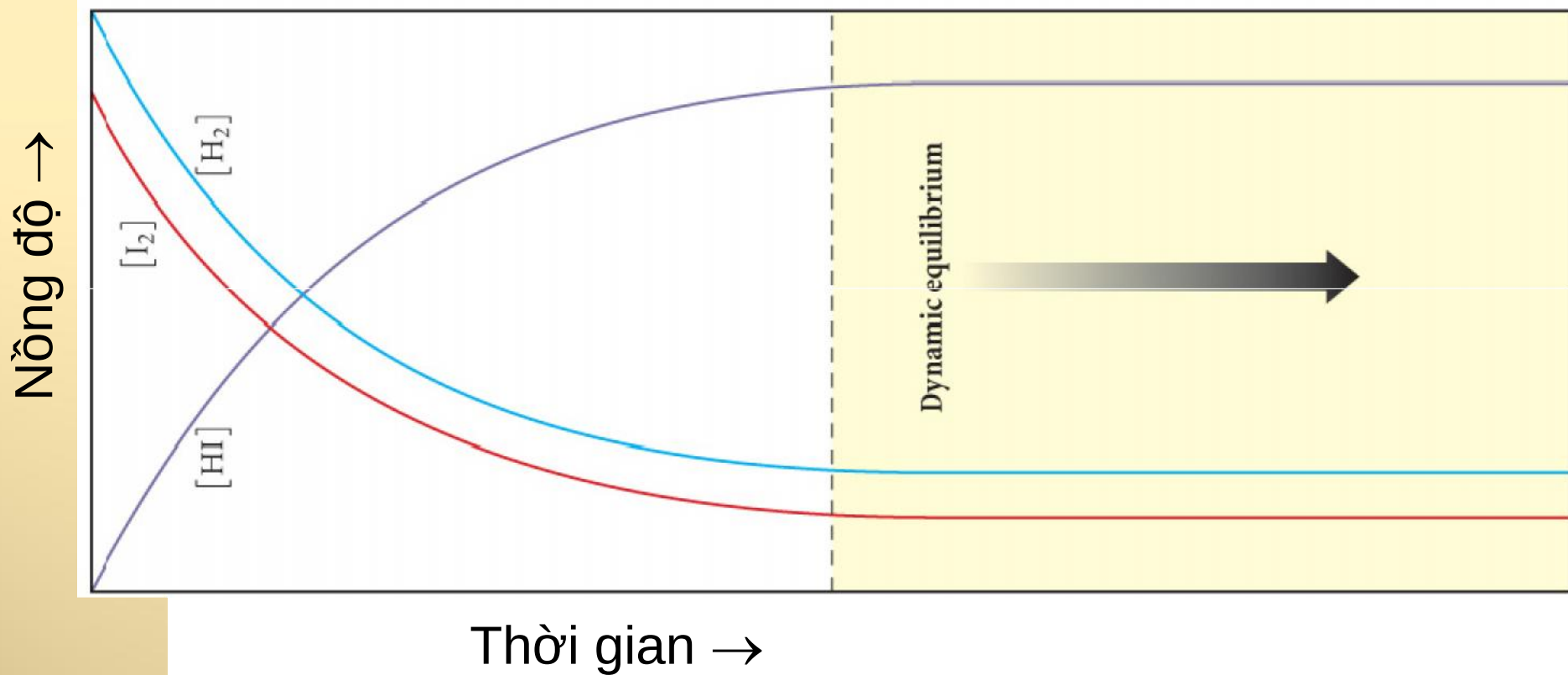
+Nếu phản ứng trong dung dịch

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

+Nếu hỗn hợp phản ứng là chất khí



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



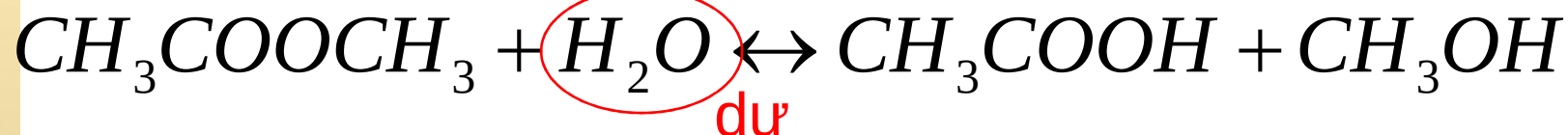
Cách viết biểu thức hằng số cân bằng



$$K_P = P_{CO_2}$$

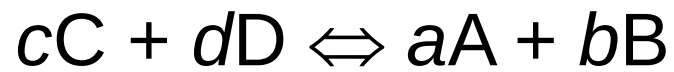


$$K_P = P_{NH_3} \cdot P_{HCl}$$



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

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



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

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


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



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



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


$$K_2 = K_1^2$$



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

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

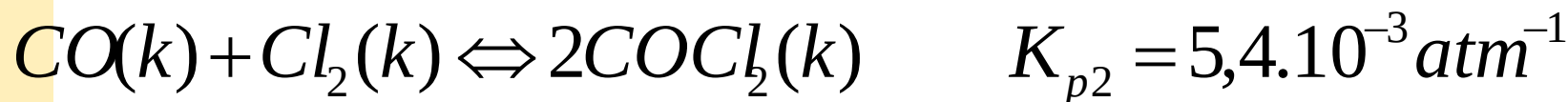
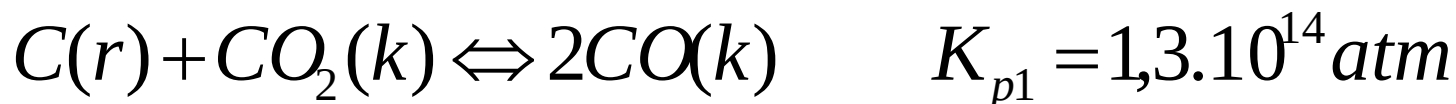


$$K_3 = \frac{[C]^c}{[A]^a}$$

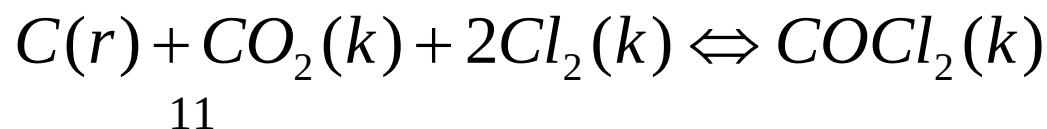
$$= \frac{[B]^b}{[A]^a} \times \frac{[C]^c}{[B]^b}$$

 $K_3 = K_1 \times K_2$

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) $3,79 \cdot 10^9$

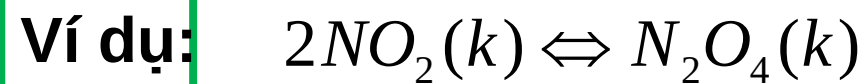
c) $7,54 \cdot 10^{-11}$

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

Sự liên hệ giữa ΔG^0 và K

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

- Nếu $K > 1$ thì $\Delta G^0 < 0 \rightarrow$ phản ứng diễn ra theo chiều thuận
- Nếu $K < 1$ thì $\Delta G^0 > 0 \rightarrow$ phản ứng diễn ra theo chiều nghịch
- Nếu $K = 0$ thì $\Delta G^0 = 0 \rightarrow$ hệ đạt trạng thái cân bằng



Có ΔH và ΔS lần lượt là -57,4Kcal và -176,74 cal.độ⁻¹

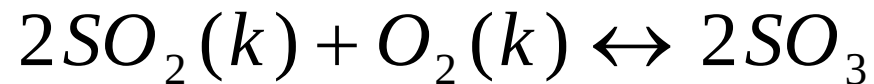
- a. Tính nhiệt độ ở trạng thái cân bằng
- b. Tính giá trị hằng số cân bằng ở 25°C

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:

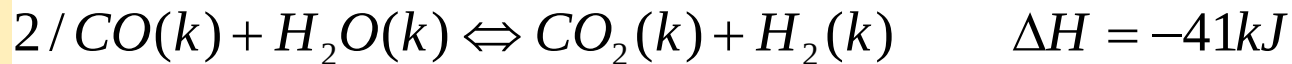
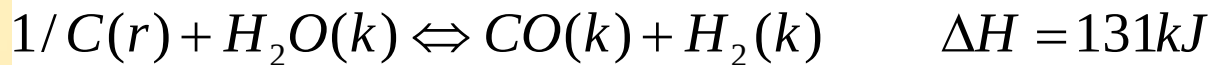


$$\Delta H_{pu}^0 = -198,4kJ$$

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*