

Chương II. **ĐỘNG HÓA HỌC**

I. CÁC KHÁI NIỆM CƠ BẢN

II. CÁC YẾU TỐ ẢNH HƯỞNG TỚI TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG

I. CÁC KHÁI NIỆM CƠ BẢN

1. Khái niệm về động hóa học.
2. Một số khái niệm về phản ứng hóa học.

II. CÁC YẾU TỐ ẢNH HƯỞNG TỚI TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG

1. Ảnh hưởng của nồng độ chất phản ứng
2. Ảnh hưởng của nhiệt độ
3. Ảnh hưởng của xúc tác

1. Khái niệm về động hóa học.

■ Nhiệt động hóa học

- ✓ Khảo sát quá trình ở trạng thái đầu và trạng thái cuối
- ✓ Điều kiện để pư diễn ra: ΔH , ΔS , ΔG
- ✓ Mức độ diễn ra của quá trình: K

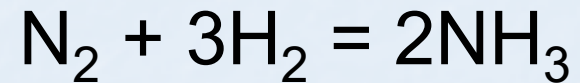
■ Động hóa học

- ✓ Phản ứng diễn ra nhanh hay chậm: tốc độ phản ứng
- ✓ Giai đoạn trung gian : cơ chế phản ứng
- ✓ Các yếu tố ảnh hưởng tới tốc độ phản ứng



2. Một số khái niệm về phản ứng hóa học.

a. Hệ số tỷ lệ:



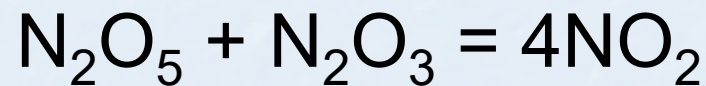
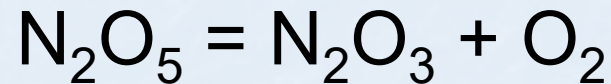
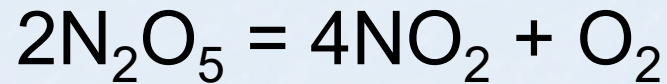
b. Phản ứng đơn giản và phản ứng phức tạp.

c. Phân tử số và bậc phản ứng.

d. Phản ứng đồng thể và phản ứng dị thể.

e. Tốc độ pư.

b. Phản ứng đơn giản và phản ứng phức tạp.



Mỗi giai đoạn - một *tác dụng đơn giản*.

Σ tác dụng đơn giản: *cơ chế của pư.*



c. Phân tử số và bậc phản ứng.

➤ *Phân tử số* : số phân tử tham gia vào một tác dụng đơn giản (nguyên dương)

➤ *Bậc phản ứng* = $(n + m)$ (có thể = 0, lẻ)

$$v = kC_A^n C_B^m$$

✓ Phản ứng đơn giản:

bậc phản ứng = phân tử số.

✓ Phản ứng phức tạp:

bậc phản ứng \neq phân tử số.

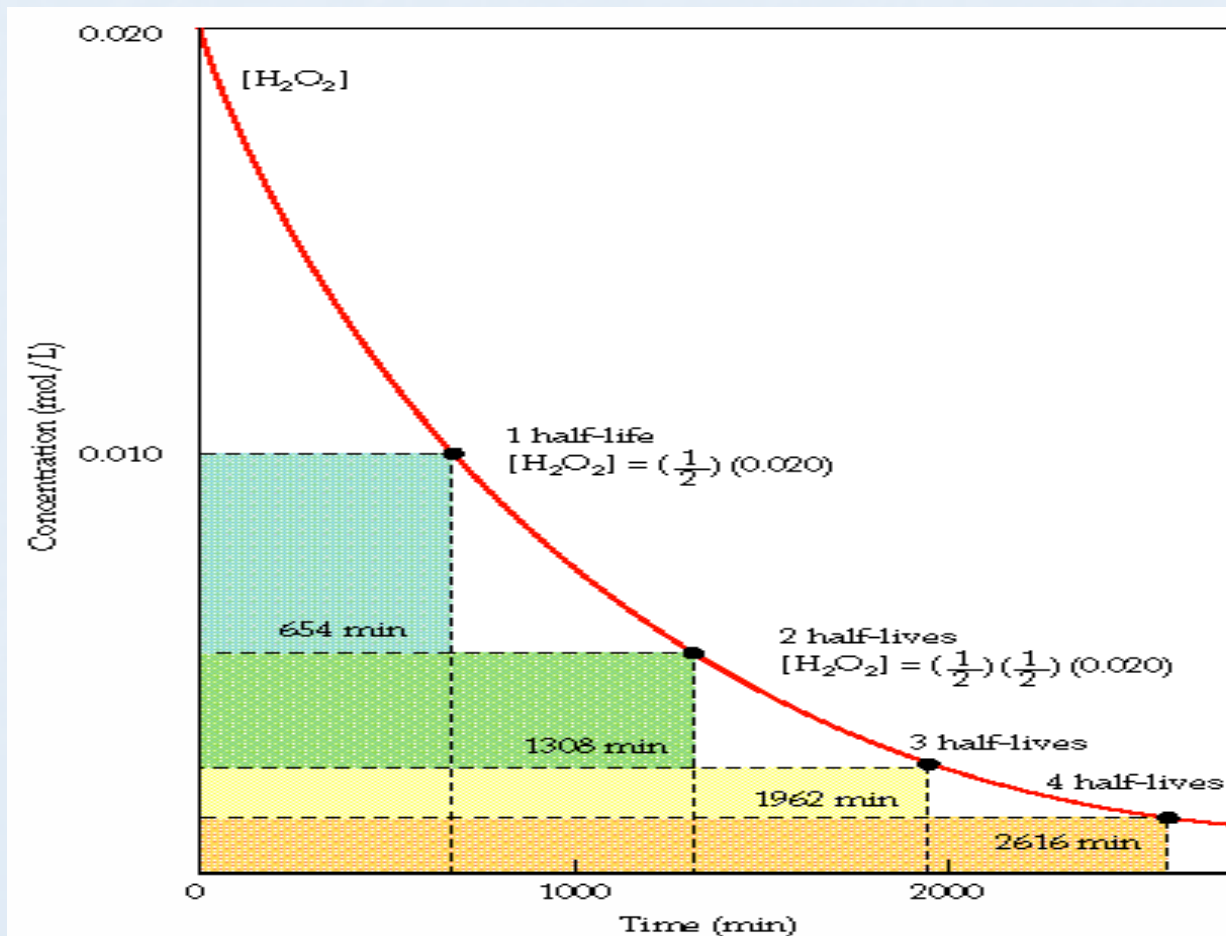


e. Tốc độ pư:

- Tốc độ trung bình :
- Tốc độ tức thời :

$$\bar{v} = \pm \frac{\Delta C}{\Delta t}$$

$$v = \pm \frac{dC}{dt}$$



1. Ảnh hưởng của nồng độ chất phản ứng tới tốc độ phản ứng.

- a. Định luật tác dụng khối lượng.
- b. Hằng số tốc độ k .
- c. Năng lượng hoạt hóa E^*
- d. Entropi hoạt hóa S^* .

a. Định luật tác dụng khối lượng.

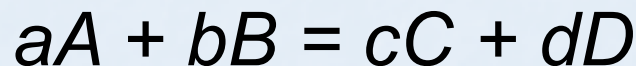
➤ Động hóa học:

✓ Số va chạm $\uparrow \rightarrow v \uparrow$

✓ Số va chạm $\uparrow \leftrightarrow$ số phân tử $\uparrow \leftrightarrow C \uparrow$

$\rightarrow v \sim C$

➤ ***Định luật tác dụng khối lượng:***



$$v = kC_A^n C_B^m$$



b. Hằng số tốc độ k.

➤ Ý nghĩa vật lý:

$$v = k C_A^n C_B^m$$

Khi $C_A = C_B = 1 \text{ mol/l}$

$$v = k$$

➤ Biểu thức tính:

$$k = \alpha \cdot e^{-\frac{E^*}{RT}}$$

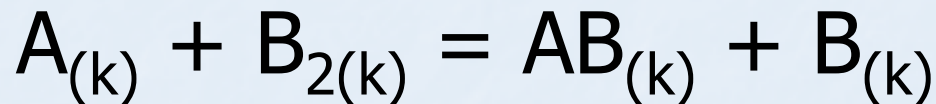
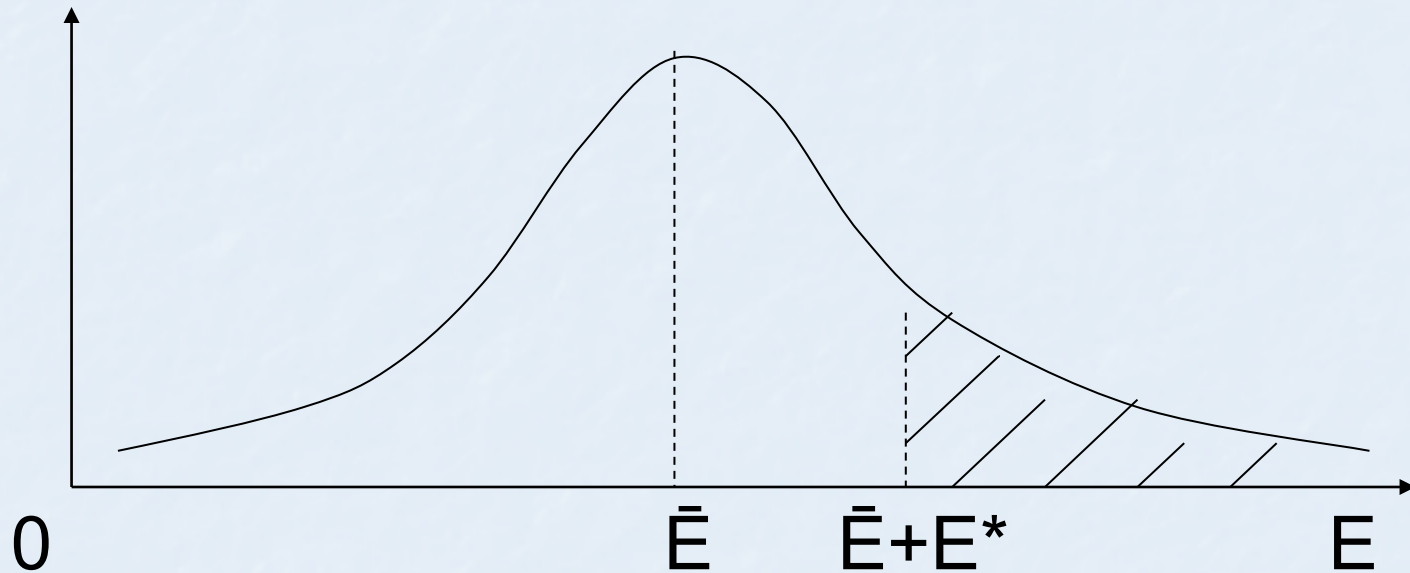
$$\alpha = Z e^{\frac{S^*}{R}}$$

$$k = Z e^{-\frac{E^*}{RT}} e^{\frac{S^*}{R}}$$

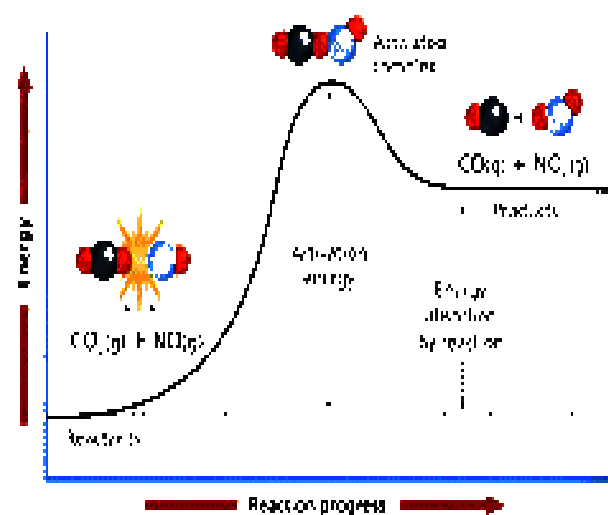
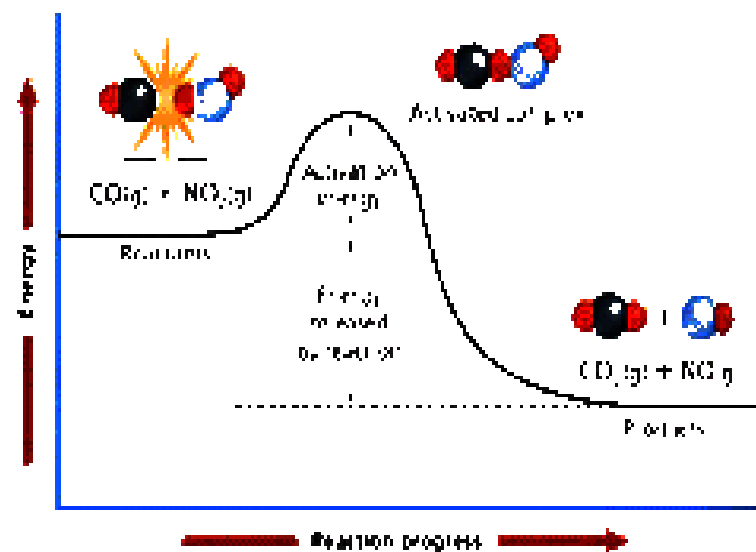
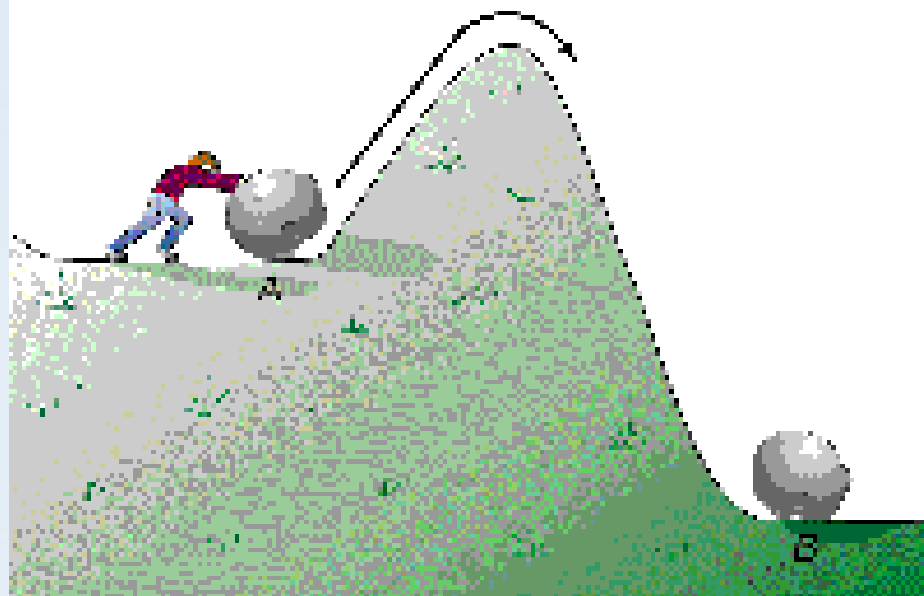
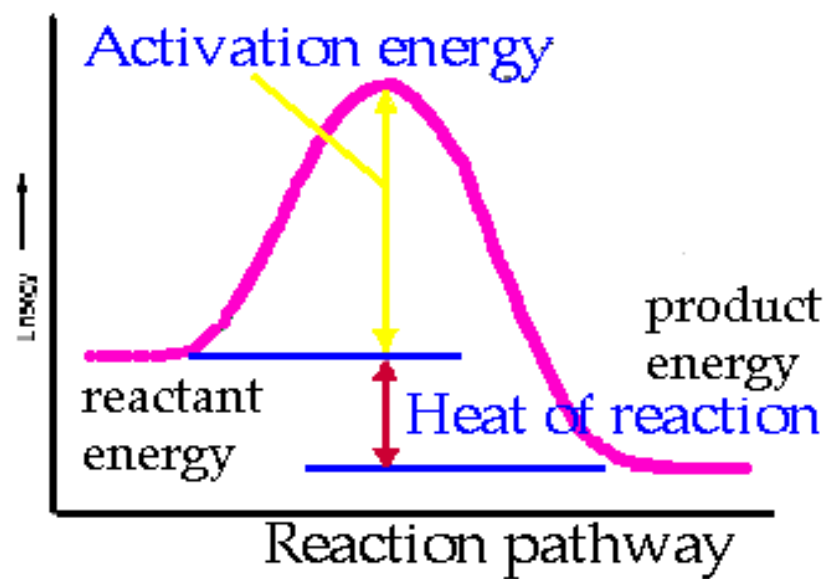


c. Năng lượng hoạt hóa E^*

- Không phải mọi va chạm đều tạo thành SP.
- Tiểu phân: $E \geq \bar{E} + \Delta E_{\min}$ - tiểu phân hoạt động



$E^* \downarrow \rightarrow$ số tiểu phân hoạt động $\uparrow \rightarrow v \uparrow$.



d. Entropi hoạt hóa S^* .

$$S^* = R \ln \frac{\text{số định hướng có hiệu quả}}{\text{tổng số cách định hướng}}$$

$$S^* = R \ln W$$



2. Ảnh hưởng của nhiệt độ tới tốc độ phản ứng.

a. Quy tắc Van't Hoff

$$\gamma = \frac{k_{T+10}}{k_T} = 2 \div 4$$

$$\gamma^n = \frac{k_{T+10n}}{k_T}$$

b. Giải thích sự phụ thuộc của tốc độ

phản ứng vào nhiệt độ.

b. Giải thích sự phụ thuộc của v vào T .

➤ $T \uparrow \rightarrow$ CĐ nhiệt $\uparrow \rightarrow$ số va chạm $\uparrow \rightarrow v \uparrow$

Ví dụ: khi nhiệt độ tăng từ 27°C lên 37°C

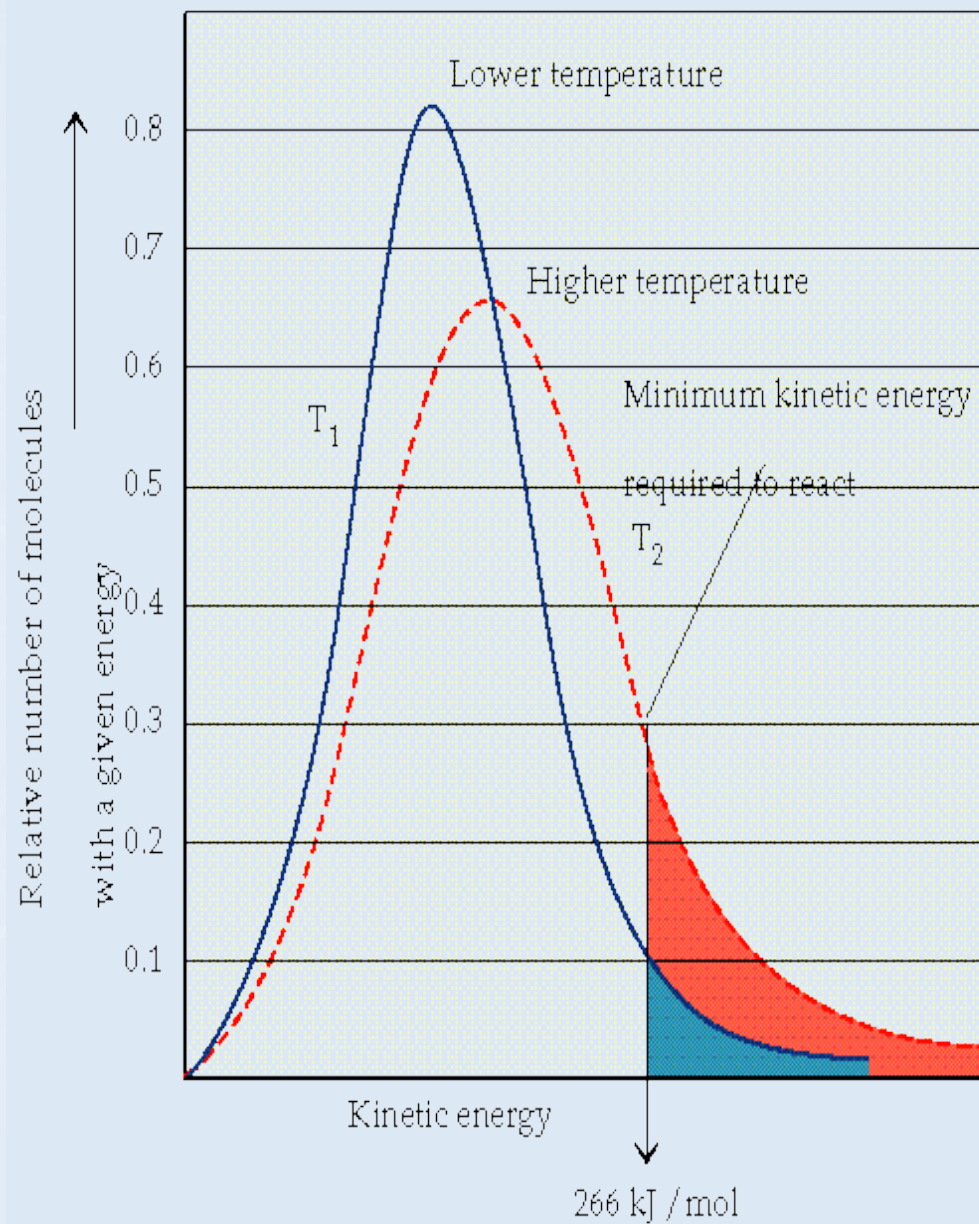
+ Nhiệt độ Kenvin tăng 3,3%

+ Động năng trung bình sẽ tăng 3,3%.

+ $E = \frac{1}{2}mv^2$ tăng 3,3% $\rightarrow v$ tăng 1,8%

➤ Định luật Boltzmann: $\frac{N'}{N_0} = e^{-\frac{E^*}{RT}}$

\rightarrow Khi $T \uparrow \rightarrow$ số tiểu phân hoạt động $\uparrow\uparrow \rightarrow v \uparrow\uparrow$.



3. Ảnh hưởng của xúc tác tới tốc độ phản ứng.

- a. Khái niệm về xúc tác và quá trình xúc tác.
- b. Cơ chế của quá trình xúc tác.

a. Khái niệm về xúc tác và qtrình xúc tác.

- Sự xúc tác:
- Chất xúc tác
- Hệ xúc tác đồng thể, dị thể
- Đặc điểm chung của quá trình xúc tác:
 - không làm thay đổi các đặc trưng NĐ của hệ.
 - không làm thay đổi cân bằng của phản ứng
 - Sự xúc tác có tính chọn lọc:



b. Cơ chế của quá trình xúc tác:

Chất xúc tác có tác dụng làm giảm E^ : thay đổi cơ chế pư \rightarrow thay đổi tốc độ pư.*

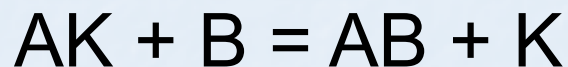
Cơ chế xúc tác đồng thể: thuyết hợp chất trung gian:



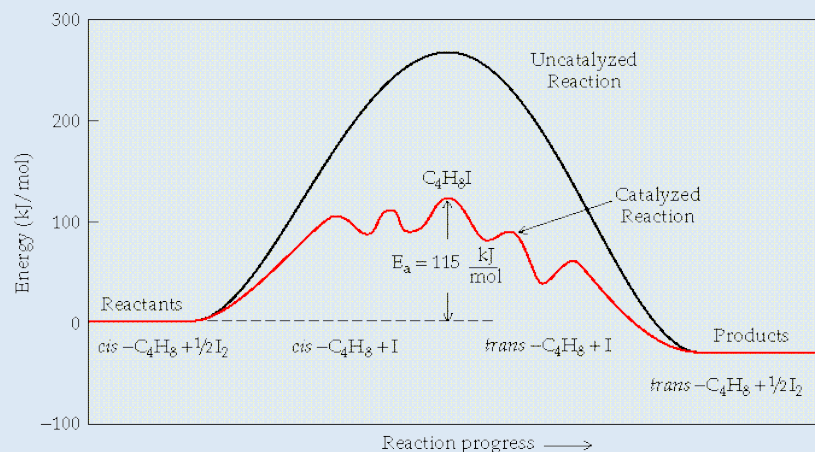
chậm



nhanh



nhanh



Cơ chế xúc tác dị thể: thuyết hấp phụ

