

# 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 phe diễn ra:  $\Delta H$ ,  $\Delta S$ ,  $\Delta G$

✓ 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 lượng:  $N_2 + 3H_2 = 2NH_3$
- 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 phản ứng.

## 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)

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

✓ Phản ứng đơn giản:

bậc phản ứng = phân tử số.

✓ Phản ứng phức tạp:

bậc phản ứng  $\neq$  phân tử số.



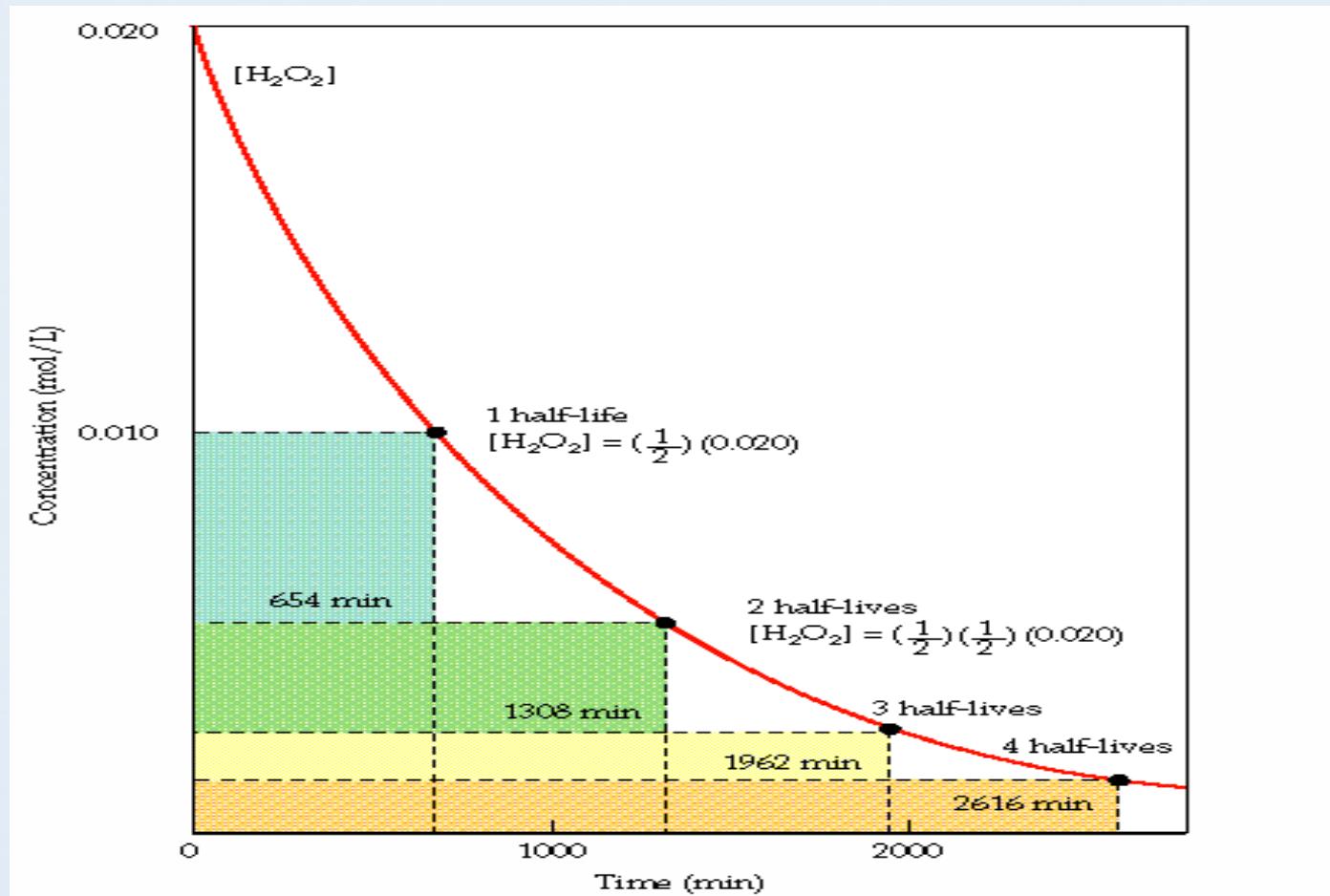
## e. Tốc độ pυ:

- Tốc độ trung bình :

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

- Tốc độ tức thời :

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



# 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:**

$$aA + bB = cC + dD$$

$$\nu = k C_A^n C_B^m$$



## 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:

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

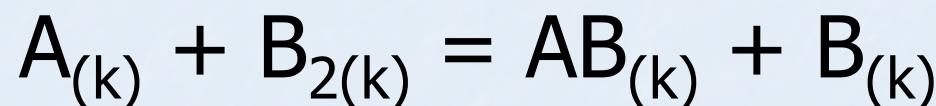
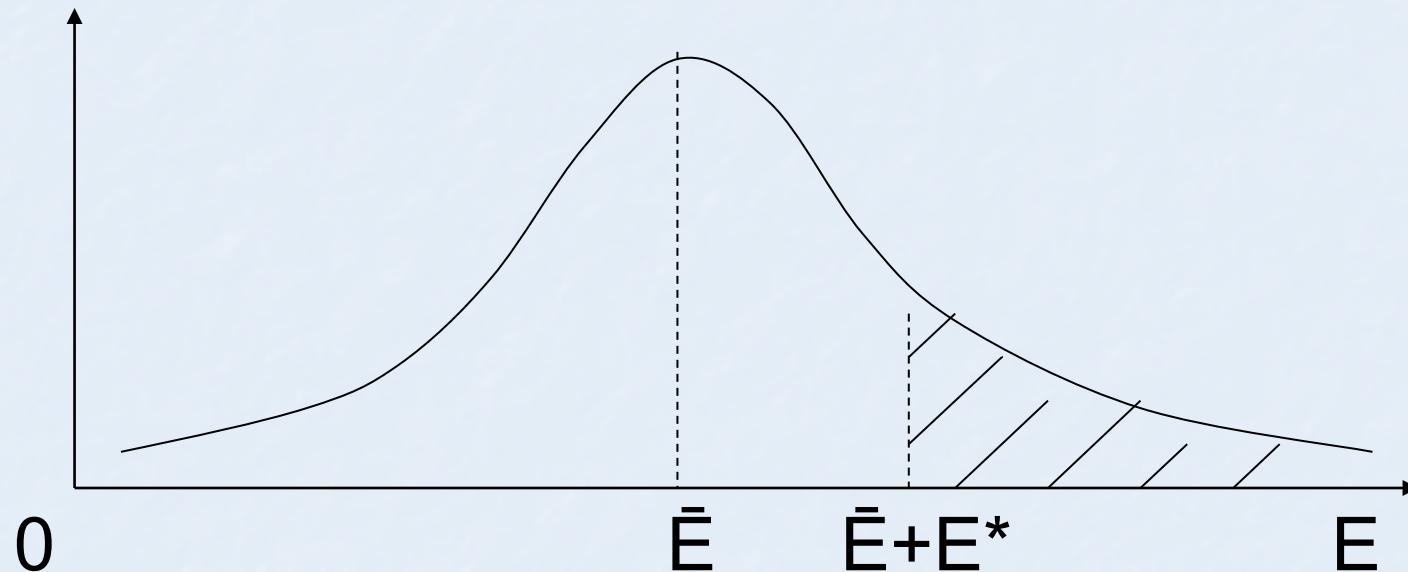
$$\alpha = Ze^{\frac{-S^*}{R}}$$

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

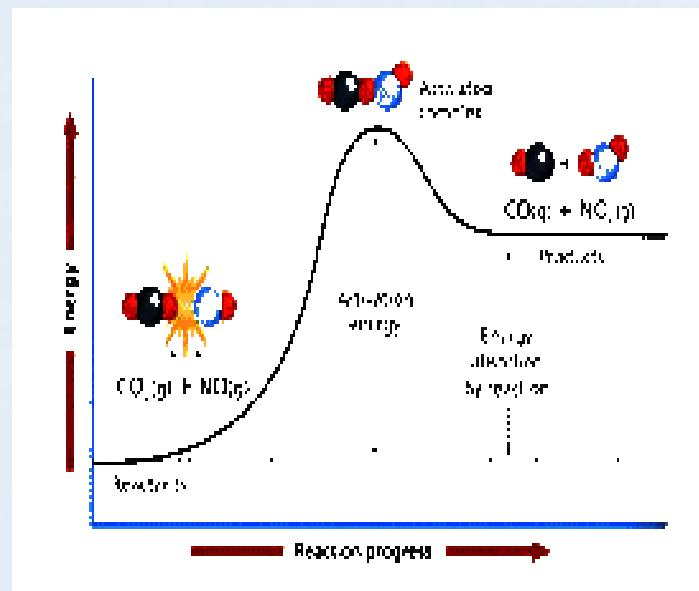
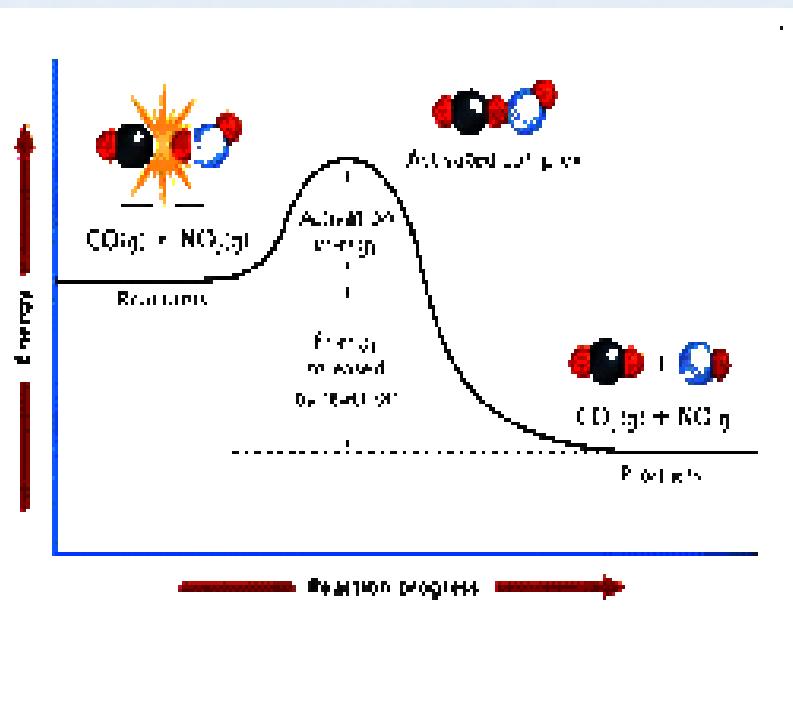
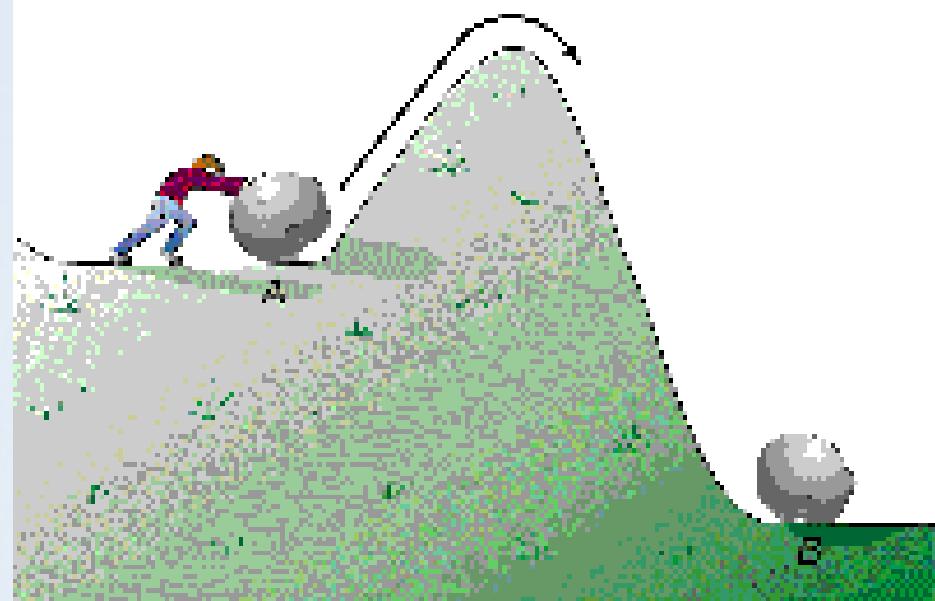
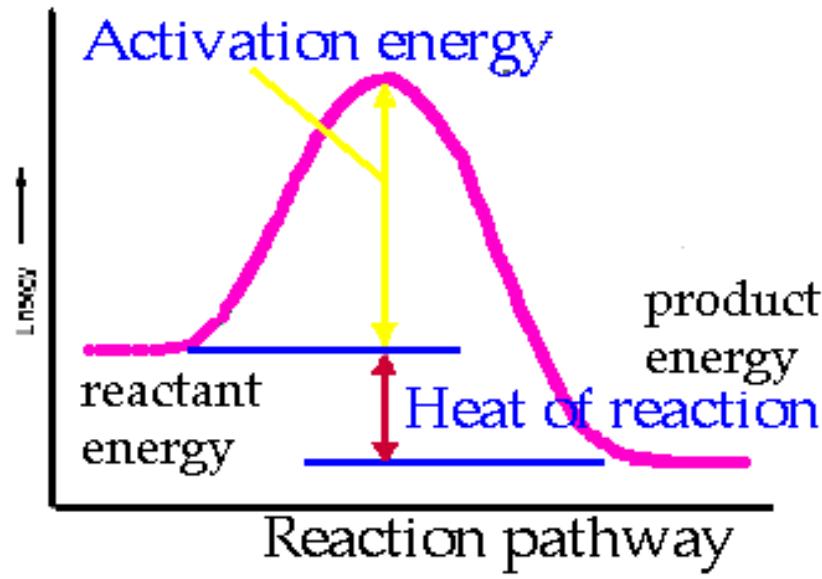


## c. Năng lượng hoạt hóa $E^*$

- 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 $S^*$ .

số định hướng có hiệu quả

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

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



## 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.

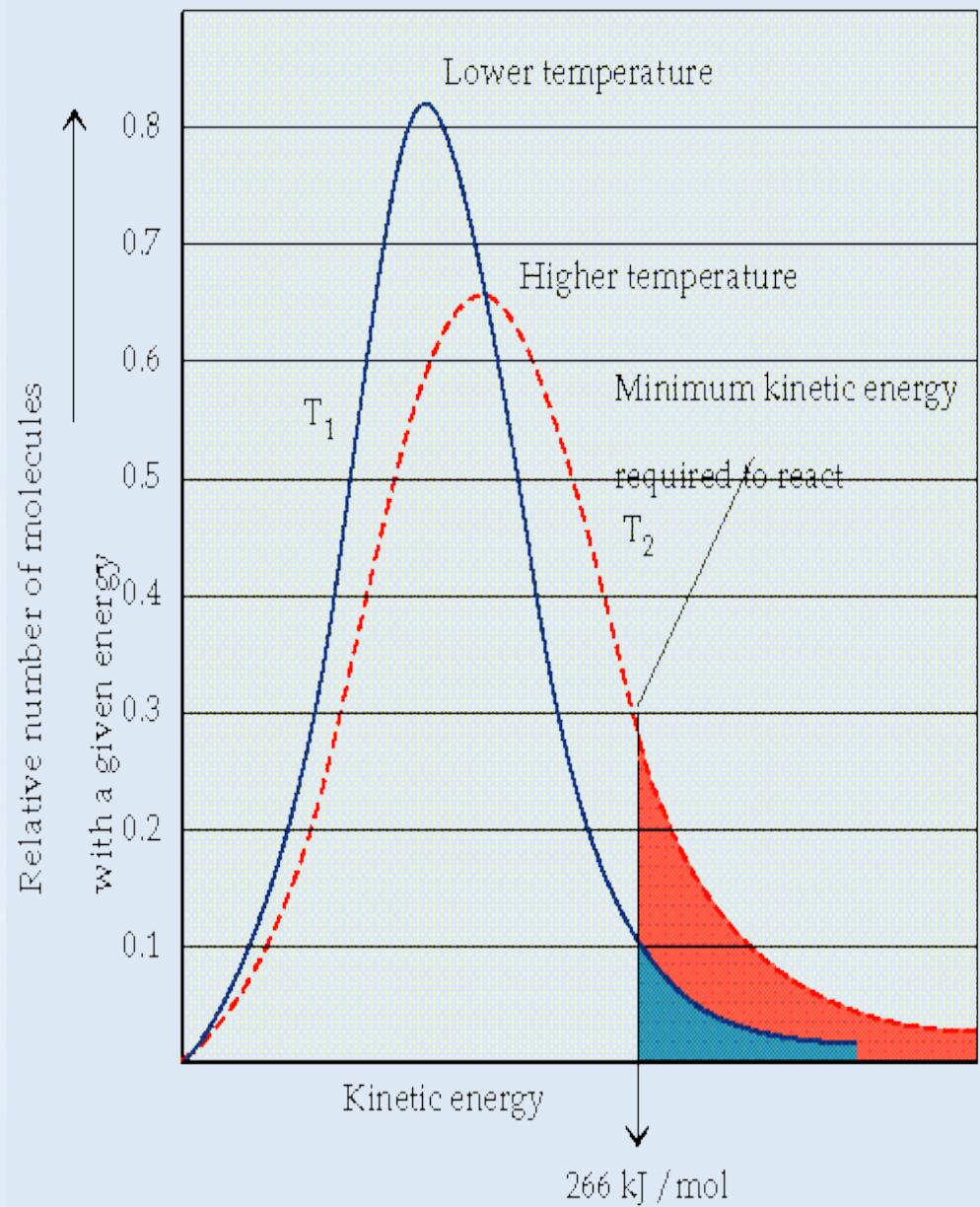
➤  $T \uparrow \rightarrow$  CĐ nhiệt  $\uparrow \rightarrow$  số va chạm  $\uparrow \rightarrow v \uparrow$

Ví dụ: khi nhiệt độ tăng từ  $27^{\circ}\text{C}$  lên  $37^{\circ}\text{C}$

- + 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 quá trình xúc tác.

- Sư 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
  - Sư 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 pú → thay đổi tốc độ pú.*

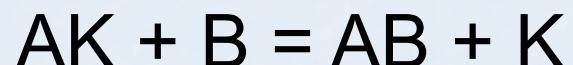
*Cơ chế xúc tác đồng thể: thuyết hợp chất trung gian:*



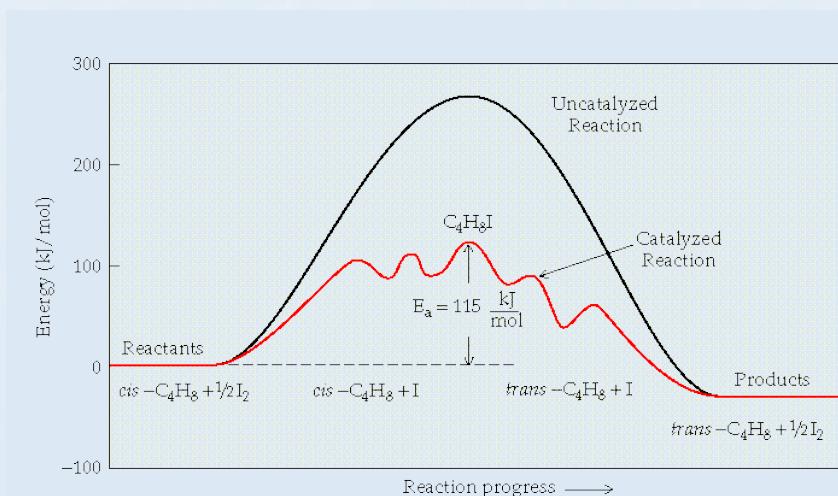
chậm



nhanh



nhanh



# Cơ chế xúc tác dị thể: thuyết hấp phụ

