

# CHƯƠNG 4: ĐỘNG HỌC CỦA PHẢN ỨNG HÓA HỌC

*(Thời lượng: 3t LT + 1t BT)*

# 1. KHÁI NIỆM VỀ ĐỘNG HÓA HỌC

➤ Nhiệt động hóa học cung cấp những cơ sở để xem xét quá trình hóa học có xảy ra hay không, xảy ra theo chiều và giới hạn nào?

➤ Động hóa học cho biết quá trình xảy ra như thế nào theo thời gian trên con đường chuyển hóa của nó.

➤ Động hóa học sẽ xem xét đến tốc độ và cơ chế của phản ứng

## 2. TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG HÓA HỌC

### 2.1 Những khái niệm cơ bản

### 2.2 Tốc độ phản ứng và biểu thức tốc độ phản ứng

[cuu duong than cong . com](http://cuuduongthancong.com)

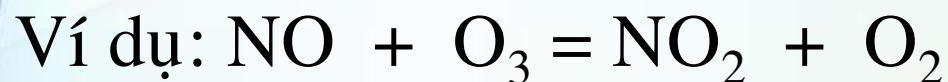
### 2.3 Các lý thuyết cơ sở của động hóa học

[cuu duong than cong . com](http://cuuduongthancong.com)

## 2.1 Những khái niệm cơ bản

### ❖ Phản ứng đơn giản và phản ứng phức tạp.

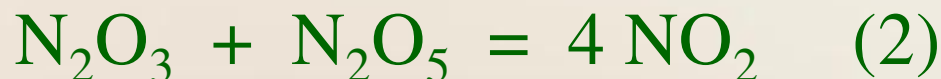
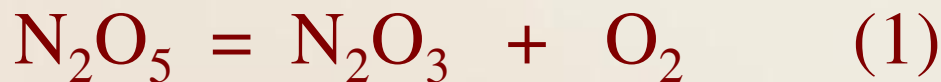
**Phản ứng đơn giản**: là những phản ứng có quá trình chuyển hóa chỉ xảy ra qua 1 giai đoạn.



❖ **Phản ứng phức tạp**: là những phản ứng có quá trình chuyển hóa xảy ra qua nhiều giai đoạn.

**Ví dụ**:

$\text{N}_2\text{O}_5 = 4 \text{NO}_2 + \text{O}_2$  trải qua 2 giai đoạn như sau:



## ❖ Tác dụng cơ bản, cơ chế phản ứng và phân tử số

Mỗi giai đoạn của phản ứng được gọi là một tác dụng cơ bản

Tập hợp các tác dụng cơ bản của 1 quá trình biến đổi chất gọi là cơ chế phản ứng

Tác dụng cơ bản quyết định tốc độ là giai đoạn xảy ra chậm nhất

Số phân tử, nguyên tử hay ion tham gia vào một tác dụng cơ bản của phản ứng hóa học được gọi là phân tử số.

Ví dụ:



## ❖ Phản ứng đồng thể và dị thể

Phản ứng đồng thể: phản ứng diễn ra trong hệ đồng thể (các chất phản ứng và sản phẩm phản ứng ở cùng pha).

cuu duong than cong . com

Phản ứng dị thể: chất phản ứng và sản phẩm tạo thành ở các pha khác nhau.

cuu duong than cong . com

Phản ứng dị thể diễn ra phức tạp hơn phản ứng đồng thể

## 2.2 Tốc độ phản ứng và biểu thức tốc độ phản ứng

**Định nghĩa**: Tốc độ của phản ứng hóa học là số tác dụng cơ bản của nó diễn ra trong một đơn vị thời gian và đơn vị thể tích (đối với phản ứng đồng thể) hoặc trong một đơn vị thời gian và trên một đơn vị diện tích bề mặt phân chia các pha (đối với phản ứng dị thể).

Tốc độ phản ứng được xác định bằng sự giảm nồng độ của chất phản ứng hay bằng sự tăng nồng độ của sản phẩm trong 1 đơn vị thời gian (đơn vị: giờ, phút, giây).

**VD:**



Nghĩa là: trong thời gian 1 giây nồng độ A hoặc B giảm 0,02 mol



## ❖ Tốc độ trung bình

Đối với phản ứng  $A + B = C + D$

**Tính theo chất phản ứng:** nếu nồng độ chất A hay B ở thời điểm  $t_1$  là  $C_1$ , ở thời điểm  $t_2$  là  $C_2$  thì tốc độ trung bình của phản ứng trong khoảng thời gian này là

$$v = - \frac{C_2 - C_1}{t_2 - t_1} = - \frac{\Delta C}{\Delta t}$$

**Tính theo sản phẩm:** nếu nồng độ chất D hay C ở thời điểm  $t_1$  là  $C_1$ , ở thời điểm  $t_2$  là  $C_2$  thì tốc độ trung bình của phản ứng trong khoảng thời gian này là

$$v = + \frac{C_2 - C_1}{t_2 - t_1} = + \frac{\Delta C}{\Delta t}$$

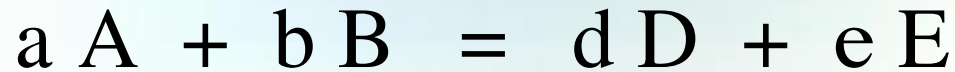
## ❖ Tốc độ tức thời (tính tại thời điểm $t$ nhất định)

$$v = \pm \frac{dC}{d\tau}$$

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com

## ❖ Đối với phản ứng tổng quát



**Tốc độ trung bình:**

$$-\frac{1}{a} \times \frac{\Delta C_A}{\Delta \tau} = -\frac{1}{b} \times \frac{\Delta C_B}{\Delta \tau} = +\frac{1}{d} \times \frac{\Delta C_D}{\Delta \tau} = +\frac{1}{e} \times \frac{\Delta C_E}{\Delta \tau}$$

**Tốc độ tức thời:**

$$v = -\frac{1}{a} \times \frac{dC_A}{d\tau} = -\frac{1}{b} \times \frac{dC_B}{d\tau} = +\frac{1}{d} \times \frac{dC_D}{d\tau} = +\frac{1}{e} \times \frac{dC_E}{d\tau}$$

## ❖ Biểu thức tốc độ phản ứng và bậc phản ứng

Đối với phản ứng đồng thể tổng quát:



$$V_{\text{pr}} = k.[A]^m[B]^n$$

V: tốc độ tức thời tại thời điểm khảo sát

k: hệ số tỷ lệ được gọi là hằng số tốc độ phản ứng

m, n: bậc phản ứng theo chất phản ứng A, B

m+n: bậc phản ứng tổng cộng của phản ứng

Phản ứng đơn giản:  $m = a, n = b$

Phản ứng phức tạp:  $m \neq a, n \neq b$

## Xét các ví dụ



$$v = k[\text{I}_2]$$



$$v = k[\text{C}_3\text{H}_6]$$



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

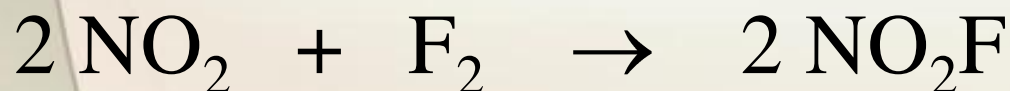
$\Rightarrow$  là những phản ứng bậc 1



$$v = k \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{O}_3]$$



$$v = k \cdot [\text{HI}]^2$$



$$v = k \cdot [\text{NO}_2] \cdot [\text{F}_2]$$

$\Rightarrow$  là những phản ứng bậc 2



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

$\Rightarrow$  là phản ứng bậc 3

# Xét các ví dụ

**Ví dụ 1:** Phản ứng:  $2\text{HI}(\text{k}) = \text{H}_2(\text{k}) + \text{I}_2(\text{k})$

Ở  $443^\circ\text{C}$  có tốc độ tỷ lệ với nồng độ HI như sau:

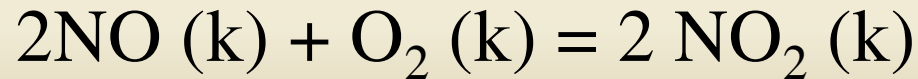
[HI] mol/l	0,0050	0,010	0,020
V, mol/l.s	$7,5 \cdot 10^{-4}$	$3,0 \cdot 10^{-3}$	?

Từ những dữ kiện đã cho, hãy:

- Xác định bậc và viết biểu thức tốc độ của phản ứng đã cho
- Tính hằng số tốc độ của phản ứng ở nhiệt độ khảo sát
- Tính tốc độ của phản ứng ở nhiệt độ trên khi nồng độ HI bằng  $0,020\text{mol/l}$

## Ví dụ 2:

Xác định bậc phản ứng, biểu thức tốc độ và hằng số tốc độ của phản ứng



theo những dữ liệu thực nghiệm sau:

[NO] mol/l	[O <sub>2</sub> ] mol/l	V (mol/l.s)
1,0. 10 <sup>-4</sup>	1,0. 10 <sup>-4</sup>	2,8.10 <sup>-6</sup>
1,0. 10 <sup>-4</sup>	3,0. 10 <sup>-4</sup>	8,4.10 <sup>-6</sup>
2,0. 10 <sup>-4</sup>	3,0. 10 <sup>-4</sup>	3,4.10 <sup>-5</sup>

# ❖ Hằng số tốc độ phản ứng k

- k là đại lượng phụ thuộc vào bản chất chất phản ứng và nhiệt độ phản ứng.
- Như vậy, k là đại lượng không đổi tại một nhiệt độ nhất định.
- Nếu  $[A], [B] = 1 \text{ mol/l}$  thì  $v = k$ ,
- k gọi là tốc độ riêng của phản ứng đã chọn khi nồng độ các chất phản ứng bằng 1 đơn vị.



# Biểu thức tính k

➤ Đối với phản ứng bậc 1:

**A** → sản phẩm

$$v = - \frac{d[A]}{d\tau} = k[A] \qquad \frac{d[A]}{[A]} = -k d\tau$$

✓ Nếu thay  $[A] = c$

✓ Ở thời điểm  $t = 0 \leftrightarrow [A]_0 = c_0$

✓ Ở thời điểm  $t = t \leftrightarrow [A] = c$

$$\int_{c_0}^c \frac{1}{c} dc = -k \int_0^t d\tau \quad \rightarrow \ln c - \ln c_0 = -kt$$

$$k = \frac{1}{\tau} \ln \frac{c_0}{c}$$

# Đối với phản ứng bậc 2

$2A \rightarrow$  sản phẩm

$$v = -\frac{1}{2} \frac{d[A]}{d\tau} = k[A]^2 \qquad \frac{d[A]}{[A]^2} = -2k d\tau$$

- ✓ Nếu thay  $[A] = c$
- ✓ Ở thời điểm  $t = 0 \leftrightarrow [A]_0 = c_0$
- ✓ Ở thời điểm  $t = t \leftrightarrow [A] = c$

$$\frac{1}{c} = \frac{1}{c_0} + 2k\tau$$

$$k = \frac{1}{2\tau} \left( \frac{1}{c} - \frac{1}{c_0} \right)$$

# Ví dụ 1

Ở  $500^{\circ}\text{C}$  xyclopropan chuyển hóa propen theo phản ứng bậc 1. Các dữ kiện thực nghiệm như sau:

t (min)	0	5
$[\text{C}_3\text{H}_6] \cdot 10^3, \text{ mol/l}$	1,5	1,24

Xác định:

1. Hằng số tốc độ phản ứng k.
2. Chu kỳ bán hủy của phản ứng.
3. Phần trăm mol của xyclopropan còn lại sau 30 phút phản ứng.
- 4.. Tính thời gian để xyclopropan phân hủy hết 80%

## Ví dụ 2

Phản ứng phân hủy dinitơ pentoxit  $\text{N}_2\text{O}_5$  là một phản ứng bậc 1 có giá trị hằng số tốc độ  $k = 5,1 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  tại  $45^\circ\text{C}$ .



1. Biết nồng độ ban đầu của  $\text{N}_2\text{O}_5$  là  $0,25\text{M}$ , hỏi sau 3,2 phút nồng độ của nó là bao nhiêu?
2. Sau bao lâu nồng độ  $\text{N}_2\text{O}_5$  giảm từ  $0,25\text{M}$  thành  $0,15\text{M}$ ?
3. Sau bao lâu chuyển hóa hết 62%  $\text{N}_2\text{O}_5$ ?

## 2.3 Thuyết va chạm hoạt động - lý thuyết cơ sở của động hóa học

➤ Điều kiện tiên quyết để cho phản ứng xảy ra là các tiểu phân của các chất phản ứng phải va chạm đồng thời với nhau.

➤ Chỉ những va chạm hiệu quả mới dẫn đến tương tác hóa học:

➤ Điều kiện có va chạm hiệu quả:

1. Các tiểu phân va chạm phải có **năng lượng** lớn hơn hay bằng một giá trị gọi là năng lượng hoạt hóa  $E^*$  (yếu tố năng lượng)

2. Các tiểu phân va chạm phải có **sự định hướng không gian** thuận lợi khi va chạm (yếu tố hình học)

➤ Năng lượng hoạt hóa của chất là **năng lượng tối thiểu** cần cung cấp cho các tiểu phân để chúng trở thành **hoạt động** (có khả năng phản ứng).

➤ Năng lượng hoạt hóa càng nhỏ → có nhiều tiểu phân hoạt động → tốc độ phản ứng càng lớn.

➤ Biểu thức biểu diễn sự phụ thuộc của hằng số tốc độ phản ứng vào các yếu tố năng lượng và hình học:

$$k = Ae^{-\frac{E^*}{RT}}$$

$E^*$ : năng lượng hoạt hóa của phản ứng.

$A$ : hằng số trước lũy thừa, đặc trưng cho ảnh hưởng của sự định hướng không gian thuận lợi.

# **3. CÁC YẾU TỐ ẢNH HƯỞNG ĐẾN TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG**

**3.1 Ảnh hưởng của nồng độ chất phản ứng**

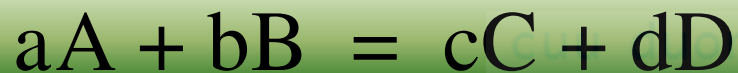
**3.2 Ảnh hưởng của nhiệt độ**

**3.3 Ảnh hưởng của chất xúc tác**



## 3.1 Ảnh hưởng của nồng độ chất phản ứng

- Các phản ứng đều có tốc độ tăng lên khi tăng nồng độ các chất phản ứng.
- Định luật tác dụng khối lượng: “Trong hệ đồng thể, ở nhiệt độ không đổi, tốc độ phản ứng tỉ lệ thuận với tích số nồng độ các chất phản ứng với số mũ bằng hệ số tỉ lượng của các chất phản ứng”



$$v = k C_A^a C_B^b$$

**Định luật chỉ nghiệm ngặt đối với các phản ứng đồng thể đơn giản.**

## 3.2 Ảnh hưởng của nhiệt độ

- Trong phần lớn các phản ứng tốc độ phản ứng tăng khi tăng nhiệt độ

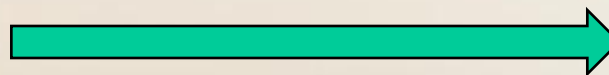
### Quy tắc (kinh nghiệm) Van't Hoff

- Khi tăng nhiệt độ thêm  $10^\circ$  thì tốc độ phản ứng tăng lên khoảng từ 2 đến 4 lần.

- Số lần tăng này được gọi là *hệ số nhiệt độ của tốc độ*, được ký hiệu  $\gamma$  và

$$\gamma = \frac{k_{t+10}}{k_t} = 2 - 4$$

hay tổng quát



$$\gamma^n = \frac{k_{t+n \cdot 10}}{k_t}$$

# Ví dụ

- Tính hằng số tốc độ  $k$  ở  $45^\circ\text{C}$  và số lần tăng tốc độ phản ứng khi tăng nhiệt độ thêm  $100^\circ\text{C}$  đối với phản ứng phân hủy  $\text{N}_2\text{O}_5$  thành  $\text{NO}_2$  và  $\text{O}_2$ , biết ở  $25$  và  $65^\circ\text{C}$  hằng số  $k$  của phản ứng này là  $3,7 \cdot 10^{-5}$  và  $5,2 \cdot 10^{-3}$
- **ĐS:  $k_{45} = 4,4 \cdot 10^{-4}$ ,  $x = 232052$  lần**

# Phương trình Arrhenius

Phương trình thực nghiệm Arrhenius cho thấy rõ ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng.

$$\ln k = \frac{a}{T} + b$$

Trong đó:

k: hằng số tốc độ phản ứng

T: nhiệt độ tuyệt đối

a, b là các hằng số

$$a = -E^*/R$$

$$b = \ln A$$

Trong đó:

- $E^*$ : năng lượng hoạt hóa của phản ứng
- $R$ : hằng số khí
- $A$ : thừa số trước lũy thừa hay thừa số Arrhenius.

➤ **Phương trình Arrhenius có dạng:**

$$\ln k = - \frac{E^*}{RT} + \ln A$$

### 3.3 Ảnh hưởng của chất xúc tác

➤ *Chất xúc tác* là chất làm tăng tốc độ phản ứng hoặc gây nên phản ứng nếu về mặt nguyên tắc phản ứng có thể xảy ra.

➤ *Chất ức chế* là chất làm cho tốc độ phản ứng chậm lại.

**Ví dụ:** glyxerin là chất ức chế của phản ứng oxy hóa natri sunfit thành natri sunfat.

## 3.3 Ảnh hưởng của chất xúc tác

### *Các đặc điểm của chất xúc tác*

- Lượng chất xúc tác dùng ít hơn chất phản ứng rất nhiều lần.
- Chất xúc tác không thay đổi về lượng cũng như về thành phần và tính chất hóa học sau phản ứng (về lý thuyết).
- Mỗi chất xúc tác thường chỉ có tác dụng đối với một phản ứng nhất định.

# Cơ chế tác dụng của xúc tác

Tác dụng của xúc tác là làm giảm năng lượng hoạt hóa của phản ứng bằng cách thay đổi cơ chế phản ứng.

cuu duong than cong . com

Ví dụ: Một phản ứng có năng lượng hoạt hóa  $E^* = 167,2$  kJ/mol, được tiến hành ở 500K. Khi đưa xúc tác vào hệ năng lượng hoạt hóa giảm xuống còn 125,4 kJ/mol. Vậy tốc độ của phản ứng tăng lên bao nhiêu lần?

(ĐS: 23.279 lần)



# THANK YOU!

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com