

CHƯƠNG 5: CÂN BẰNG HÓA HỌC

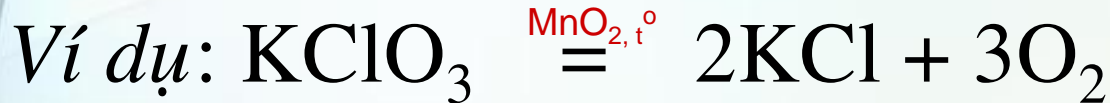
(3T LT + 1T BT)

cuu duong than cong . com

1. Cân bằng hóa học

1.1 Cân bằng hóa học – Phản ứng thuận nghịch

Phản ứng 1 chiều: chỉ xảy ra theo 1 chiều trong bất kỳ điều kiện nào hay ít ra là trong điều kiện tiến hành phản ứng.

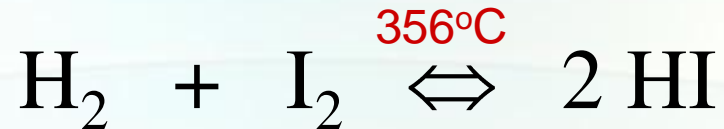


Phản ứng 2 chiều hay phản ứng thuận-nghịch: trong cùng điều kiện tiến hành phản ứng xảy ra theo 2 chiều ngược nhau. Phản ứng thuận-nghịch chỉ xảy ra cho đến khi đạt được *trạng thái cân bằng*.



1.2 Trạng thái cân bằng hóa học

Xét phản ứng



Định nghĩa: Trạng thái cân bằng hóa học là trạng thái của phản ứng hóa học có $v_t = v_n$ và tỉ lệ lượng chất giữa các chất phản ứng với sản phẩm phản ứng không thay đổi ở những điều kiện bên ngoài nhất định.

Các đặc điểm của trạng thái cân bằng hóa học:

- Tốc độ phản ứng thuận bằng tốc độ phản ứng nghịch.
- Tỷ lệ lượng chất giữa các chất tham gia phản ứng không thay đổi ở những điều kiện bên ngoài nhất định.
- Cân bằng hóa học là cân bằng động.
- Không thay đổi theo thời gian nếu những điều kiện bên ngoài vượt định trạng thái cân bằng không thay

2. Hằng số cân bằng và mức độ diễn ra của phản ứng hóa học

❖ Hằng số cân bằng

Xét phản ứng đồng thể tổng quát:



Ở trạng thái cân bằng:

$$v_t = k_t [A]^a [B]^b = v_n = k_n [C]^c [D]^d$$



k_t , k_n : hằng số tốc độ phản ứng thuận và phản ứng nghịch;

$$K_c = \frac{k_t}{k_n} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} \quad [] : \text{nồng độ cân bằng.}$$

K_c : hằng số cân bằng biểu diễn qua nồng độ

➤ Hằng số cân bằng có thể biểu diễn qua áp suất riêng phần của các chất khí tham gia phản ứng. Nếu các chất A, B, C, D là những chất khí ta có:

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

➤ P: áp suất riêng phần lúc cân bằng của các chất A, B, C, D

Lưu ý :

➤ Nếu tham gia vào phản ứng **có cả chất khí, lỏng và rắn** (phản ứng dị thể) thì khi viết biểu thức hằng số cân bằng **chỉ chú ý đến chất khí**. Vì nồng độ hay áp suất hơi bão hòa của chất rắn hoặc lỏng là đại lượng không đổi ở nhiệt độ nhất định

❖ Hằng số cân bằng tính theo nồng độ phần mol, K_x

$$K_x = \frac{x_C^c \cdot x_D^d}{x_A^a \cdot x_B^b}$$

x_i : nồng độ phần mol của từng chất ở trạng thái cân bằng

$$x_i = \frac{n_i}{\text{tổng mol}}$$

Theo Dalton, $P_A = x_A \cdot P$

$$K_P = K_X (P)^{\Delta n}$$

❖ Hằng số cân bằng tính theo số mol, K_n

$$K_n = \frac{n_C^c \cdot n_D^d}{n_A^a \cdot n_B^b}$$

n: số mol của từng chất ở trạng thái cân bằng

$$x_i = \frac{n_i}{\text{tổng mol}}$$

Theo Dalton, $P_A = x_A \cdot P$

$$K_P = K_n (P / \text{tổng mol})^{\Delta n}$$

Mối liên quan giữa các hằng số cân bằng

Xét phản ứng tổng quát:



$$K_P = K_C (R T)^{\Delta n}$$

$$\text{với : } \Delta n = (c + d) - (a + b)$$

$$\text{và } R = 0.082$$

Ý nghĩa của hằng số cân bằng

- Đối với phản ứng đã cho K là hằng số tại nhiệt độ nhất định.
- K cho biết mức độ xảy ra của phản ứng về định tính (nông, sâu) và định lượng (hiệu suất): K càng lớn phản ứng xảy ra càng sâu, hiệu suất càng lớn và ngược lại.

Một số ví dụ

Ví dụ 1: Cho phản ứng thuận nghịch



Ở 300°C nồng độ lúc cân bằng của PCl_5 bằng $4,08 \cdot 10^{-4}$, của PCl_3 và Cl_2 đều bằng 0,01 mol/l. Tính hằng số cân bằng K_C và K_P của phản ứng ở 300°C.

Ví dụ 2: Trong bình kín chứa các khí H_2 và I_2 ở 600°K áp suất riêng phần ban đầu của chúng tương ứng là 1,980 và 1,710 atm. Cho $K_p = 92,6$

a. Tính áp suất riêng phần của các khí trong bình cũng như áp suất chung của hệ sau khi phản ứng xảy ra đạt trạng thái cân bằng ở nhiệt độ đã cho.

b. Tính hiệu suất phản ứng?

Ví dụ 3: Cho phản ứng:



- a. Tính nồng độ CO, CO₂ lúc cân bằng ở 1000°C, biết ở nhiệt độ này phản ứng có hằng số cân bằng $K_C = 0,5$ và nồng độ ban đầu của CO là 0,06 mol/lit
- b. Sau khi cân bằng phản ứng trên được thiết lập (ở điều kiện đã cho) thêm vào lượng CO tương ứng 1 mol/lit . Tính nồng độ CO, CO₂ lúc cân bằng mới được thiết lập.
- c. Tính hiệu suất tổng cộng của phản ứng .

3. Hằng số cân bằng và thế đẳng áp

Ở điều kiện chuẩn:

$$\Delta G^{\circ}_T = \Delta H^{\circ}_{298} - T \Delta S^{\circ}_{298} = -RT \ln K_P$$

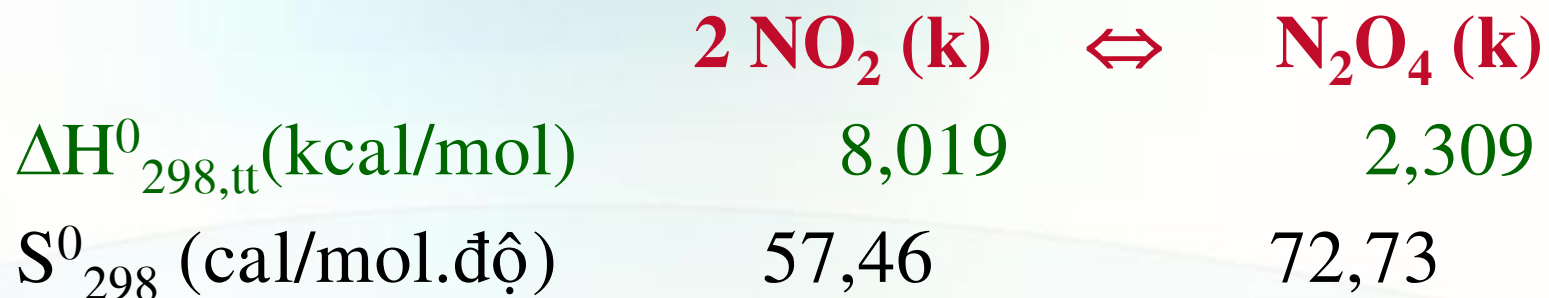
cuu duong than cong . com

Lưu ý

- Trong biểu thức ΔG°_T : chính xác là K_P , còn chỉ áp dụng được K_C khi $K_C = K_P$ (tức là khi $\Delta n = 0$) hoặc khi phản ứng diễn ra trong dung dịch.

Các ví dụ

Ví dụ: Cho phản ứng:



a. Ở 25°C và áp suất riêng phần mỗi khí là 1 atm phản ứng có xảy ra không? Nếu có thì hiệu suất là bao nhiêu?

a. Xác định chiều xảy ra của phản ứng đã cho ở các điều kiện 25°C.

4. Hằng số cân bằng và hiệu ứng nhiệt

Kết hợp các biểu thức nhiệt động ta có:

$$-RT\ln K = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$$

$$\ln K = -\Delta H^\circ/RT + \Delta S^\circ/R$$

Trong một khoảng nhiệt độ không lớn thì ΔH° ΔS° không thay đổi theo nhiệt độ nên:

$$\ln K_1 = -\frac{\Delta H^\circ}{RT_1} + \frac{\Delta S^\circ}{R}$$

$$\ln K_2 = -\frac{\Delta H^\circ}{RT_2} + \frac{\Delta S^\circ}{R}$$

$$\ln \frac{K_2}{K_1} = \frac{\Delta H^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

Phương trình cho phép tính K của một phản ứng ở nhiệt độ bất kỳ khi biết K và hiệu ứng nhiệt của phản ứng ở một nhiệt độ khác

Ví dụ

Cho phản ứng $\text{NO (k)} + 1/2\text{O}_2 \leftrightarrow \text{NO}_2 \text{ (k)}$

Tính hằng số cân bằng K_p của phản ứng ở 325°C biết hiệu ứng nhiệt tiêu chuẩn của phản ứng bằng $-57,07\text{kJ/mol}$ và hằng số cân bằng K_p ở 25°C bằng $1,3 \cdot 10^6$.

Đáp số: 12,45

5. Sự chuyển dịch cân bằng và nguyên lý Le Chatelier

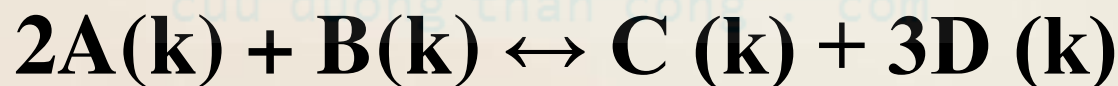
Nguyên lý chuyển dịch cân bằng (nguyên lý Le Chatelier)

Khi tác dụng từ ngoài vào hệ cân bằng bằng cách thay đổi một điều kiện nào đó quyết định vị trí cân bằng, thì vị trí cân bằng của hệ sẽ dịch chuyển về phía **làm giảm** hiệu quả tác dụng đó.

5.1 Ảnh hưởng của nồng độ

Đối với hệ cân bằng nếu tăng hay giảm nồng độ của một chất thì cân bằng sẽ dịch chuyển về phía làm giảm hay tăng nồng độ chất đó

Ví dụ xét phản ứng:

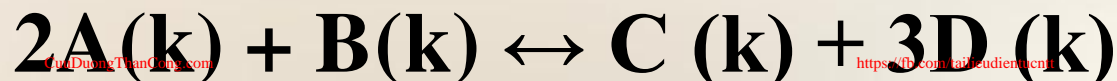


5.2 Ảnh hưởng của áp suất

Khi tăng áp suất của hệ thì cân bằng dịch chuyển về phía làm giảm áp suất.

Khi giảm áp suất của hệ thì cân bằng dịch chuyển về phía làm tăng áp suất.

Ví dụ xét phản ứng:



5.3 Ảnh hưởng của nhiệt độ

Khi tăng nhiệt độ cân bằng sẽ chuyển dịch theo chiều thu nhiệt, còn khi hạ nhiệt độ cân bằng sẽ dịch chuyển theo chiều phát nhiệt.

Ví dụ xét phản ứng:



Ví dụ: Đối với phản ứng:



$$\Delta H^\circ_{298} = -11,0 \text{ kcal/mol.}$$

- Khi tăng nồng độ hydro:
cân bằng chuyển dịch theo chiều thuận.
- Khi tăng nhiệt độ của hệ:
cân bằng chuyển dịch theo chiều nghịch.
- Khi tăng áp suất của hệ:
cân bằng chuyển dịch theo chiều thuận.

THANK YOU

cuu duong than cong . com