

www.mientayvn.com

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kĩ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

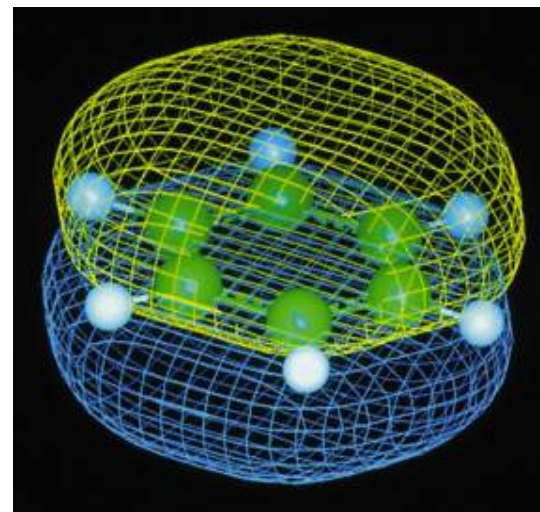
Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trao i tr c tuy n t i:

www.mientayvn.com/chat_box_hoa.html

Hóa i C ng



Chapter 7: ng hóa h c

N i dung

7.1 i t ng nghiên c u

7.2 T c ph n ng hóa h c

7.3 M t s y u t y u t nh h ng n t c
ph n ng

7.4 Bài t p

7.1 Nitrogen fixation

1. Nitrogen fixation

- Nitrogen fixation is the process by which atmospheric nitrogen is converted into a form that is usable by plants and animals.
- Nitrogen fixation is a slow process that occurs naturally in the soil and in the atmosphere. It is not dependent on the rate of the reaction or the amount of nitrogen that is fixed.

- Theo nhiệt động hóa học, tiêu chuẩn xác lập chi phí định biên của phản ứng nhiệt và áp suất không phải là thế năng áp hay năng lượng tự do Gibbs G_{TP} của phản ứng
 - + Nếu $G_{TP} < 0$ phản ứng sẽ diễn ra theo chiều thuận.
 - + Nếu $G_{TP} > 0$ phản ứng diễn ra theo chiều nghịch trái ngược với chiều tiến.
 - + Nếu $G_{TP} = 0$ hệ phản ứng trạng thái cân bằng.

2. Nhiệt động nghiên cứu của động hóa học

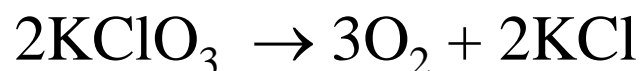
- Khảo sát quá trình diễn ra nhanh hay chậm
- Qua những giai đoạn trung gian nào
- Giai đoạn nào quyết định tốc độ phản ứng

Tốc độ là n/c và các chất và tốc độ của phản ứng hóa học

7.2 T c ph n ng hóa h c

7.2.1.M t s khái ni m c b n v ph n ng hóa h c

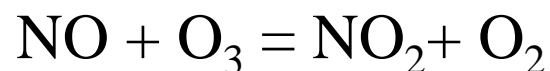
1. H s t l ng c a ph n ng hóa h c là s ch s nguyên t , phân t và ion c a các ch t tham gia t ng tác c ghi trong ph ng trình ph n ng hóa h c



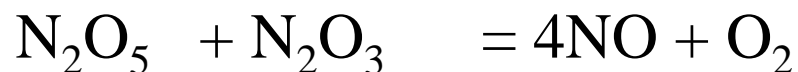
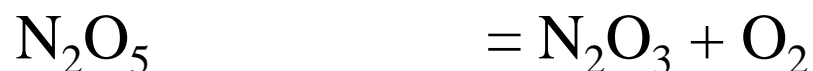
h s t l ng t ng ng c a KClO_3 ; O_2 và KCl là 2,3,2

2.Ph n ng n gi n và ph n ng ph c t p

+P/ n gi n là ph n ng ch xảy ra 1 giai o n



+P/ ph c t p là ph n ng xảy ra nhi u giai o n

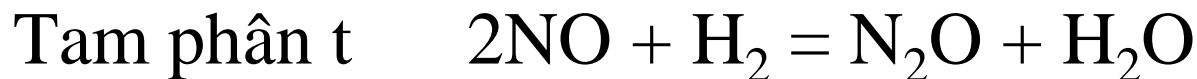
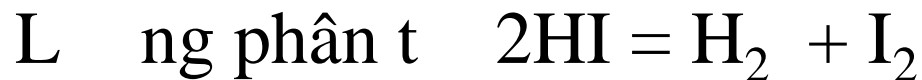
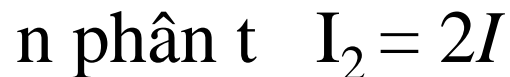


M i giai o n g i là m t ph n ng s c p

3. Phân t s và b c ph n ng

a **Phân t s** là s phân t tham gia vào m t ph n ng s c p.

- Ng i ta phân bi t ph n ng n phân t , l ng phân t và tam phân t

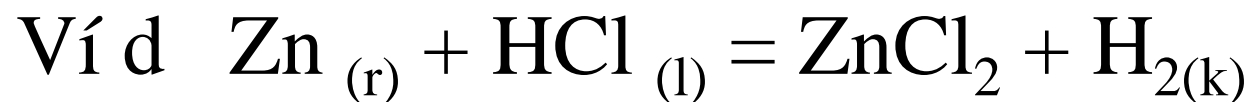


b **Bậc phản ồng** là t ng số m u c u a n ồng ñ o a c h a t ñ o ù trong bi u th c t c ph n ng. N u t ng s m b ng 1 thì g i là ph n ng b c 1...

- i v i ph n ng nhi u giai o n, b c c a ph n ng là b c c a giai o n ch m nh t, nên có khi b c ph n ng không trùng v i phân t s

4. Phản ứng đồng thể và phản ứng dị thể

- Phản ứng đồng thể : là phản ứng xảy ra trong cùng 1 pha (như phản ứng giữa NH_3 và H_2 và N_2)
- Phản ứng dị thể là phản ứng xảy ra trong nhiều pha .



7.2.2 Tốc độ phản ứng hóa học

1. **Khái niệm** Tốc độ của phản ứng hóa học là đại lượng đặc trưng cho diễn biến nhanh hay chậm của một phản ứng hóa học

Tốc độ của phản ứng hóa học là biến thiên nồng độ của một trong những chất tham gia phản ứng hoặc chất tạo thành trong một đơn vị thời gian.

$$v = \frac{\text{Nồng độ sau} - \text{nồng độ trước}}{\text{Thời gian sau} - \text{thời gian trước}} = \frac{\Delta [C]}{\Delta t}$$

2. Tốc độ trung bình và tốc độ tức thời của phản ứng



$$\text{rate} = -\frac{1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{e} \frac{\Delta[E]}{\Delta t} = \frac{1}{f} \frac{\Delta[F]}{\Delta t}$$

+ Tốc độ trung bình của phản ứng $\bar{v} = \pm \Delta C / \Delta t$

+ Tốc độ tức thời của phản ứng

$$v = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \bar{v} = \pm dC/dt$$

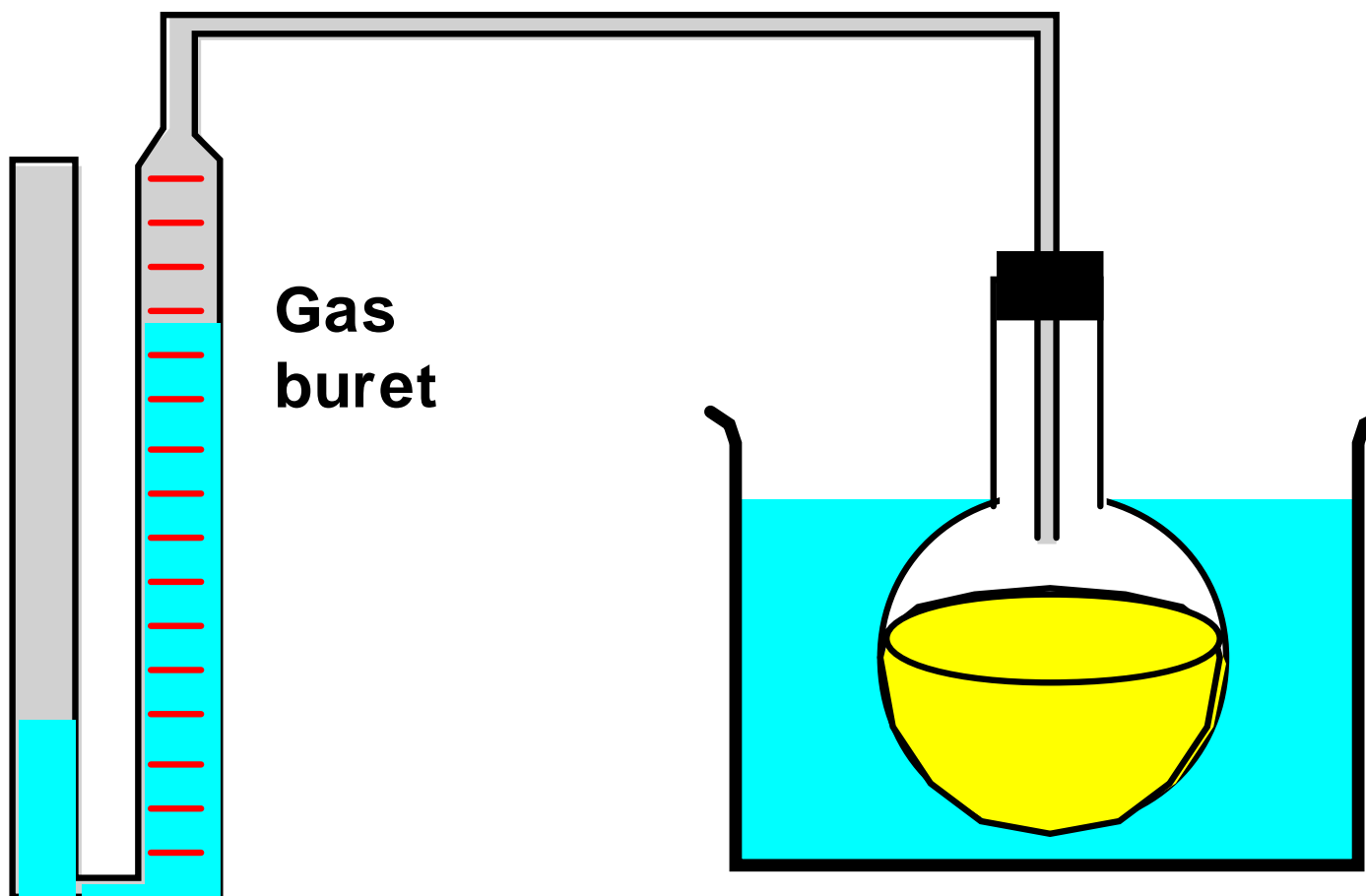
3. Phương pháp xác định thành phần

- Ví dụ xét phân hủy N_2O_5 .



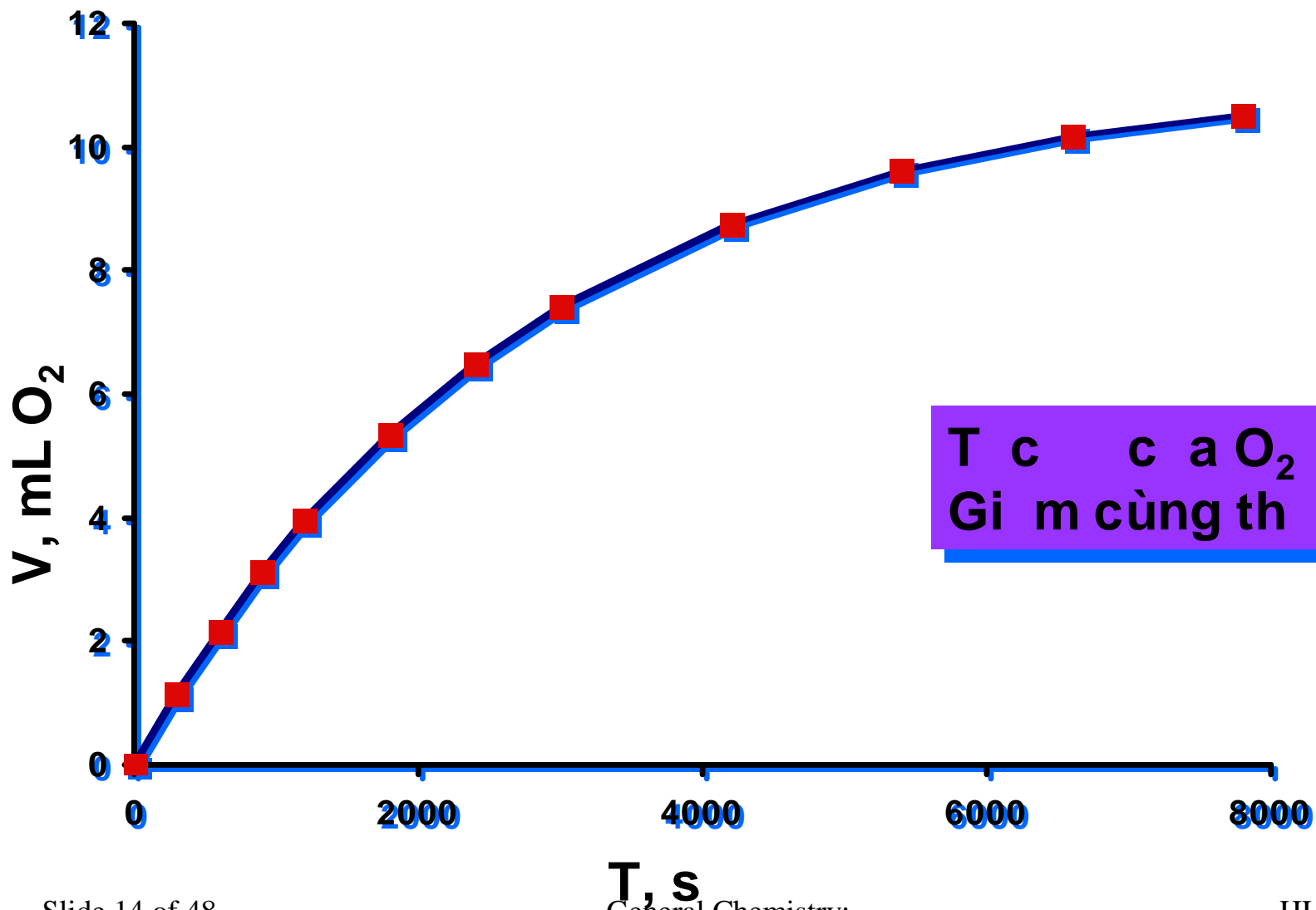
khi N_2O_5 phân hủy, N_2O_4 giữ lại trong dung dịch và O_2 có thể thu được qua ngưng tụ.

Víd



t (s)	Th tích O ₂ , mL
0	0
300	1.15
600	2.18
900	3.11
1200	3.95
1800	5.36
2400	6.50
3000	7.42
4200	8.75
5400	9.62
6600	10.17
7800	10.53

**Kết quả thí
nghiệm**



Tốc độ trung bình

$$\text{Tốc độ giải phóng } O_2 = \frac{\Delta V(O_2)}{\Delta t}$$

T(s)	V O ₂ *
0	
300	0.0038
600	0.0034
900	0.0031
1200	0.0028
1800	0.0024
2400	0.0019
3000	0.0015

★ 7.3 Các yếu tố ảnh hưởng đến cân bằng

7.3.1 Ảnh hưởng của nhiệt độ

1. Ảnh hưởng của nhiệt độ

Trong phản ứng thuận, nhiệt độ không ảnh hưởng đến cân bằng, vì vậy các chất phản ứng (kèm theo sự thích hợp)”.
Trong phản ứng thuận, nhiệt độ không ảnh hưởng đến cân bằng, vì vậy các chất phản ứng (kèm theo sự thích hợp)”.

Phản ứng thuận toán mô tả quan hệ giữa các chất tham gia và sản phẩm các chất phản ứng cũng là phản ứng thuận và cân bằng hay phản ứng thuận nghịch.

nh h ng c a n ng

Ví d : $a A + b B \cdots g G + h H \cdots$

T c ph n ng $V = k [A]^m [B]^n \cdots$

B c t ng quát ph n ng = $m + n + \cdots$

Trong ó: V: T c ph n ng; a, b|: h s t l ng

k: h ng s t c c a ph n ng

m, n: b c ph n ng c a ch t A và B, B c ph n ng c

xác nh b ng th c nghi m

i v i ch t khí n ng c thay th b ng áp su t

$$V = - dP_A/dt = k_p P_A P_B$$

i v i ph n ng d th , ch t r n không có m t trong

bi u th c t c ph n ng

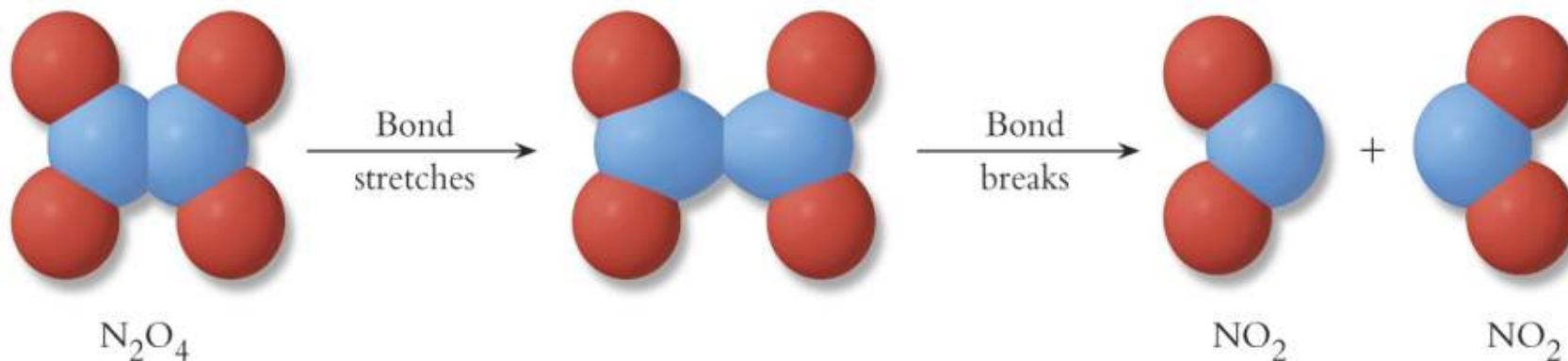
Hệ thống các

- Về mặt lý thuyết: Hệ thống các phản ứng hóa học là tất cả các phản ứng hóa học khi tiến hành theo các điều kiện nhất định
- Các phản ứng hóa học xảy ra theo một hướng nhất định và không thể đảo ngược

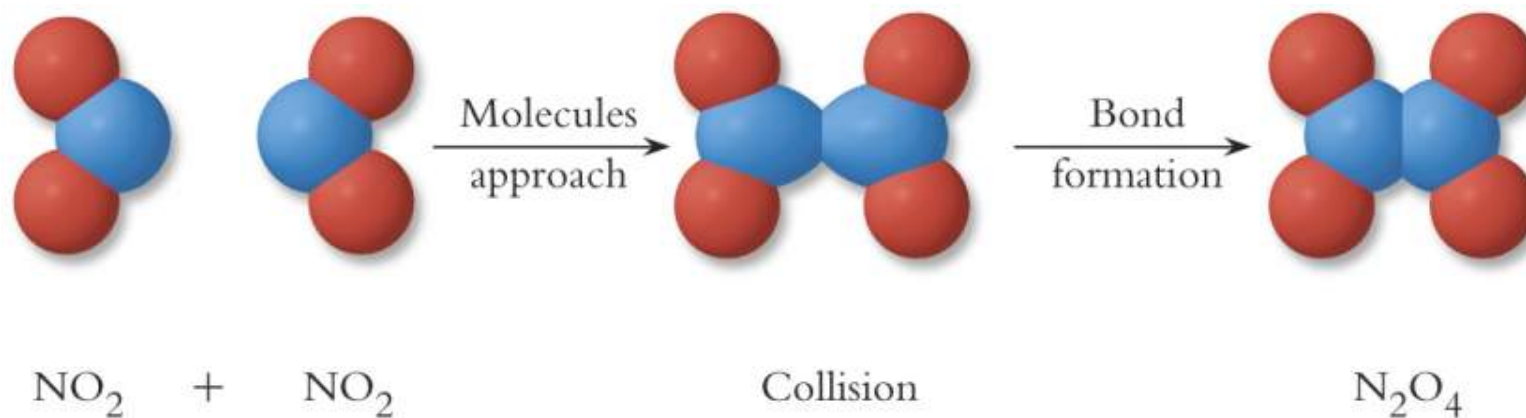
Quan hệ lo i ph n ng và pt ng h c

A S n ph m	n phân t	$V = K[A]$
2 A S n ph m	L ng phân t	$V = K[A]^2$
A + B S n ph m	L ng phân t	$V = K[A][B]$
2A + B S n ph m	Tam phân t	$V = K[A]^2 [B]$

n phân t

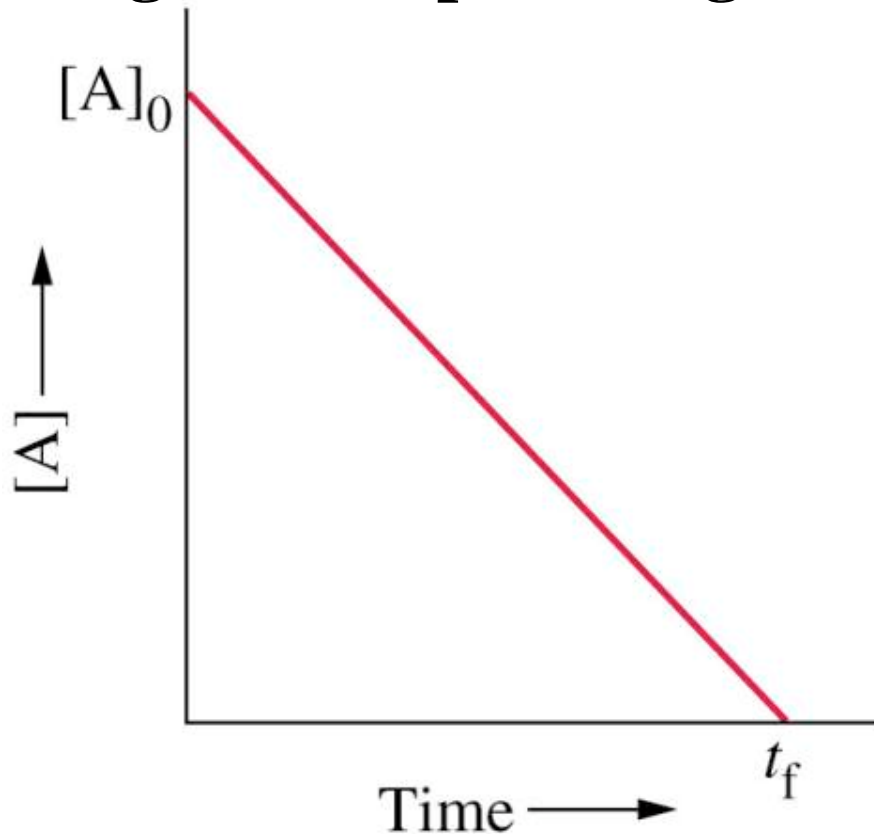


L ng phân t



Phản ứng bậc không

Là phản ứng mà tốc độ phản ứng không phụ thuộc vào nồng độ chất phản ứng



A S n p h m

$$V = k [A]^0$$

$$V = k$$

$$[k] = \text{mol L}^{-1} \text{s}^{-1}$$

Phản ứng bậc không

$$-\frac{[A]}{t} = k \quad \xrightarrow[\text{vi phân}]{\text{Chuyển qua}} \quad -\frac{d[A]}{dt} = k$$

Và lấy tích phân theo thời gian từ 0 đến t

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} d[A] = \int_0^t k dt$$

$$-[A]_t + [A]_0 = kt$$

$$[A]_t = [A]_0 - kt$$

2. Hằng số tốc độ của phản ứng bậc 1

- Muốn tính hằng số tốc độ ta lấy tích phân của các biểu thức tính tốc độ

- Ví dụ phản ứng bậc 1 $A \rightarrow SP$

+ Ta có $v = -d[A]/dt = k[A] \Rightarrow d[A]/[A] = -k dt$

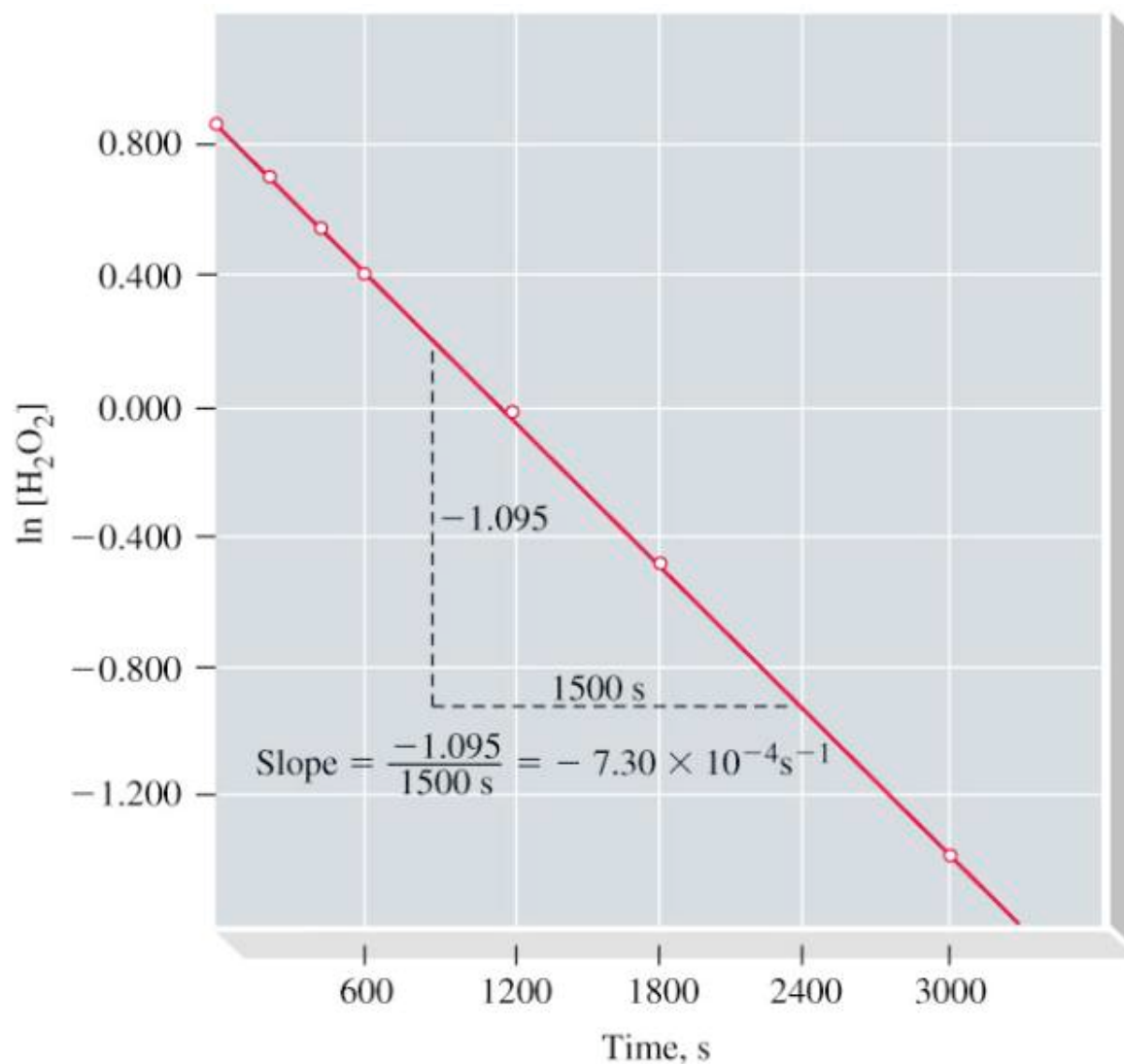
+ lấy tích phân từ nồng độ $[A]_0$ ngay tại $t=0$ đến nồng độ $[A]$ ngay tại thời gian t ta có

$$\ln[A] - \ln[A]_0 = -kt \Rightarrow \ln[A] = \ln[A]_0 - kt$$

$$k = \frac{1}{t} \ln \frac{[A]_0}{[A]} \quad \text{Hay} \quad k = \frac{2,303}{t} \lg \frac{[A]_0}{[A]} = \frac{2,303}{t} \lg \frac{[A]_0}{[A]_0 - x}$$

x là nồng độ chất p/ b giảm đi

Ph n ng b c l



Thời gian bán phân hủy

- $t_{1/2}$ thời gian bán phân hủy của phản ứng bậc 1 không phụ thuộc vào nồng độ ban đầu và chỉ phụ thuộc vào hằng số phân rã

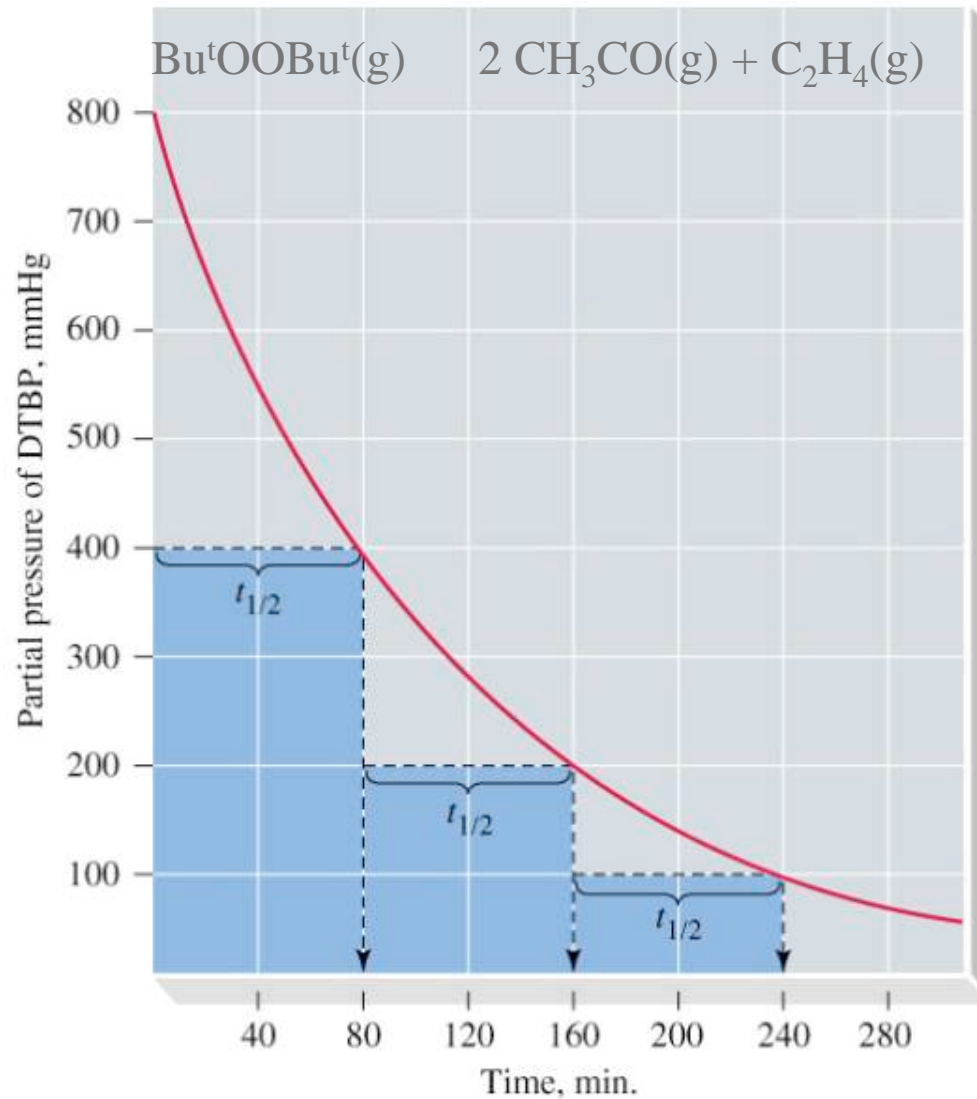
$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -kt$$

$$\ln \frac{\frac{1}{2}[A]_0}{[A]_0} = -kt_{1/2}$$

$$-\ln 2 = -kt_{1/2}$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0.693}{k}$$

Thời gian bán phân hủy



3. Hằng số tốc độ phản ứng bậc 2

a) **Trình bày:** $2A \rightarrow sp$

$$v = -d[A]/dt = k_2[A]^2 \Rightarrow k_2 dt = -d[A]/[A]^2$$

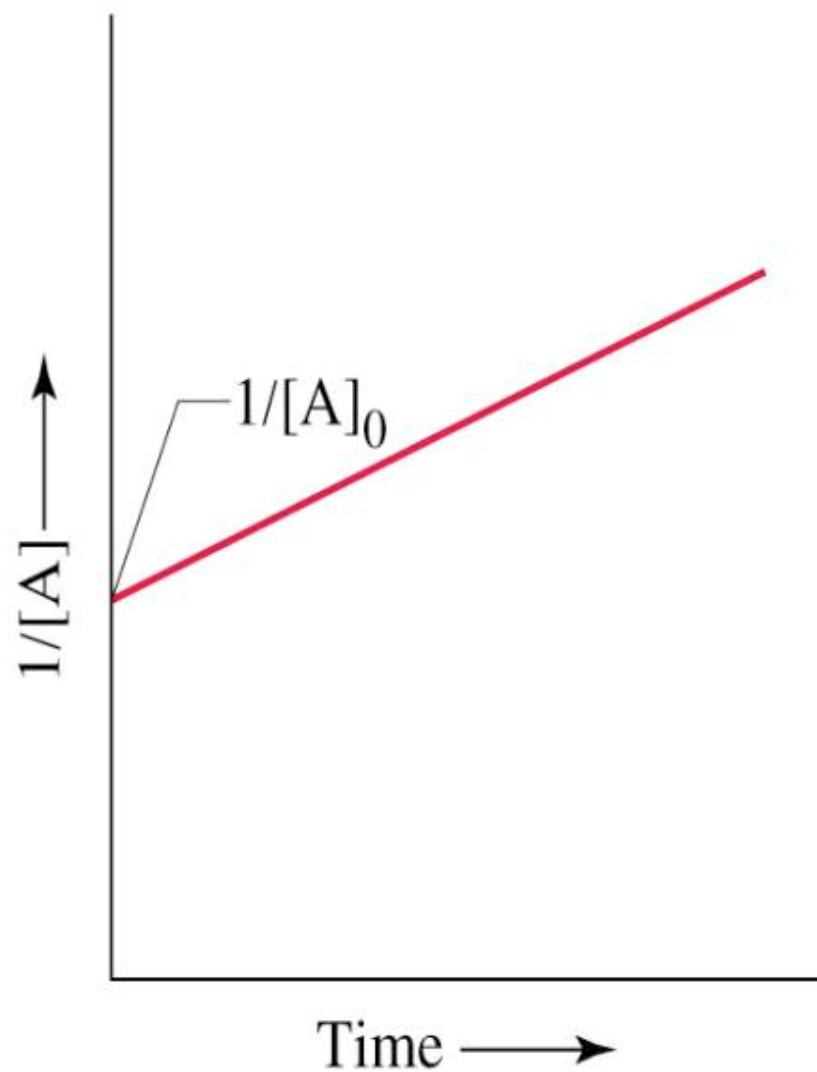
- Lý tích phân xác định với $[A]=[A]_0$ khi $t=0$ và giới hạn là $gi\ m$
nồng độ $[A]_0$ sau thời gian t : $[A]=[A]_0-x$ ta có

$$\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = k_2 t \Rightarrow k_2 t = \frac{[A]_0 - [A]}{[A]_0 [A]}$$

$$k_2 = \frac{1}{t} \frac{x}{[A]_0([A]_0 - x)}$$

$$\text{Thời gian nửa phản ứng } t_{1/2} = \frac{1}{k_2[A]_0}$$

Ph n ng b c 2



b) Trường hợp A + B Sản phẩm

+ Trường hợp 1: Nồng độ ban đầu $[A]_0 = [B]_0$

$$V = k[A][B] = k_2 [A]^2$$

Ta có
$$k_2 = \frac{1}{t} \frac{x}{[A]_0([A]_0 - x)}$$

+ Trường hợp 2: Nồng độ ban đầu $[A]_0 \neq [B]_0$

tính thời gian thì $[A] = [A]_0 - x$, $[B] = [B]_0 - x$

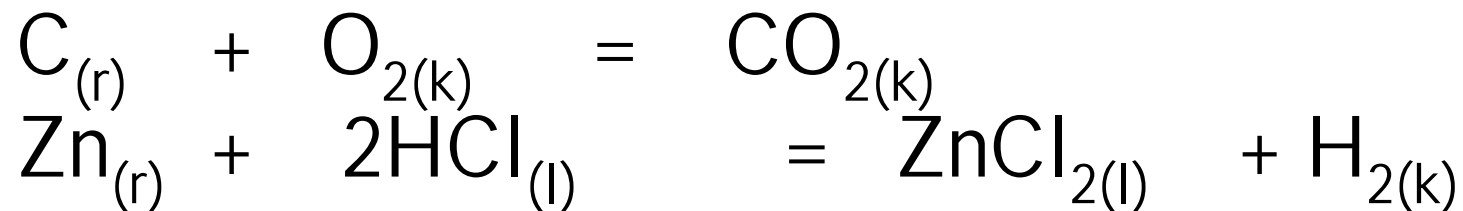
$$V = - \frac{d[A]}{dt} = - \frac{d[B]}{dt} = k[A][B]$$

. Thay giá trị $[A]$ và $[B]$ theo nồng độ và x , sau đó lấy tích phân

$$k_2 t = \frac{1}{[A]_0 - [B]_0} \ln \frac{[B]_0([A]_0 - x)}{[A]_0([B]_0 - x)} \quad \text{Do đó} \quad k_2 = \frac{2,303}{t([A]_0 - [B]_0)} \lg \frac{[B]_0([A]_0 - x)}{[A]_0([B]_0 - x)}$$

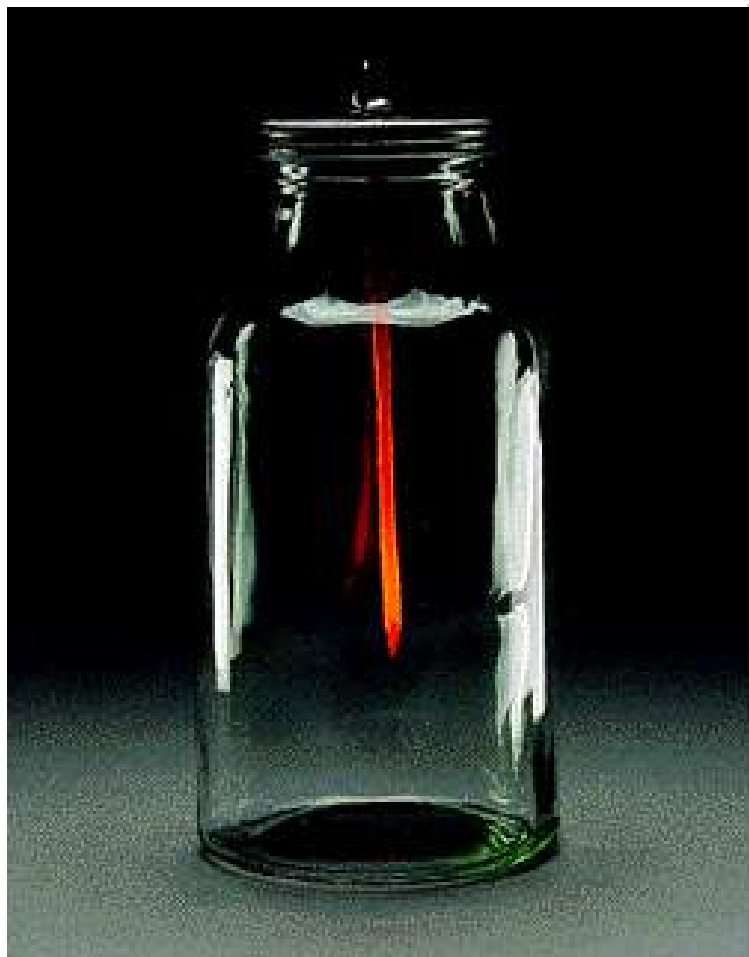
★ 4. Đặc điểm các phản ứng trong hệ đồng thể

Phản ứng hóa học có thể xảy ra giữa các chất ở các pha khác nhau nhờ :



Tốc độ của các phản ứng đồng thể ngoài những yếu tố ảnh hưởng kể trên còn có các yếu tố khác như: diện tích tiếp xúc bề mặt, môi trường phản ứng, sự khuếch tán của sản phẩm và các chất tham gia phản ứng.

nh h ng c a b m t lên t c ph n ng



Dây trong O_2



B t trong O_2

★ 7.3.2 nh h ng c a nhi t

Theo Van't Hoft: H u h t t c
 c a các ph n ng t ng theo nhi t
 , c nhi t t ng 10 thì t c
 t ng lên 2-4 l n

$$\frac{v_2}{v_1} = \gamma^{\frac{t_2 - t_1}{10}}$$

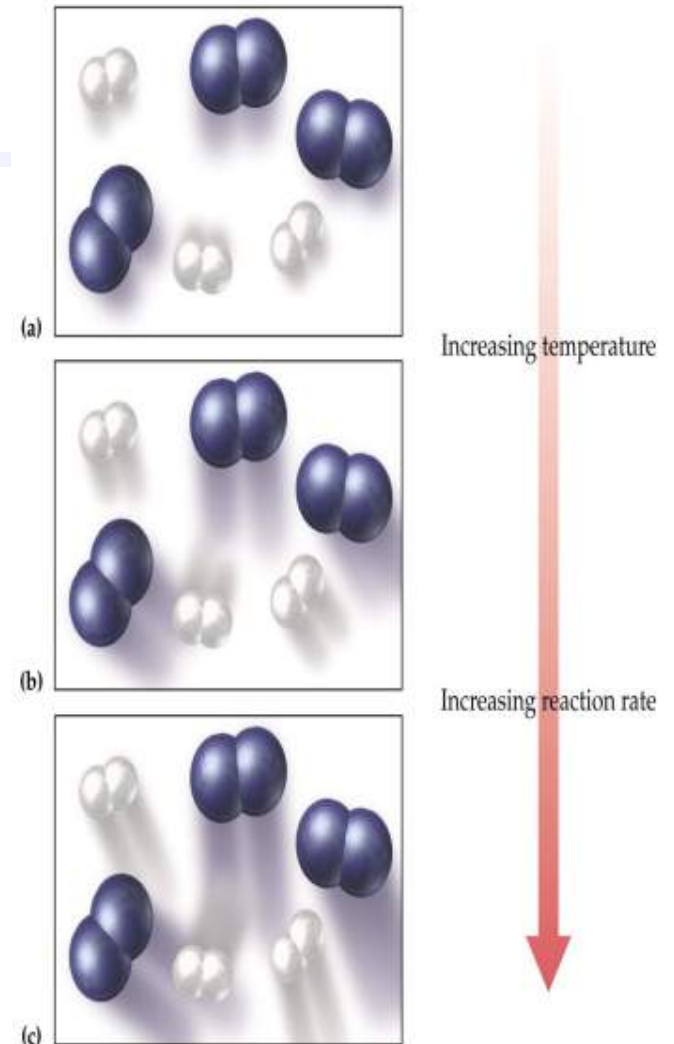
Trong ó:

v_1

là h s nhi t

v_1 là t c ph n ng nhi t t_1

v_2 là t c ph n ng nhi t t_2



★ nh h ng c a nhi t

Theo Arrhenius, s ph thu c c a h ng s t c ph n ng vào nhi t :

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

Trong ó:

A: H ng s c tr ng cho ph n ng

E*: N ng l ng ho t hoá c a ph n ng (cal.mol⁻¹)

R: H ng s khí lý t ng (cal.mol⁻¹.K⁻¹)

T: Nhi t c a ph n ng (K)

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E^*}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

Sph thu c t c ph n ng vào nhi t

- Nh n xét:

- nhi t xác nh E^* càng nh thì t c ph n ng càng l n

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

- Khi t ng nhi t , t c ph n ng t ng

- M i liên h gi a n ng l ng ho t hóa v i t c ph n ng cho th y ***ch có nh ng va ch m x y ra gi a ti u phân có n ng l ng đ*** (ho t hóa) m i có hi u qu

. Năng lượng hoạt hóa

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E^*}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

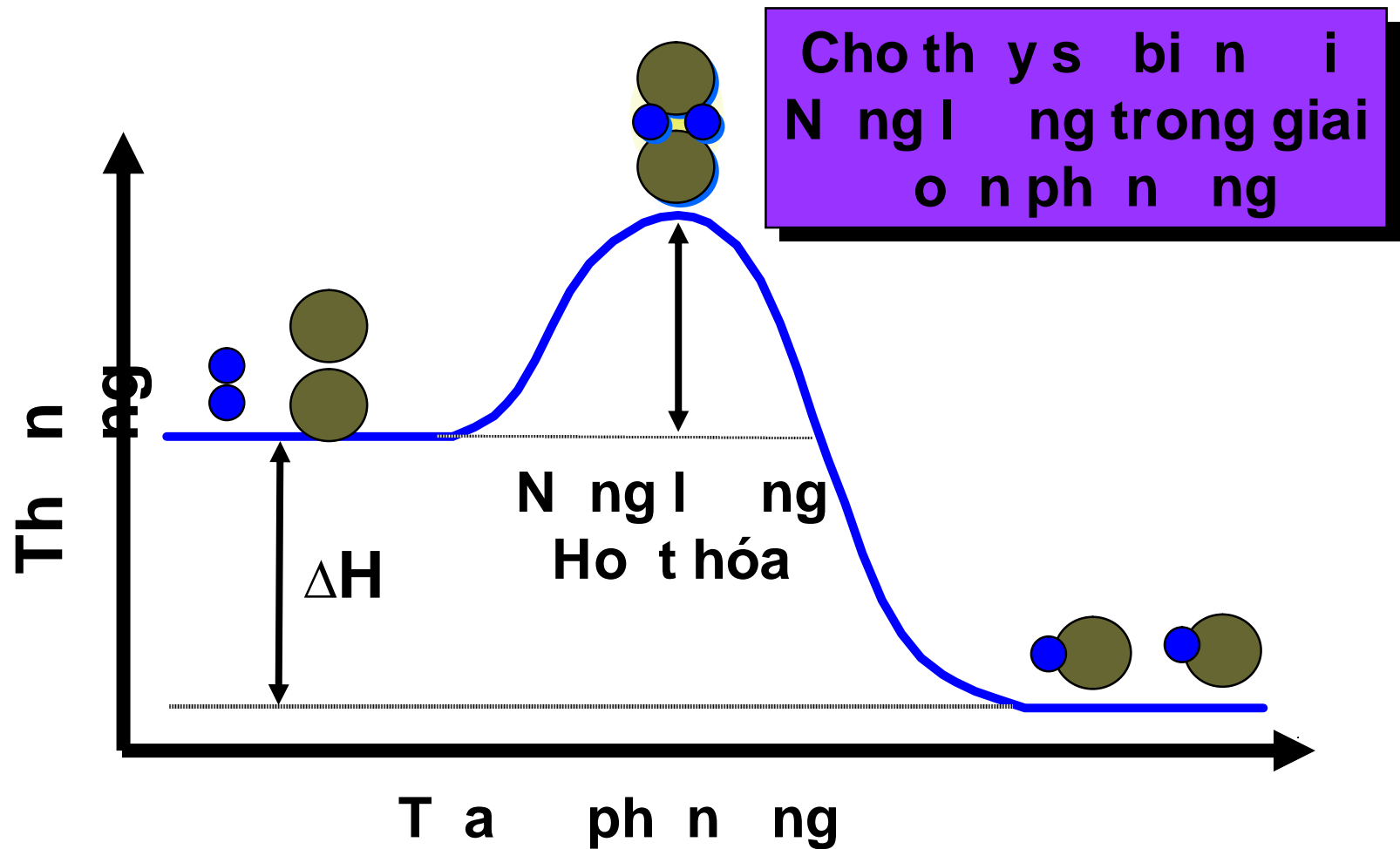
- Nếu chuyển sang logarit thập phân

$$\lg \frac{k_2}{k_1} = \frac{E^*}{2,303R} \left[\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right]$$

Năng lượng hoạt hóa E^*

$$E^* = 2,303R \left[\frac{T_1 T_2}{T_2 - T_1} \right] \lg \frac{k_2}{k_1}$$

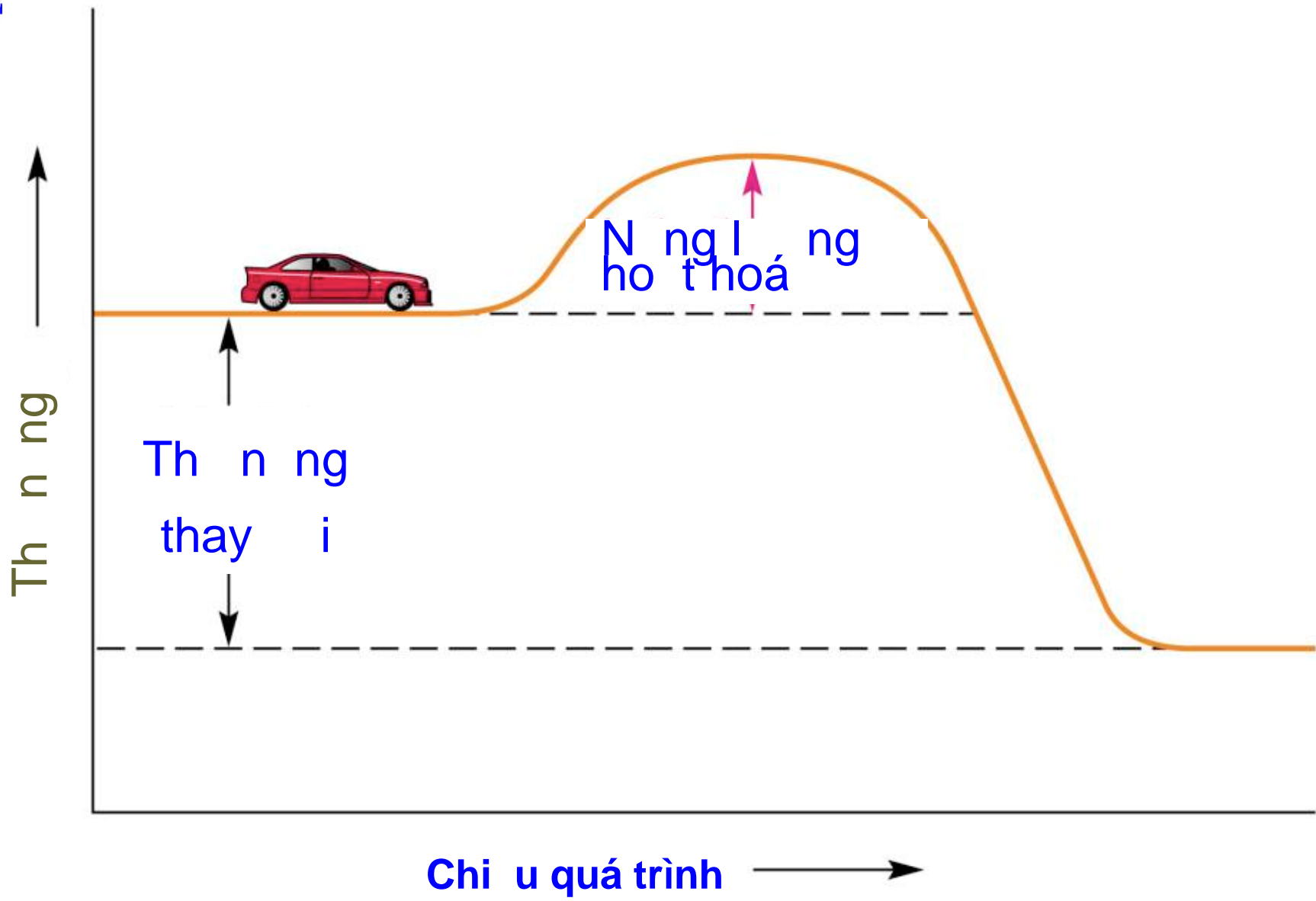
Giản năng lượng của phản ứng



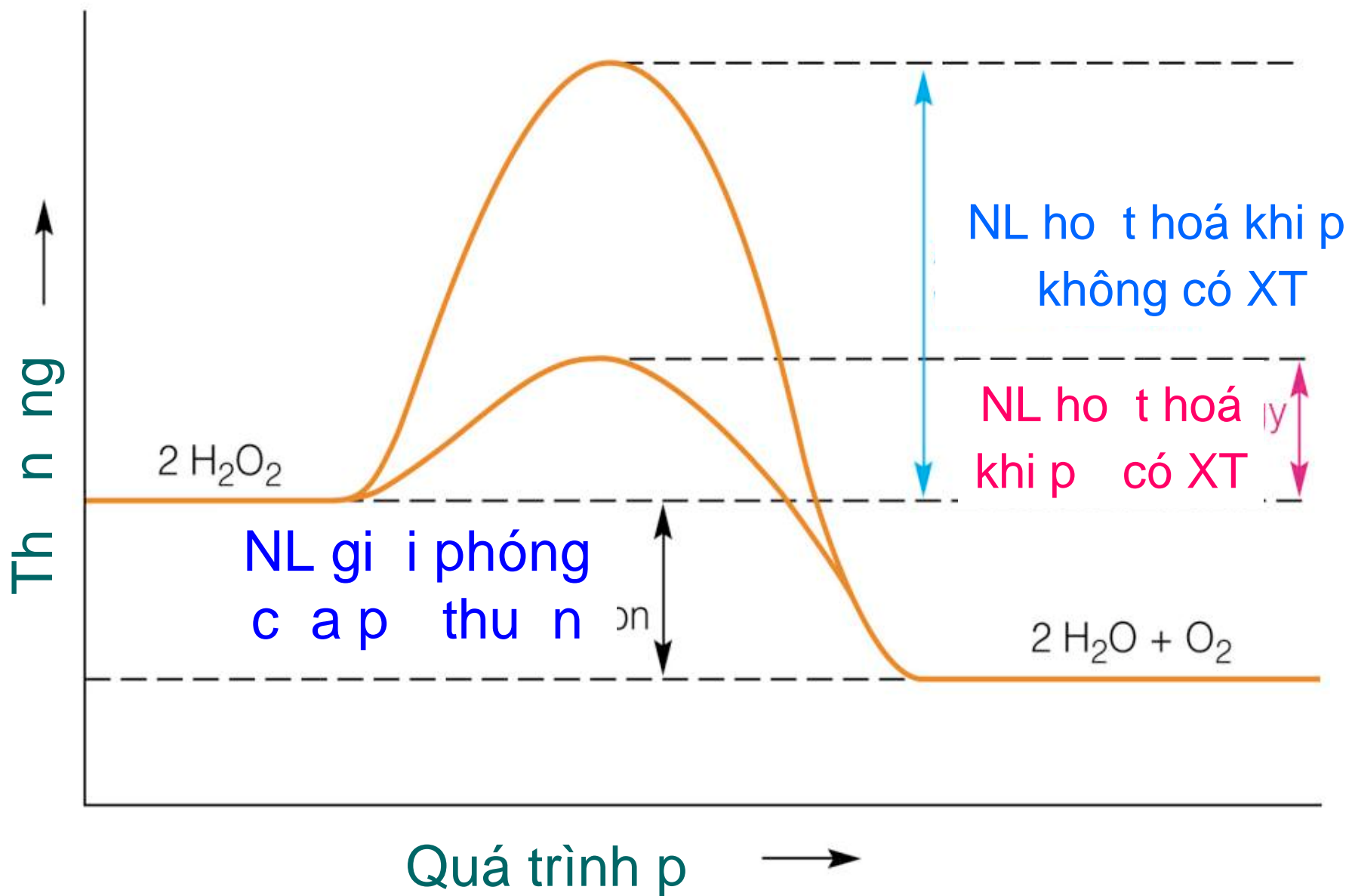
★ 7.3.3 **nh h ng c a ch t xúc tác**

- Ch t xúc tác: ch t tham gia vào m t giai o n c a ph n ng và làm t ng t c c a ph n ng, sau ó c ph c h i và tách ra kh i s n ph m c a ph n ng mà không b bi n i c v tính ch t hoá h c c ng nh v l ng.
- Phân lo i ch t xúc tác:
 - Xúc tác ng th : có cùng pha v i ch t tham gia ph n ng (dung d ch axit, baz , mu i c a kim lo i chuy n ti p...)
 - Xúc tác d th : không cùng pha v i ch t tham gia ph n ng, ph n ng hoá h c x y ra trên b m t ch t xúc tác
 - Xúc tác enzym

★ Hình ảnh cách tác

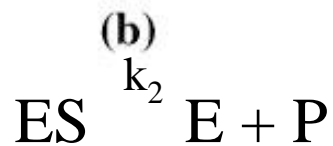
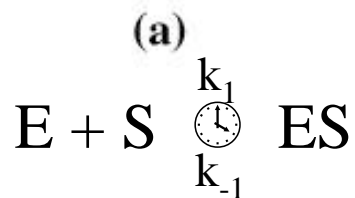
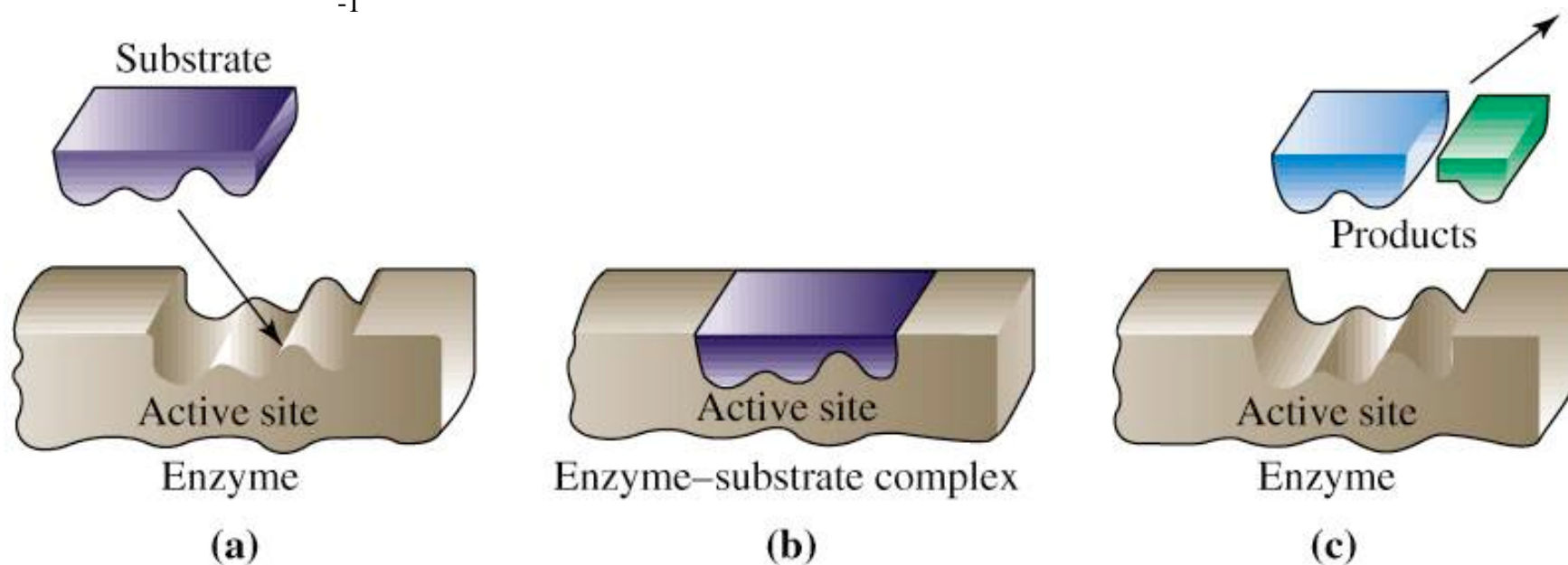


nh h ng c a ch t xúc tác



Xúc tác enzyme

- Xúc tác enzyme



Cách pha trộn và trạng thái chuyển tiếp

