

[www.mientayvn.com](http://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.

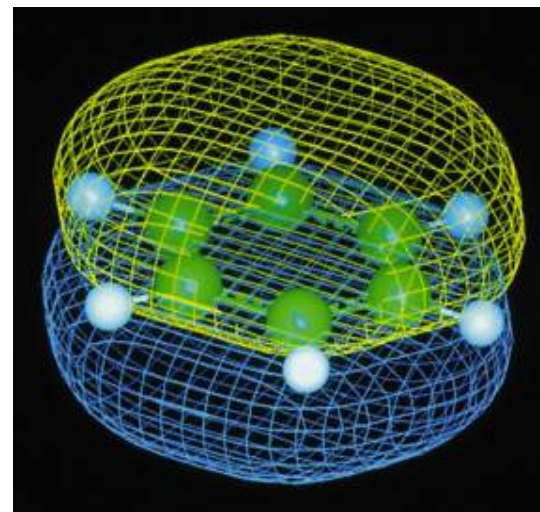
Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

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](http://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 biologically available. This process is essential for the synthesis of amino acids and nucleic acids.
- Nitrogen fixation is a slow process that occurs naturally in the soil and in the atmosphere. It is also carried out by certain bacteria and archaea. The rate of nitrogen fixation is influenced by factors such as soil pH, temperature, and the presence of certain nutrients.

- Theo nhiệt động hóa học, tiêu chuẩn xác lập chiều hướng biến đổi 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
  - + Nếu  $G_{TP} = 0$  hệ phản ứng đang ở trạng thái cân bằng.

## 2. Động học nghiên cứu các quá trình hóa học

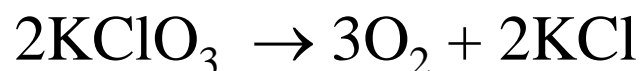
- Khảo sát quá trình diễn ra nhanh hay chậm
- Qua những giai đoạn trung gian nào
- Giai đoạn nào quyết định tốc độ phản ứng

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

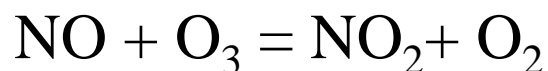
1. H s t l   ng c a ph n   ng hóa h c là s   ch s   nguyên t , phân t   và ion c a các ch t tham gia t   ng tác   c ghi trong ph   ng trình ph n   ng hóa h c



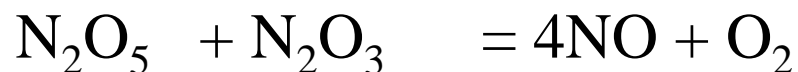
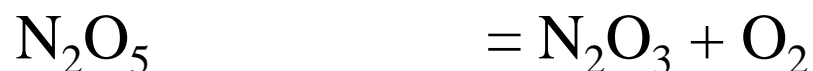
h s t l   ng t   ng ng c a  $\text{KClO}_3$ ,  $\text{O}_2$  và  $\text{KCl}$  là 2,3,2

### 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

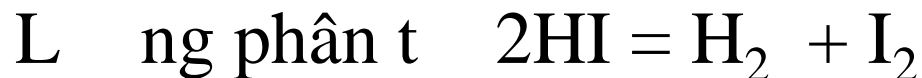
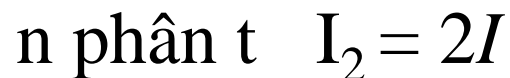


M i giai   o n g i là m t ph n   ng s   c p

### 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

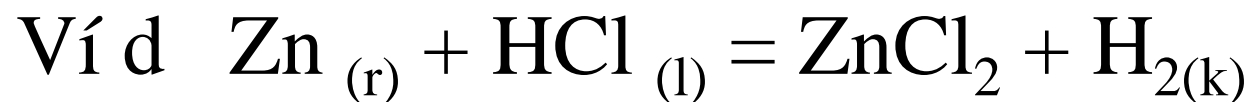


b. **Bậc phản ồng** là t ng số m u c u a n ồng ão ã ch a t ão ã trong bi u th c t c ph n ng. N u t ng s m b ng 1 thì g i là ph n ng b c 1...

- 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  $\text{NH}_3$  và  $\text{H}_2$  và  $\text{N}_2$ )
- Phản ứng dị thể là phản ứng xảy ra trong nhiều pha .





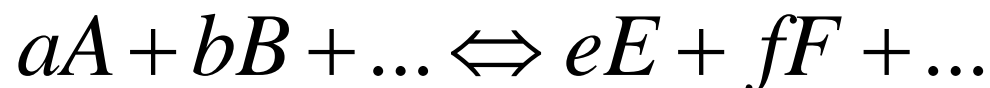
## ★ 7.2.2 Tốc độ phản ứng hóa học

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

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

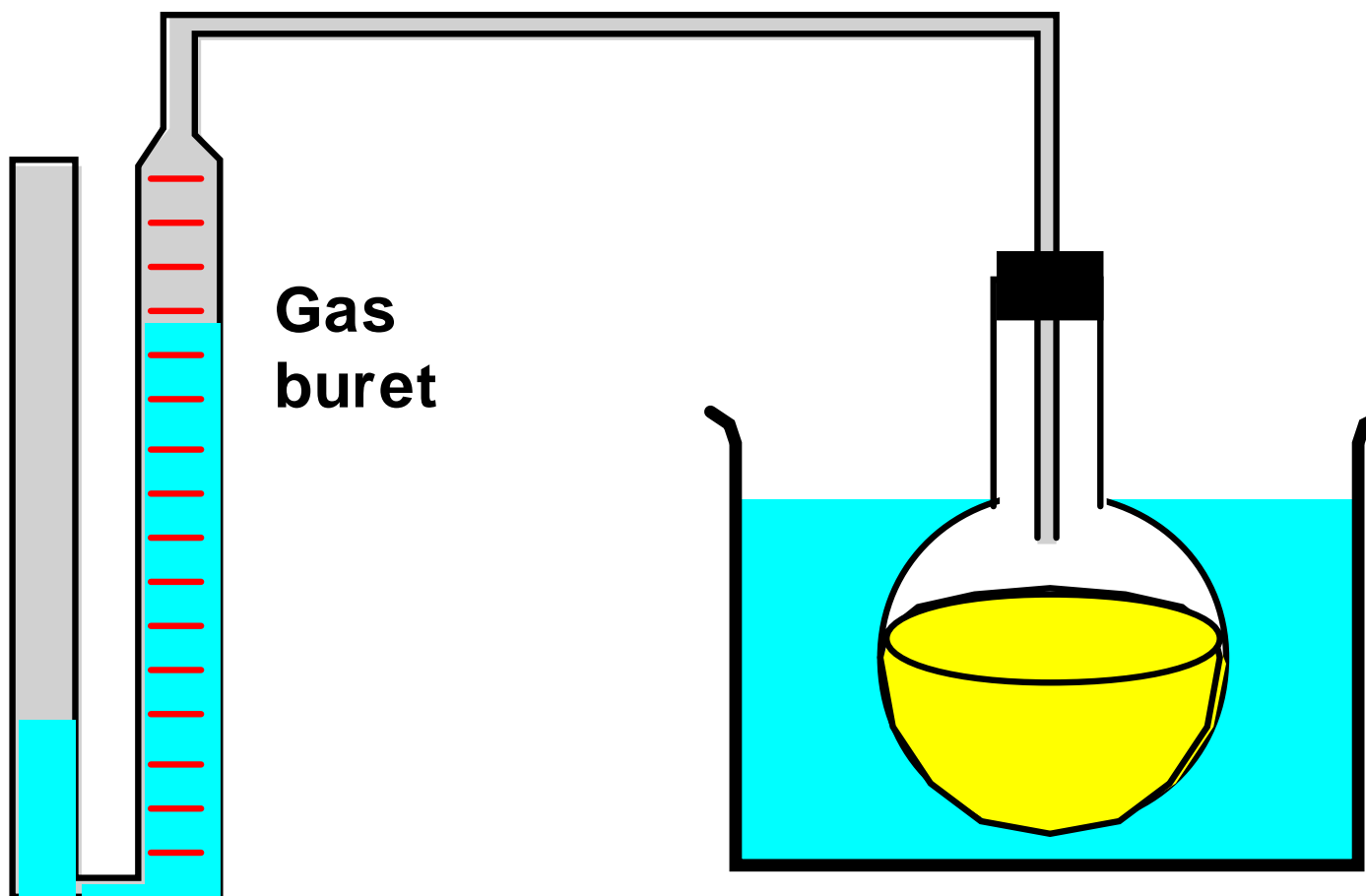
### 3. Phương pháp xác định thành phần

- Ví dụ xét phản ứng phân hủy  $\text{N}_2\text{O}_5$ .



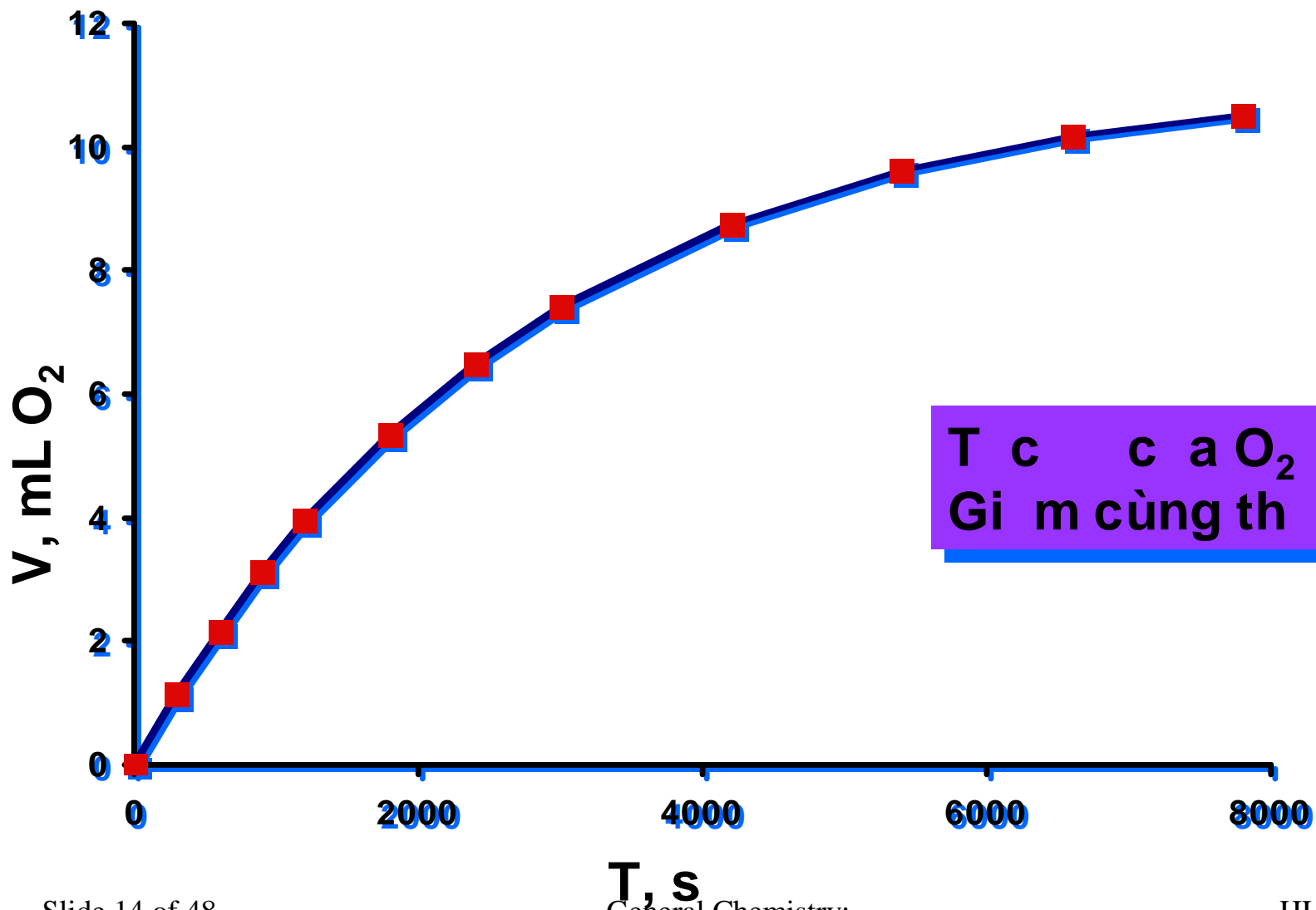
khi  $\text{N}_2\text{O}_5$  phân hủy,  $\text{N}_2\text{O}_4$  giữ lại trong dung dịch và  $\text{O}_2$  có thể thu được qua ngưng tụ.

# Víd



t (s)	Th tích O <sub>2</sub> , 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**



T c c a O<sub>2</sub>  
 Gi m cùng th i gian

## Tốc độ trung bình

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

T(s)	V O <sub>2</sub> *
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 tính phân rã

### 7.3.1 Ảnh hưởng của nhiệt độ

#### 1. Ảnh hưởng của nhiệt độ

Trong thực nghiệm, nhiệt độ không chỉ ảnh hưởng đến tốc độ phân rã mà còn ảnh hưởng đến các hằng số phân rã (kèm theo sự thích hợp)”.  
*Trong thực nghiệm, nhiệt độ không chỉ ảnh hưởng đến tốc độ phân rã mà còn ảnh hưởng đến các hằng số phân rã (kèm theo sự thích hợp)”.*

Phân rã trình toán mô tả quan hệ giữa các hằng số phân rã và các hằng số phân rã cũng là *phân rã trình tốc độ phân rã hay phân rã trình phân rã*



## 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

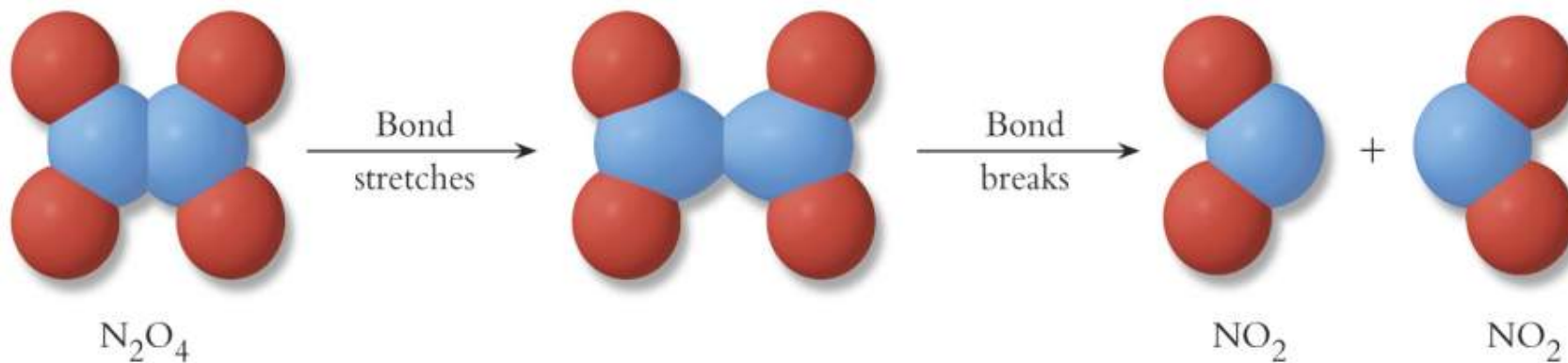
## Hệ thống K

- Ý nghĩa vật lý: Hệ thống K là pha rắn của các chất lỏng và khí
- K chỉ phụ thuộc vào thành phần và nhiệt độ, không phụ thuộc vào áp suất

# Quan hệ lo i ph n ng và pt ng h c

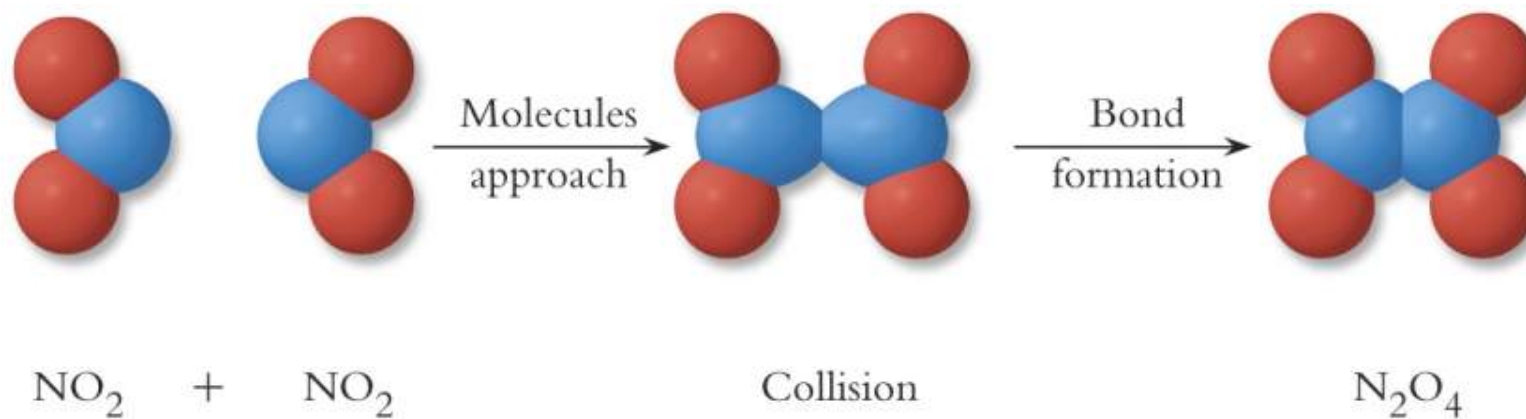
A	S n ph m	n phân t	$V = K[A]$
2 A	S n ph m	L ng phân t	$V = K[A]^2$
A + B	S n ph m	L ng phân t	$V = K[A][B]$
2A + B	S n ph m	Tam phân t	$V = K[A]^2 [B]$

## n phân t



$$V = k [\text{N}_2\text{O}_4]$$

## L ng phân t



Collision

$$V = k [\text{NO}_2]^2$$

## 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  $v = -d[A]/dt = k[A] \Rightarrow d[A]/[A] = -k dt$

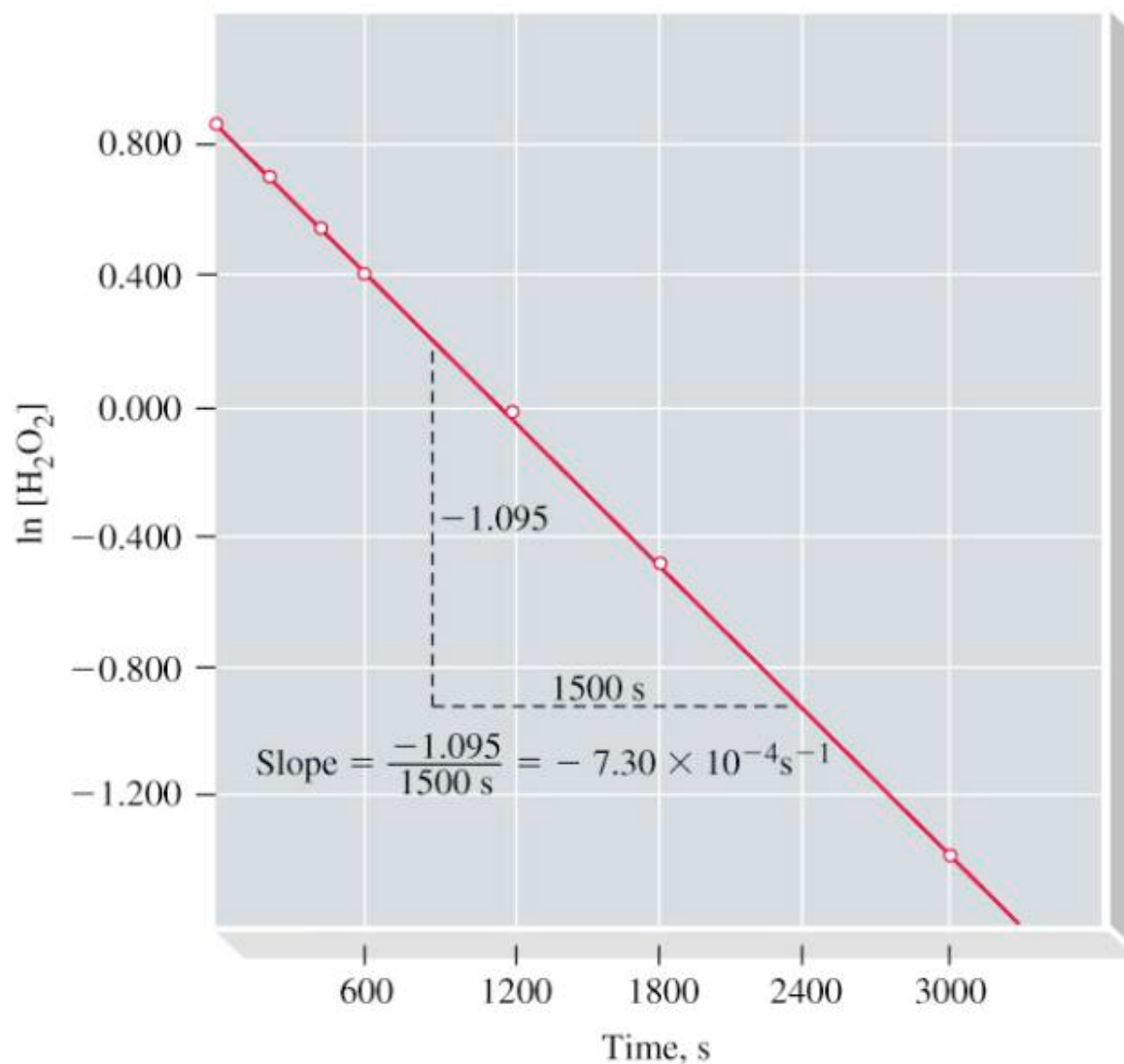
+ Lấy tích phân từ nồng độ  $[A]_0$  ngay tại  $t=0$  đến nồng độ  $[A]$  ngay tại thời gian  $t$  ta có

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

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

$x$  là nồng độ chất p/ b gi m i

# Ph n ng b c l



# Thời gian bán phân hủy

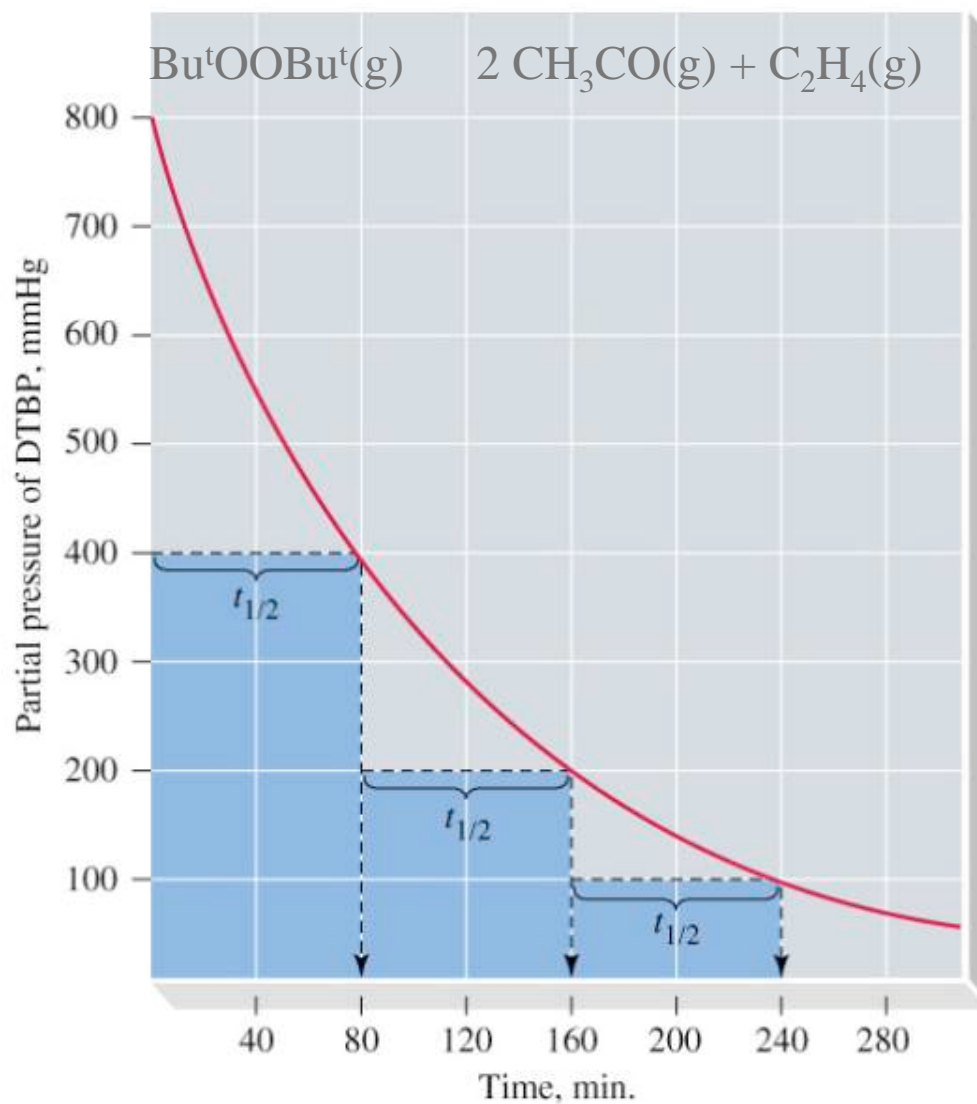
- $t_{1/2}$  thời gian bán phân hủy của phản ứng bậc 1 không phụ thuộc vào nồng độ, và tính nghịch đảo với hằng số tốc độ phản ứng

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

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

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

# Thời gian bán phân hủy





### 3. Hằng số tốc độ phản ứng bậc 2

#### a) Trường hợp $2A \rightarrow \text{sp}$

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

- Lấy tích phân xác định với  $[A]=[A]_0$  khi  $t=0$  và giới hạn là  $[A]$  tại thời gian  $t$ :  $[A]=[A]_0-x$  ta có

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

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

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

**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  $[A] = [A]_0 - x$ ,  $[B] = [B]_0 - x$

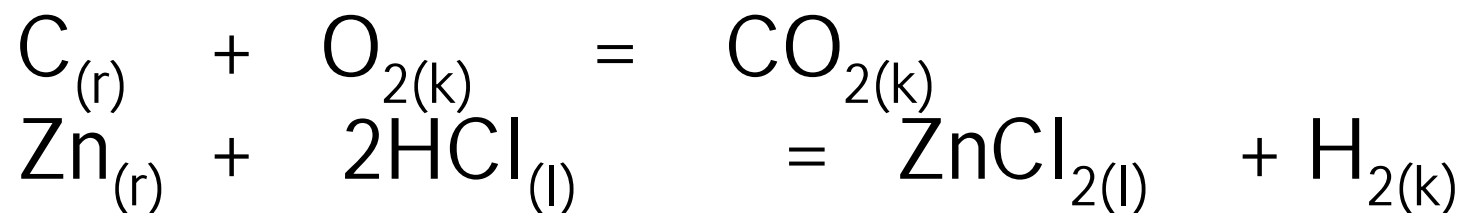
$$V = - \frac{d[A]}{dt} = - \frac{d[B]}{dt} = k[A][B]$$

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

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

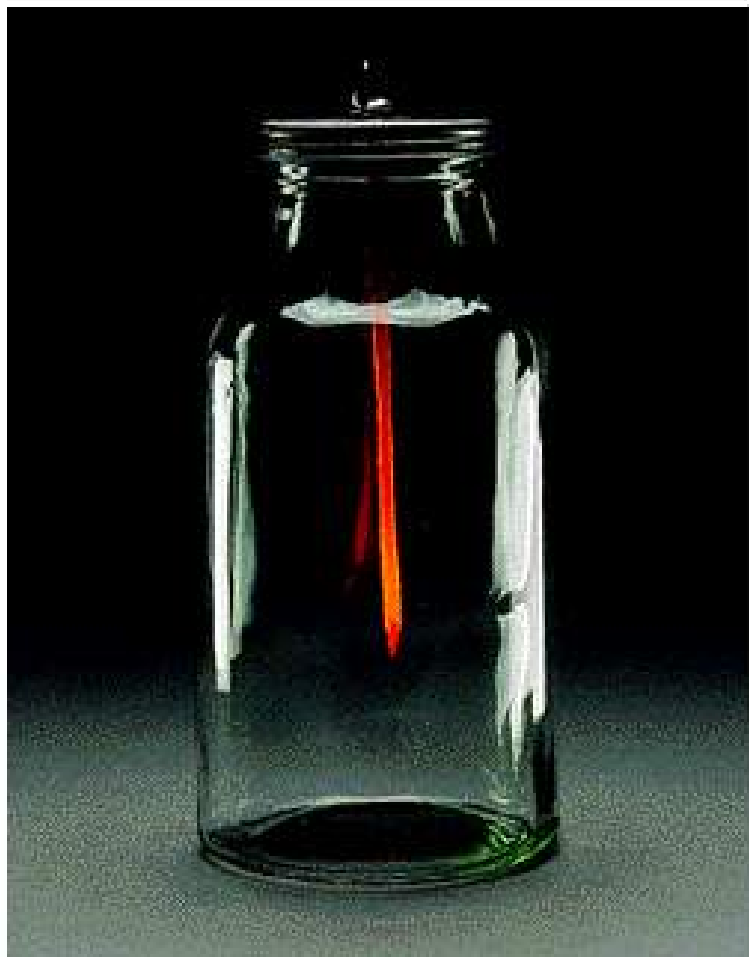
## 4. Ví dụ các phản ứng trong hệ đồng thể

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

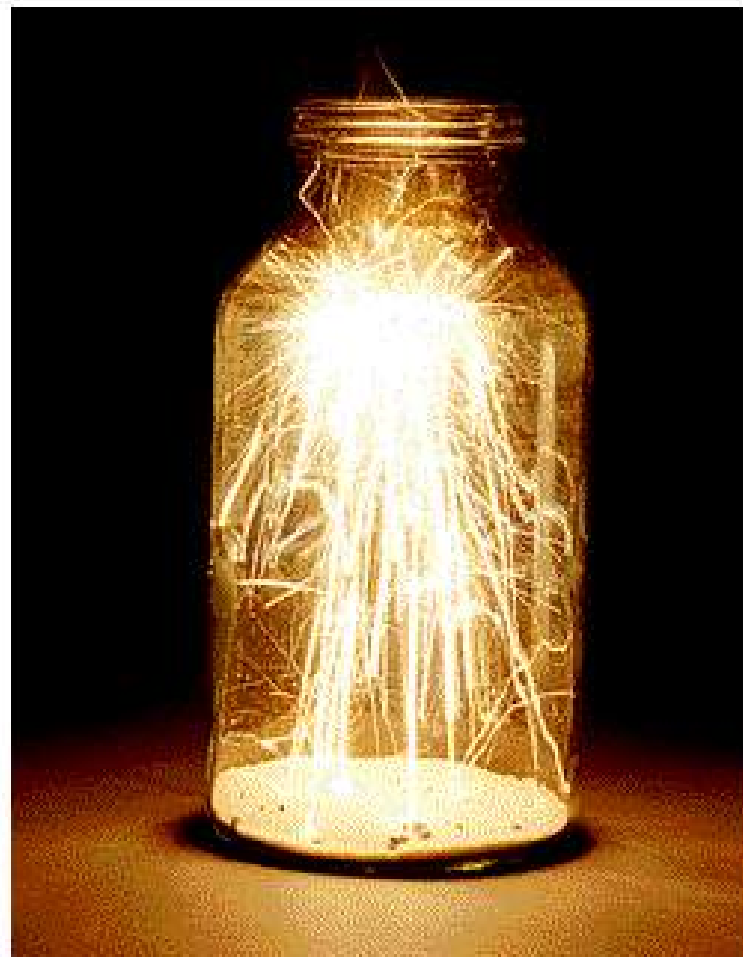


Tốc độ của các phản ứng đồng thể ngoài những yếu tố ảnh hưởng kể trên còn có các yếu tố khác như: diện tích tiếp xúc bề mặt, môi trường phản ứng, sự khuếch tán của sản phẩm và các chất tham gia phản ứng.

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 Ảnh hưởng của nhiệt độ

Theo Van't Hoft: Hằng số tốc độ của các phản ứng theo nhiệt độ, cứ nhiệt độ tăng 10 độ thì tốc độ tăng lên 2-4 lần

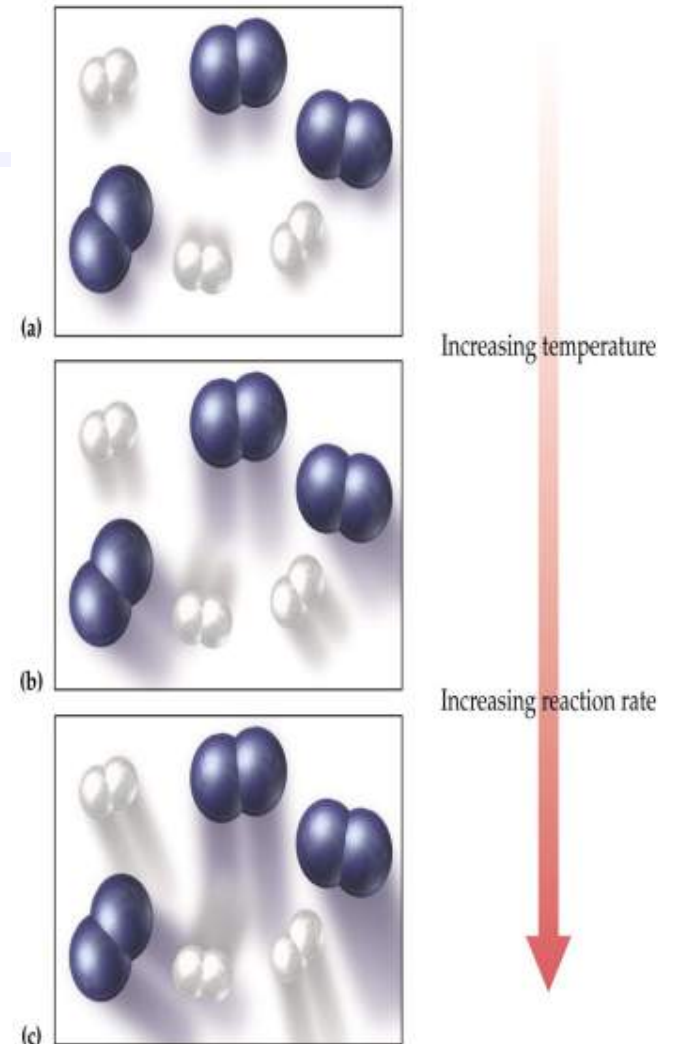
$$\frac{v_2}{v_1} = \gamma^{\frac{t_2 - t_1}{10}}$$

Trong đó:

$v_1$  là hằng số

$v_1$  là tốc độ phản ứng nhiệt độ  $t_1$

$v_2$  là tốc độ phản ứng nhiệt độ  $t_2$



## ★ 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<sup>-1</sup>)

R: H ng s khí lý t ng (cal.mol<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>)

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  $E^*$  nh càng 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

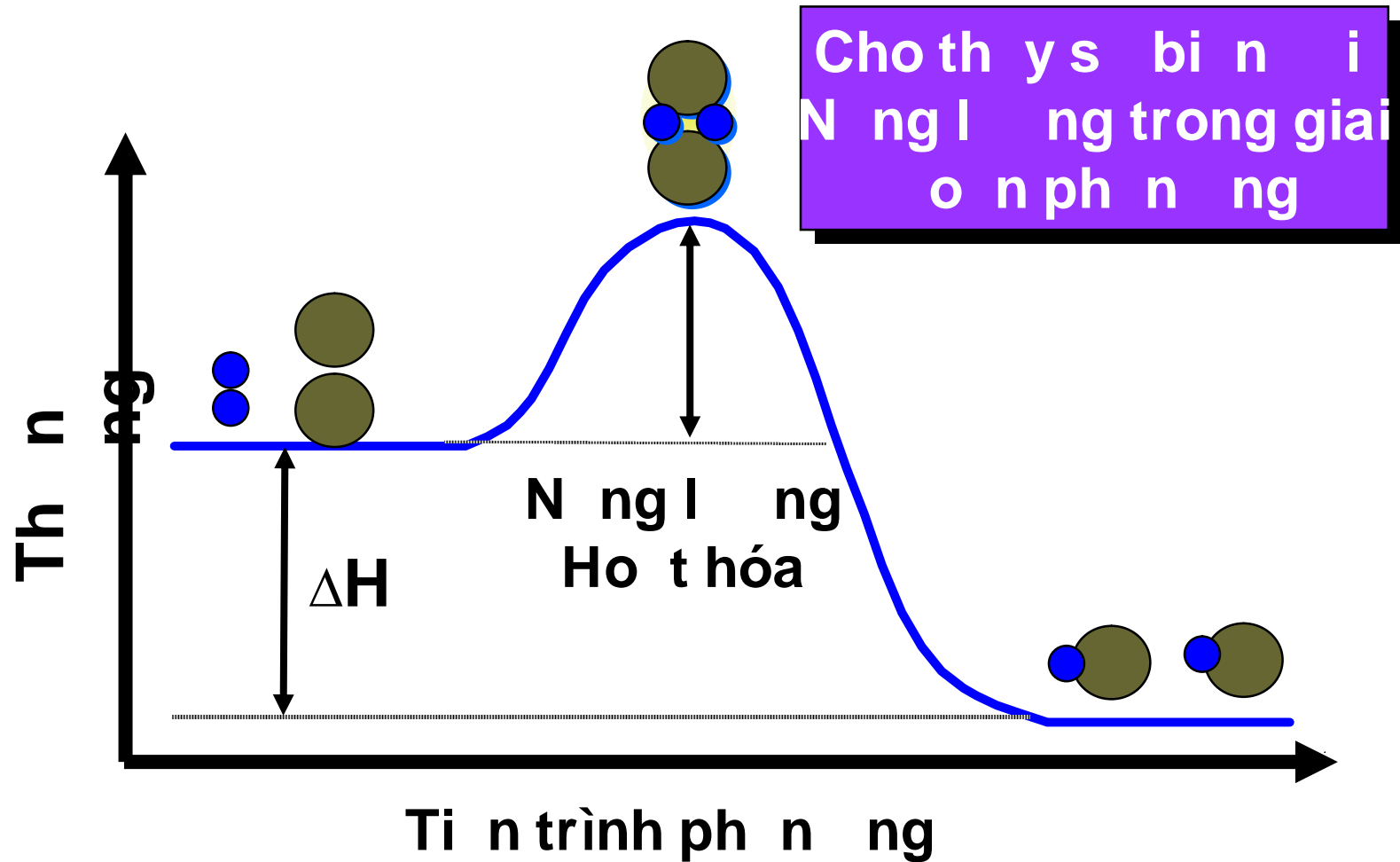
$$\lg \frac{k_2}{k_1} = \frac{E^*}{2,303R} \left[ \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right]$$

Năng lượng hoạt hóa  $E^*$

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



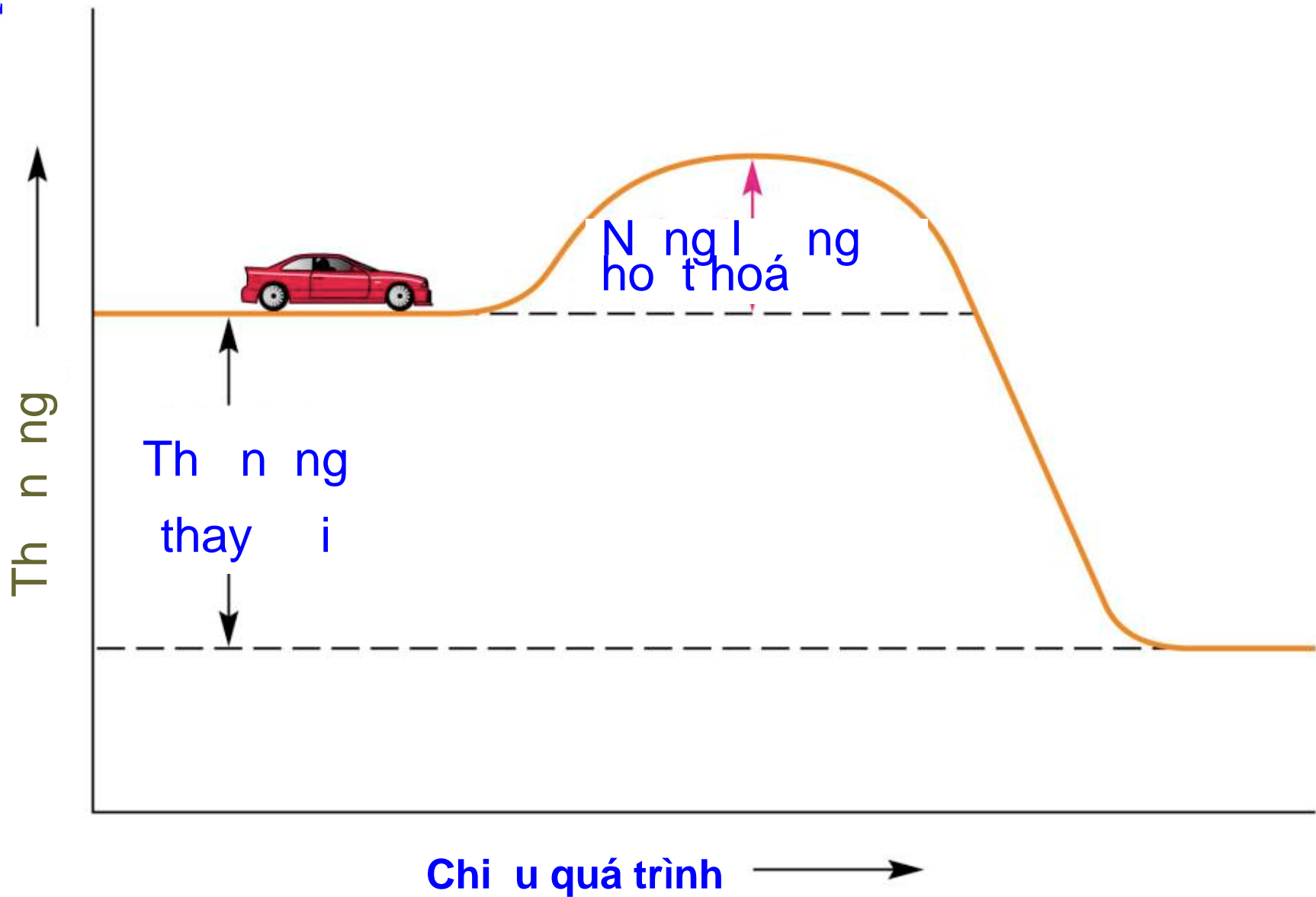
# Giản năng lượng của phản ứng



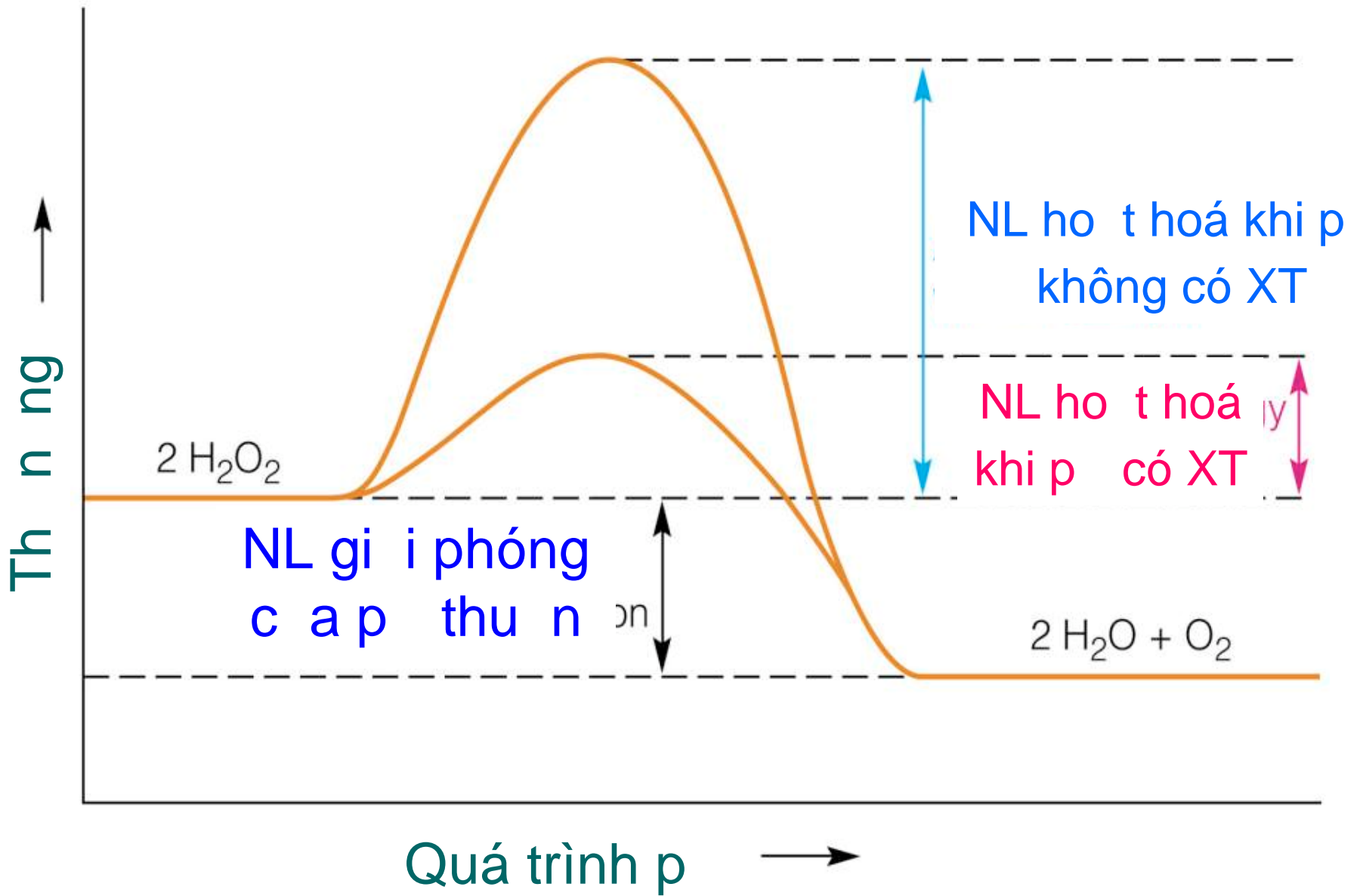
### ★ 7.3.3 nh h ng c a ch t xúc tác

- 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 xúc tác

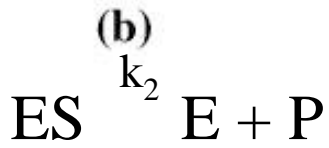
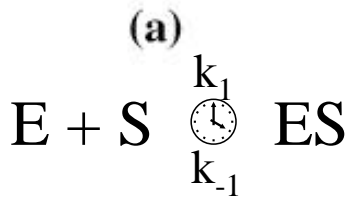
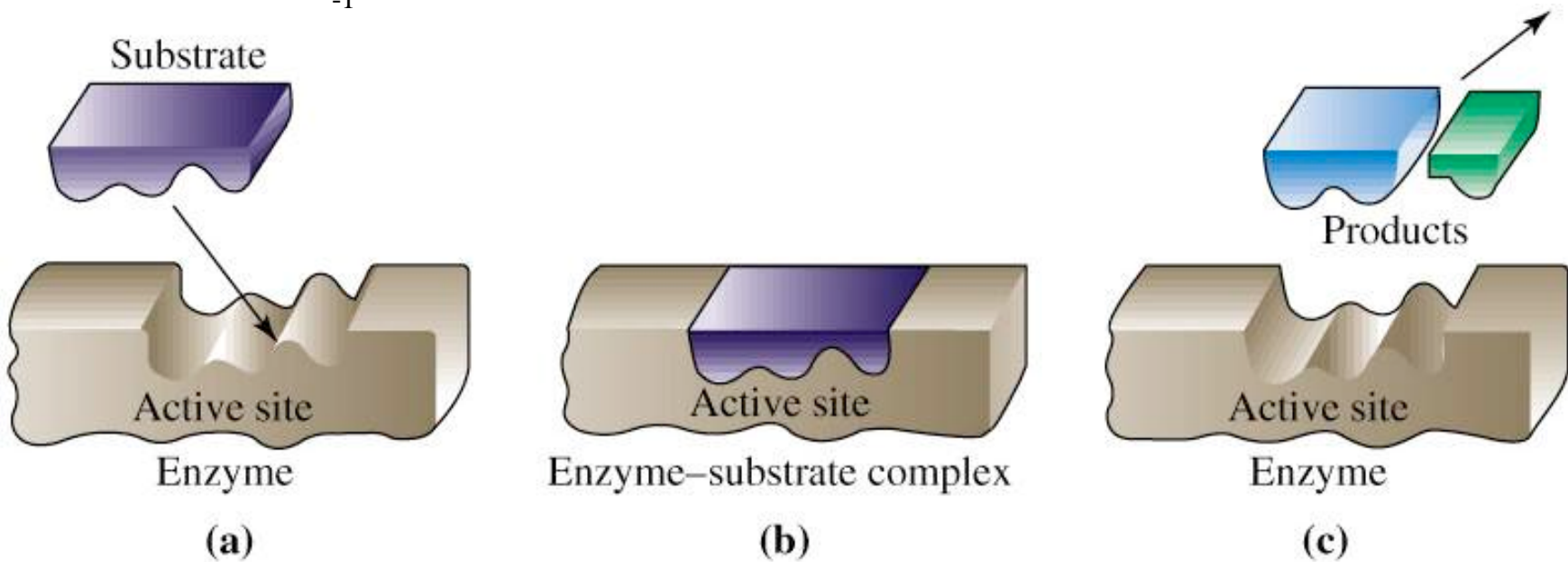


# nh h ng c a ch t xúc tác



# Xúc tác enzyme

- Xúc tác enzyme



# Cách pha trộn và trạng thái chuyển tiếp

