

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 HỌC NG

Chương 8: Cân bằng hoá học



Cân bằng hóa học

8.1 Phân ứng thuận nghịch và trạng thái cân bằng hóa học

8.2 Hằng số cân bằng và mối liên hệ giữa hằng số cân bằng và hằng số nhiệt động hóa học

8.3 Các yếu tố ảnh hưởng đến cân bằng hóa học

8.4 Bài tập

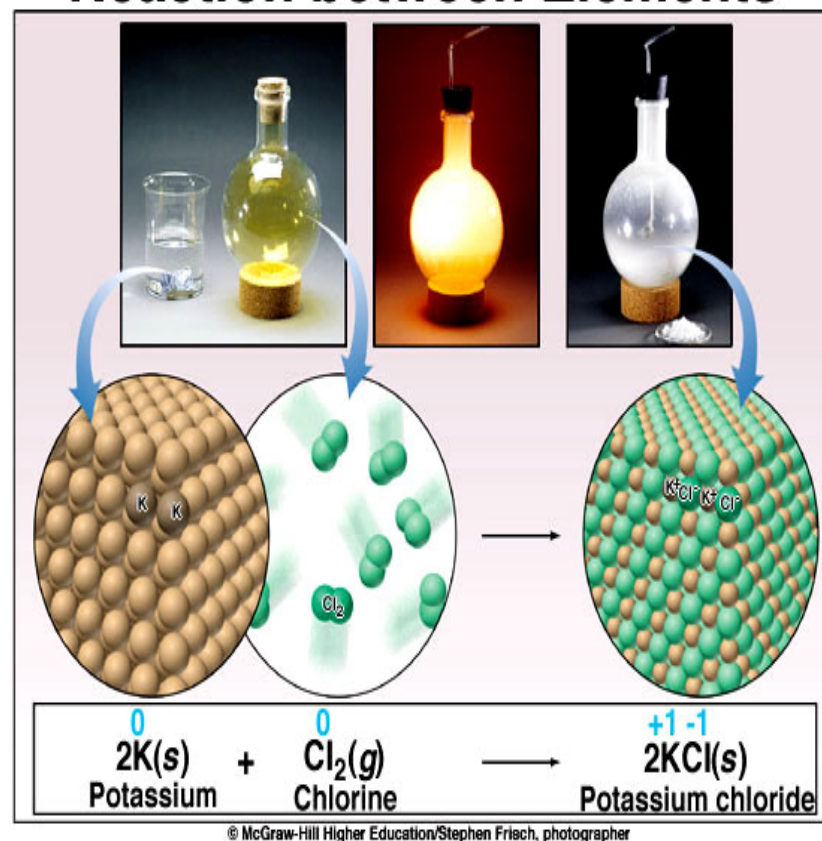
8.1 Phản ứng thu nhận nguyên chất và trạng thái cân bằng hóa học

8.1.1 Khái niệm về phản ứng thu nhận nguyên chất

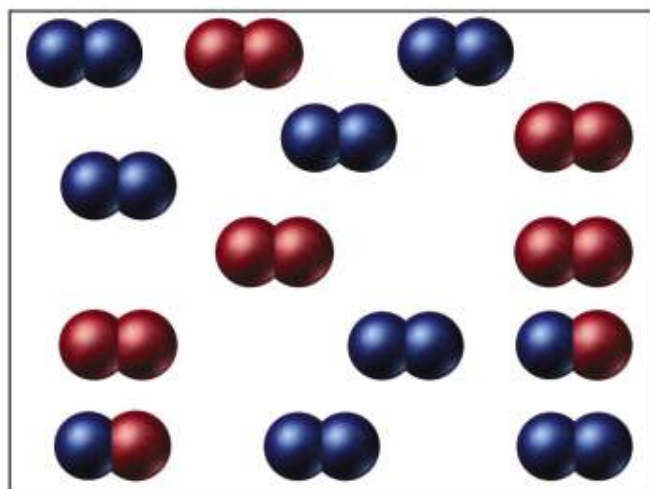
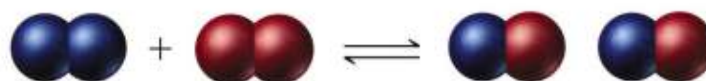
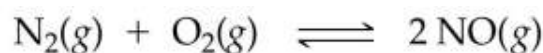
- Phản ứng 1 chiều là phản ứng hóa học xảy ra cho đến khi chất còn lại mất hết không đáng kể tính phản ứng. Khi viết phương trình phản ứng ta chỉ dùng dấu mũi tên một chiều để chỉ ra thay cho dấu bằng.

Martin S. Silberberg, *Chemistry: The Molecular Nature of Matter and Change*, 2nd Edition. Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. All rights reserved.

Three Views of a Combination Reaction between Elements



- Phản ứng thuận nghịch là phản ứng mà trong cùng một điều kiện phản ứng có thể xảy ra theo hai chiều ngược nhau. Do đó hình thức biểu diễn phản ứng còn chứa một mũi tên ngược chiều phản ứng. Khi viết phương trình phản ứng ta phải dùng 2 mũi tên ngược chiều \rightleftharpoons thay cho dấu bằng.



$$K = \frac{[\text{NO}]^2}{[\text{N}_2][\text{O}_2]} = \text{Small Number}$$

8.1.2 Trạng thái cân bằng hóa học

- Tất cả các phản ứng thuận nghịch đều diễn ra không hoàn toàn cùng mà chỉ diễn ra cho đến khi đạt được trạng thái cân bằng hóa học
- Ở trạng thái cân bằng hóa học, hàm lượng các chất phản ứng cũng như hàm lượng sản phẩm tồn tại không đổi



$$K_{eq} = \frac{[HI]^2}{[H_2][I_2]}$$

8.1.3 Hằng số cân bằng của phản ứng

a) Hằng số cân bằng

Cho phản ứng $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$

- trạng thái cân bằng: $v_t = v_n \Rightarrow$

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

$$K_t = \frac{k_t}{k_n} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Vì k_t và k_n là hằng số nhiệt động học nên K_c là hằng số nhiệt động học

Hằng số K_p là hằng số cân bằng

b) Định luật tác dụng khập luyến

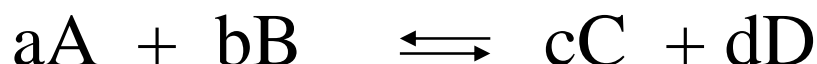
- Khi một hệ thống đạt trạng thái cân bằng, tích năng của nó phân bố thích hợp chia cho tích năng của các thành phần năng lượng thích hợp luôn luôn là một hằng số nhiệt động không đổi
- Lưu ý: Định luật tác dụng khập luyến chỉ áp dụng cho các phần năng lượng riêng, không áp dụng cho các phần năng lượng chung vì bản chất các phần năng lượng không bằng nhau các hệ các chất trong phần trình bày. Nhiệt động cân bằng hóa học thì định luật tác dụng khập luyến vẫn có áp dụng đúng

c) Các hằng số cân bằng K_C , K_P

+N u ph n n g trong dung d ch

$$K_c = \left[\frac{C_C^c C_D^d}{C_A^a C_B^b} \right]$$

+ N u ph n n g trong pha khí:



v i khí lý t n g $PV=nRT \rightarrow P=(n/V)RT=CRT$

ta thay n n g b n g áp su t riêng ph n các khí

$$K_P = \frac{p_C^c p_D^d}{p_A^a p_B^b} = \frac{(C_C RT)^c (C_D RT)^d}{(C_A RT)^a (C_B RT)^b} = \frac{C_C^c C_D^d}{C_A^a C_B^b} (RT)^{(c+d-a-b)}$$

V i khí lý t n g:

$$K_P = K_C (RT)^n \text{ trong ó } n = c+d-a-b$$

+ H n g s cân b n g K c a h d th ch t l n g và khí



$$K = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}(\text{khí})}}{[\text{H}_2\text{O}]_{l \text{ ng}}} \Rightarrow K[\text{H}_2\text{O}]_{l \text{ ng}} = P_{\text{H}_2\text{O}}$$

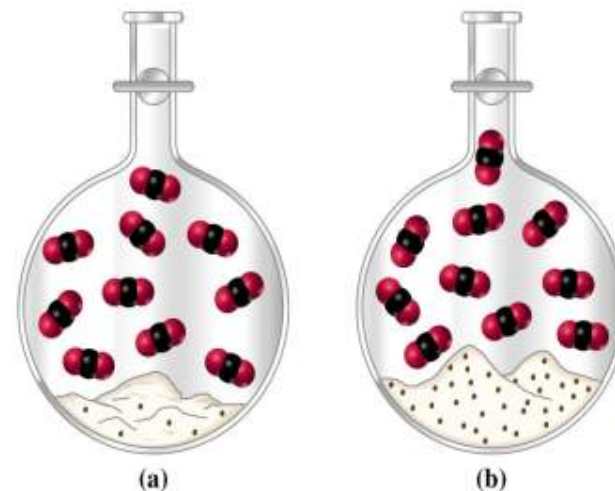
$$t \ K \cdot [\text{H}_2\text{O}]_{l \text{ ng}} = K_P \Rightarrow K_P = P_{\text{H}_2\text{O}(\text{khí})}$$

+ H n g s cân b n g K c a h d th ch t r n và khí



$$K_c = [\text{CO}_2] \quad K_P = P_{\text{CO}_2}(RT)$$

ì v ì các ph n n g d th cân b n g gi a pha r n và pha khí ho c gi a pha l n g và pha khí, h n g s cân b n g ch ph thu c vào pha khí



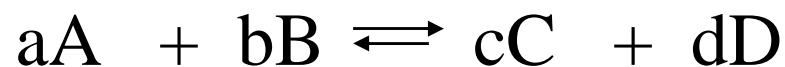
8.2 Hạng cân bằng và mức độ diễn ra của phản ứng hóa học

8.2.1 Trường hợp A,B,C,D đều là chất khí

8.2.2 Trường hợp phản ứng xảy ra trong dung dịch lỏng

8.2.3 Quan hệ giữa hằng số cân bằng với nhiệt độ và nhiệt phản ứng

8.2.1 Trạng thái cân bằng: A, B, C, D là chất khí



$$\Delta G_{TP} = \Delta G^0 + RT \ln \left[\frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} \right]$$

Khi phản ứng đạt đến trạng thái cân bằng $\Delta G_{TP} = 0$ và

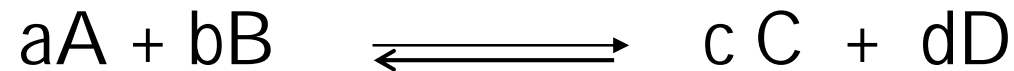
$$\Delta G_{TP}^0 = -RT \ln \left[\frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} \right] = -RT \ln K_P \quad \mathbf{R = 8.31 \text{ J/K}\cdot\text{mol}}$$

P: áp suất riêng phần các khí khi hệ ở trạng thái cân bằng
giả sử hệ ở áp suất cân bằng

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

- *K_p chỉ phụ thuộc vào nhiệt độ*

8.2.2 Trường hợp phản ứng diễn ra trong pha lỏng:



$$\Delta G_{TP} = \Delta G_{TP}^0 + RT \ln \left[\frac{C_C^c C_D^d}{C_A^a C_B^b} \right]$$

Khi phản ứng đạt đến trạng thái cân bằng $\Delta G_{TP} = 0$

$$\Delta G_{TP}^0 = - RT \ln \left[\frac{C_C^c C_D^d}{C_A^a C_B^b} \right] = - RT \ln K_c$$

Ph ng trình ng nhi t Van't Hoff:

$$\Delta G_{TP} = \Delta G_{TP}^0 + RT \ln \left[\frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} \right] \quad (1)$$

Do tr ng thái cân b ng $\Delta G_{TP} = 0$ nên ta có

$$\Delta G_{TP}^0 = -RT \ln \left[\frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} \right] = -RT \ln K_p \quad (2)$$

T (1) và (2) ta có:
$$\Delta G_{TP} = -RT \left[\ln K_p - \ln \frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} \right]$$

Pt ng nhi t Van't Hoff

Theo ph ản ứng trình độ nhiệt Van't Hoff của phản ứng hóa học

- Trình độ phản ứng đi n ra pha khí:

$$\Delta G_{TP} = \Delta G^0_{TP} + RT \ln \left[\frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} \right]$$

Ôl trạng thái cân bằng $\Delta G_{TP} = 0$ và

$$\Delta G_{TP}^0 = -RT \ln \left[\frac{p_C^c p_D^d}{p_A^a p_B^b} \right] = -RT \ln K_p$$

$$\text{Hay } \Delta G_{TP}^0 = -2,303RT \lg K_p$$

$$\Delta G_{TP} = -RT \left[\ln K_p - \ln \frac{p_C^c p_D^d}{p_A^a p_B^b} \right] \quad \text{t } K' = \frac{p_C^c p_D^d}{p_A^a p_B^b}$$

- Nếu $K' < K_p$ thì $\Delta G_{TP} < 0$ phản ứng diễn ra theo chiều thuận
- Nếu $K' > K_p$ thì $\Delta G > 0$ phản ứng diễn ra theo chiều nghịch
- Nếu $K' = K_p$ thì $\Delta G_{TP} = 0$ hệ ở trạng thái cân bằng

8.2.3 Mối quan hệ giữa hằng số cân bằng K và nhiệt độ và nhiệt phản ứng

- $G^\circ = -RT \ln K_p$ $\ln K_p = -G^\circ / RT$
- ta cũng có $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$
- Từ đó ta rút ra biểu thức: $\ln K_p = -\frac{\Delta H^\circ}{RT} + \frac{\Delta S^\circ}{R}$

+V i $\Delta H^\circ < 0$ khi nhiệt độ tăng K_p giảm

+V i $\Delta H^\circ > 0$ khi nhiệt độ tăng K_p tăng

- Nếu K_1 và K_2 là hằng số cân bằng ở nhiệt độ T_1 và T_2

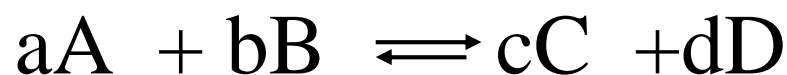
Ta có

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

8.3 Sự dịch chuyển cân bằng hóa học và nguyên lý Le Chatelier

- Nguyên lý Le Chatelier và sự chuyển dịch cân bằng:

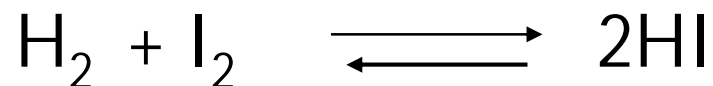
Trong một hệ ở trạng thái cân bằng, nếu ta thay đổi bất kỳ một yếu tố nào xác định vị trí cân bằng (p , T , C) thì cân bằng sẽ dịch chuyển theo chiều ngược lại sự thay đổi đó.



Khi hệ ở trạng thái cân bằng:

$$\Delta G_{TP} = -RT \left[\ln K_p - \ln \frac{p_C^c p_D^d}{p_A^a p_B^b} \right] = 0$$

8.3.1 nh h ng c a n ng t i chuy n d ch cân b ng

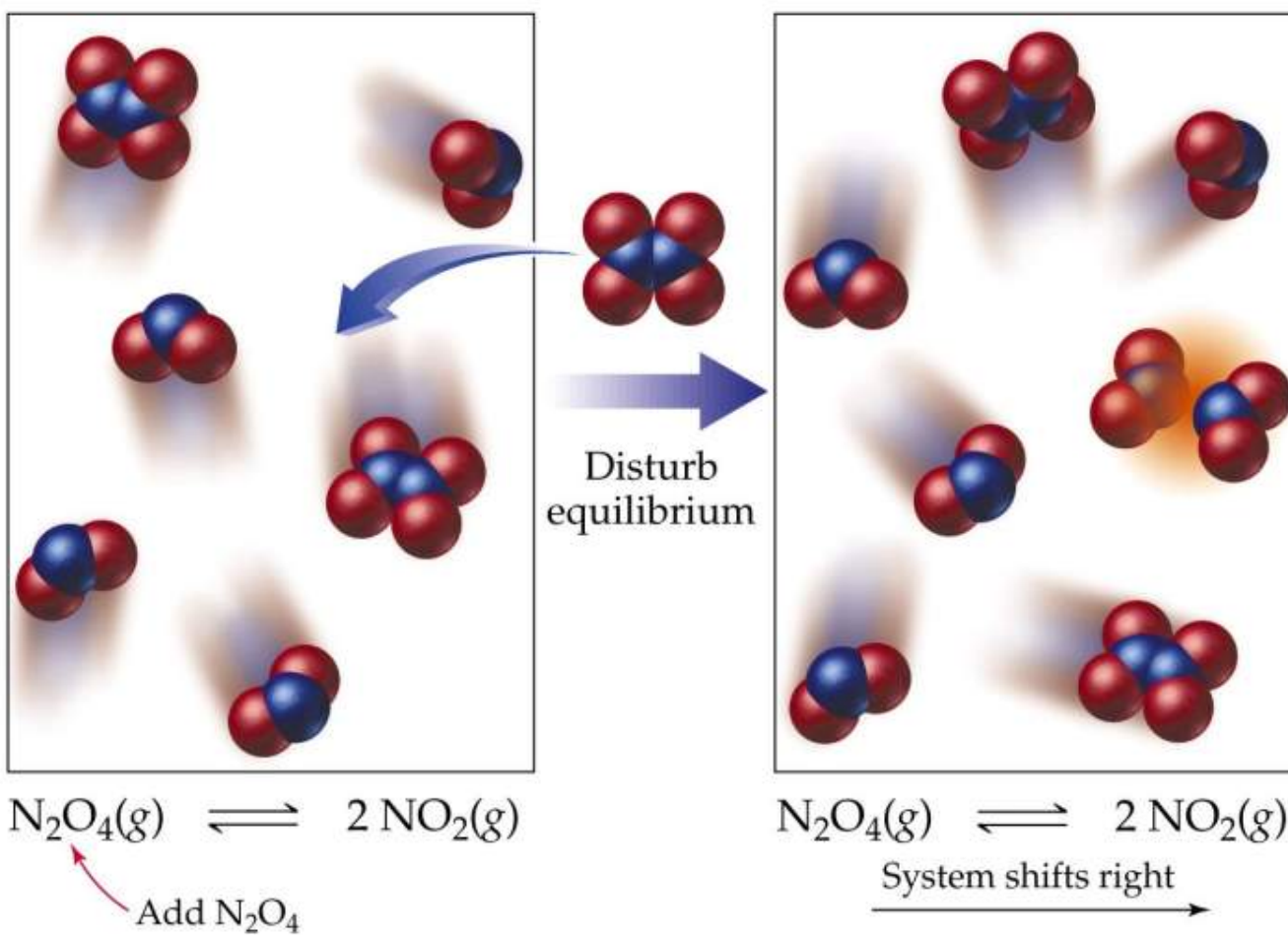
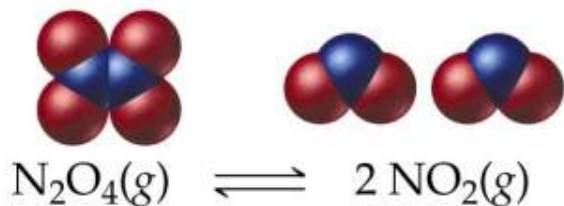


tr ng thái cân b ng t c ph n ng thu n

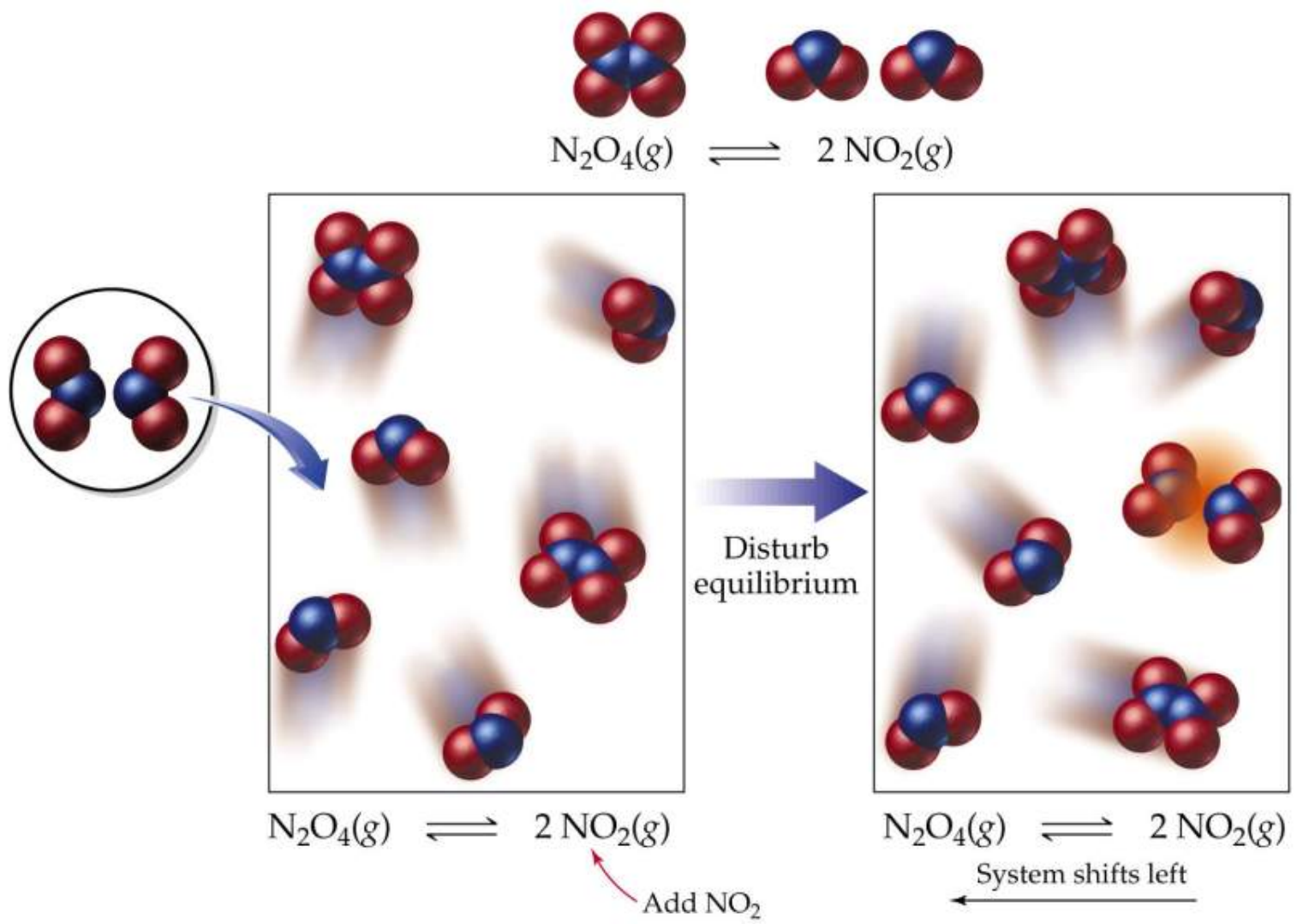
$$v_t = k_t \text{C}_{\text{H}_2} \text{C}_{\text{I}_2}$$

N u t ng n ng H_2 lên thì t c ph n ng thu n s t ng lên

nh h ng c a n ng t i chuy n d ch cân b ng



nh h ng c a n ng t i chuy n d ch cân b ng



8.3.2 Ảnh hưởng của nhiệt độ tới chuyển dịch cân bằng

$$\ln K_{cb} = -\frac{\Delta H}{RT} + \frac{\Delta S}{R}$$

- Trường hợp $\Delta H > 0$ phản ứng thu nhiệt,

+ Khi T tăng thì K_{cb} tăng, có nghĩa khi tăng nhiệt độ K_t tăng mạnh hơn K_n nghĩa là $v_t > v_n$ và cân bằng chuyển dịch theo chiều thuận tức chuyển dịch theo chiều có phản ứng thu nhiệt.

+ Khi giảm nhiệt độ nghĩa K_{cb} giảm nghĩa là cân bằng chuyển dịch theo chiều nghịch tức chiều có phản ứng phát nhiệt.

-Trở nên hấp thụ $\Delta H < 0$: phản ứng tỏa nhiệt ,

+ Khi T tăng, hằng số

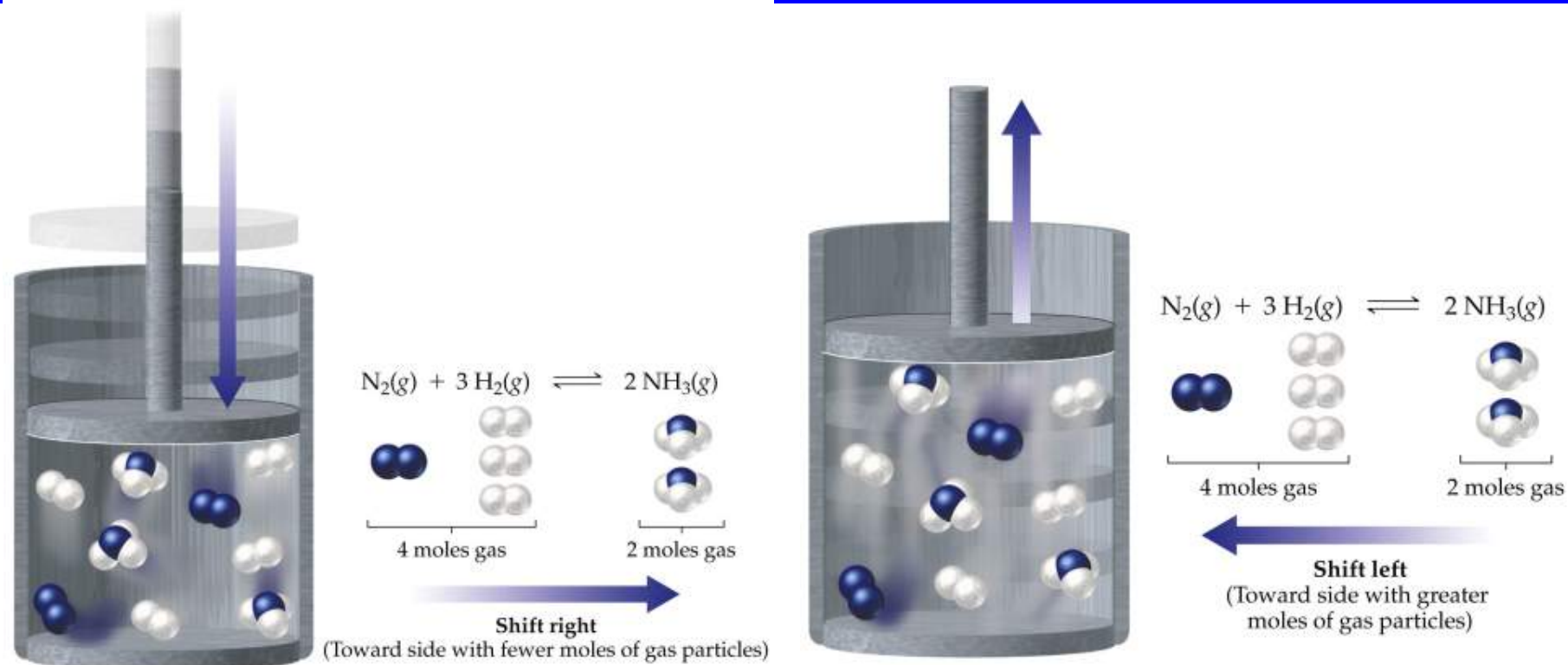
$$K_{cb} = \frac{k_t}{k_n} \downarrow$$

có nghĩa là khi T \uparrow , K_n tăng mạnh hơn K_t , và $V_n > V_t$
và cân bằng chuyển dịch theo chiều nghịch chiều chiều của
phản ứng thu nhiệt.

+ Khi giảm nhiệt độ K_{cb} tăng, nghĩa là cân bằng chuyển dịch
theo chiều phản ứng tỏa nhiệt đó là chiều thu nhiệt.

- *Vậy khi một hệ đang ở trạng thái cân bằng nếu ta tăng nhiệt độ của hệ cân bằng sẽ chuyển dịch về phía phản ứng thu nhiệt và ngược lại.*

8.3.3 Ảnh hưởng của áp suất tới sự chuyển dịch cân bằng



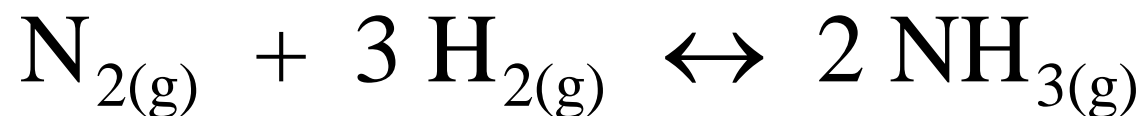
Khi tăng áp suất của hệ cân bằng, cân bằng sẽ dịch chuyển theo chiều giảm số phân tử khí của hệ.

8.3.3 nh h ng c a xúc tác

- Giảm năng lượng hoạt hóa
- Do vậy làm giảm thời gian đạt cân bằng
- Không thay đổi thành phần hỗn hợp phản ứng
thái cân bằng

Bài tập áp dụng:

- Tính xác định 0.80 mole N_2 và 0.90 mole H_2 trong bình 1 l. Khi cân bằng 0.20 mole NH_3 xuất hiện. Tính K_c .



Ban u

0.80 M 0.90 M 0

Thay i

-0.10 M -0.30 M +0.20 M

Cân b ng

0.70 M 0.60 M 0.20 M

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2][\text{H}_2]^3} = \frac{(0.20)^2}{(0.70)(0.60)^3} = 0.26$$