

www.mientayvn.com

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

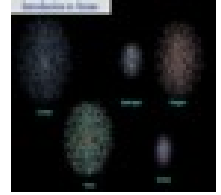
Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

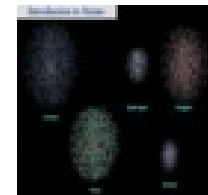
Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

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

Trao đổi trực tuyến tại:

www.mientayvn.com/chat_box_hoa.html





ĐỘNG HOÁ HỌC

Nội Dung Chương Trình:

- 1- Vận tốc phản ứng, phương trình động học, hằng số vận tốc phản ứng.
- 2- Phản ứng, nồng độ hoạt hoá, phương trình Arrhenius.
- 3- Phương trình phản ứng bậc nhất, bậc hai.
- 4- Thời gian bán rã (half-life).
- 5- Ảnh hưởng của nhiệt độ, nồng độ vận tốc phản ứng.
- 6- Cơ chế phản ứng.
- 7- Ảnh hưởng của xúc tác vận tốc phản ứng.



ĐỘNG HOÁ HỌC

Động hoá học (kinetics = from a Greek stem meaning “to move”)

- Nghiên cứu vận tốc phản ứng, định luật xác định các yếu tố ảnh hưởng.

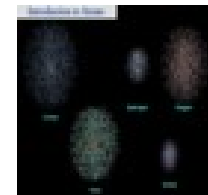
phản ứng xảy ra

- Phân tử va chạm có hiệu quả, năng lượng hoạt động liên kết mới hình thành.

- Va chạm hiệu quả theo ứng dụng.

Vận tốc các xác định vận tốc các giai đoạn phản ứng

- Chu kỳ các giai đoạn phản ứng cũng là các phản ứng.

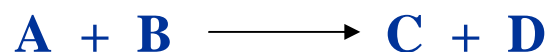


1- VẬN TỐC PHẢN ỨNG

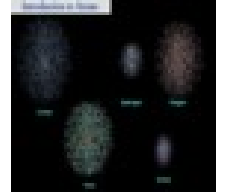
1.1 Định nghĩa:

- là lượng cho biết biến đổi nhanh, chậm của phản ứng.
- xác định bằng thực nghiệm đo giảm số mol chất u hoặc tăng số mol sản phẩm trong một đơn vị thời gian.

1.2 Phương trình định lượng phản ứng



$$V_{tb} = - \frac{[A]}{t} = - \frac{[B]}{t} = \frac{[C]}{t} = \frac{[D]}{t} \longrightarrow V = - \frac{d[A]}{dt}$$



1- VẬN TỐC PHẢN ỨNG

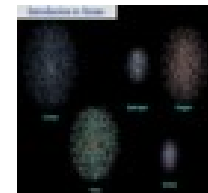
1.3 Nghiên cứu thực nghiệm định lượng

$$V = k \times [A]^m \times [B]^n$$

Định luật tác động khối lượng: các số mũ m, n trong phương trình vận tốc trên **không liên quan** đến các hệ số cân bằng trong phương trình phản ứng.

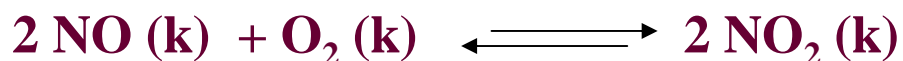


Va ch m hi u qu theo úng h ãng.



2- BẬC PHẢN ỨNG

Thí nghiệm	Vận tốc (M. s ⁻¹)	Nồng độ các chất ban đầu phản ứng	
		[NO]	[O ₂]
Thí nghiệm 1	1,2 x 10 ⁻⁸	0,10	0,10
Thí nghiệm 2	2,4 x 10 ⁻⁸	0,10	0,20
Thí nghiệm 3	1,08 x 10 ⁻⁷	0,30	0,10



Xác định bậc riêng phần của O₂, xét 2 thí nghiệm 1 và 2

$2^x = 2$ (nồng độ gấp đôi thì tốc độ phản ứng = vận tốc gấp đôi)

Xác định bậc riêng phần của NO, xét 2 thí nghiệm 1 và 3

$3^x = 9$ (nồng độ gấp ba thì tốc độ phản ứng = vận tốc gấp chín)



2- BẬC PHẢN ỨNG

1.1 Khái niệm bậc riêng phần, bậc toàn phần

Tốc độ thực nghiệm a n k t q u

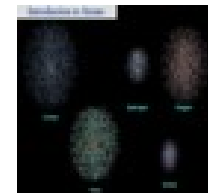
$$V = k \times [\text{NO}]^2 \times [\text{O}_2]^1 \quad \text{Bậc toàn phần là } 2 + 1 = 3$$

Xác định hằng số tốc độ k, chất xúc tác k t q u thí nghiệm t b n g t r ê n

$$k = \frac{V}{[\text{NO}]^2 [\text{O}_2]^1} \quad k \text{ không phụ thuộc n g}$$

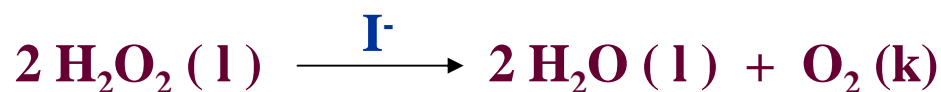
$$k = 1,2 \times 10^{-5} \text{ M}^{-2} \text{ s}^{-1} \quad k \text{ phụ thuộc nhi t}$$

$$V = 1,2 \times 10^{-5} \text{ M}^{-2} \text{ s}^{-1} \times [\text{NO}]^2 \times [\text{O}_2]^1$$



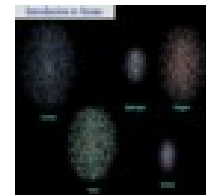
2- BẬC PHẢN ỨNG

Thứ tự thí nghiệm	Vận tốc (M. s ⁻¹)	Nồng độ các chất ban đầu phản ứng	
		[H ₂ O ₂] (M)	[I ⁻] (M)
Thí nghiệm 1	2,3 x 10 ⁷	1,0 x 10 ⁻²	2,0 x 10 ⁻³
Thí nghiệm 2	4,6 x 10 ⁷	2,0 x 10 ⁻²	2,0 x 10 ⁻³
Thí nghiệm 3	6,9 x 10 ⁷	3,0 x 10 ⁻²	2,0 x 10 ⁻³
Thí nghiệm 4	4,6 x 10 ⁷	1,0 x 10 ⁻²	4,0 x 10 ⁻³
Thí nghiệm 5	6,9 x 10 ⁷	1,0 x 10 ⁻²	6,0 x 10 ⁻³



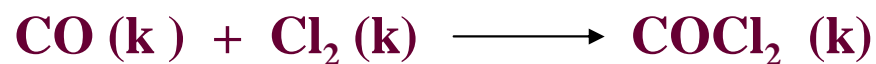
$2^x = 2$ (nồng độ gấp đôi lưu thừa bậc riêng phần = vận tốc gấp đôi)

$$V = k \times [\text{H}_2\text{O}_2]^1 \times [\text{I}^-]^1$$



2- BẬC PHẢN ỨNG

Phản ứng tạo phosgen

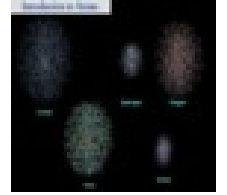


Thức nghiệm cho biết

$$V = k \times [\text{CO}]^1 \times [\text{Cl}_2]^{3/2}$$

HOÁ HỌC CÔNG NGHỆ

IH CYD CTP.H CHÍ MINH

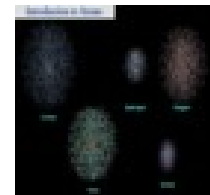


NGHÓA HỌC - Y - DƯỢC - RHM

TS. NGUYỄN HOÀI

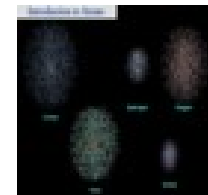
HOÁ HỌC CÔNG NGHỆ

I H C Y D C T P . H C H Í M I N H



NG HÓA HỌC - Y - D C - RHM

TS. NG V N HOÀI



3-NĂNG LƯỢNG HOẠT HOÁ

phản ứng xảy ra

- Phân tử và chất có hiều qu, không phải tất cả phân tử và chất hiều qu.
- Chất theo ứng dụng.
- Năng lượng tạo ra từ liên kết mibun phân tử năng lượng gây liên kết.
- Trước khi SM chuyển thành P, năng lượng do các phân tử qua A.E.

Tại sao phản ứng có năng lượng hoạt hoá (A.E.)?

- Phân tử và chất, sự sắp xếp trật tự làm phân tử gần nhau, ứng dụng, làm tăng năng lượng do các phân tử, làm giảm entropy.



3-NĂNG LƯỢNG HOẠT HOÁ

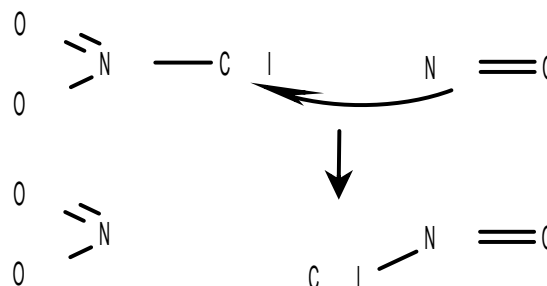
- Năng lượng thi u mà SM c n ph i có thêm so v i tr ng thái ban u t o ph n ng hoá h c c g i n n g l n g ho t hoá.

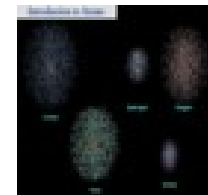
- T i tr ng thái n n g l n g cao c a SM g i là **ph c ho t hoá**.

- N n g l n g ho t hoá càng cao, v n t c càng ch m, k càng nh .

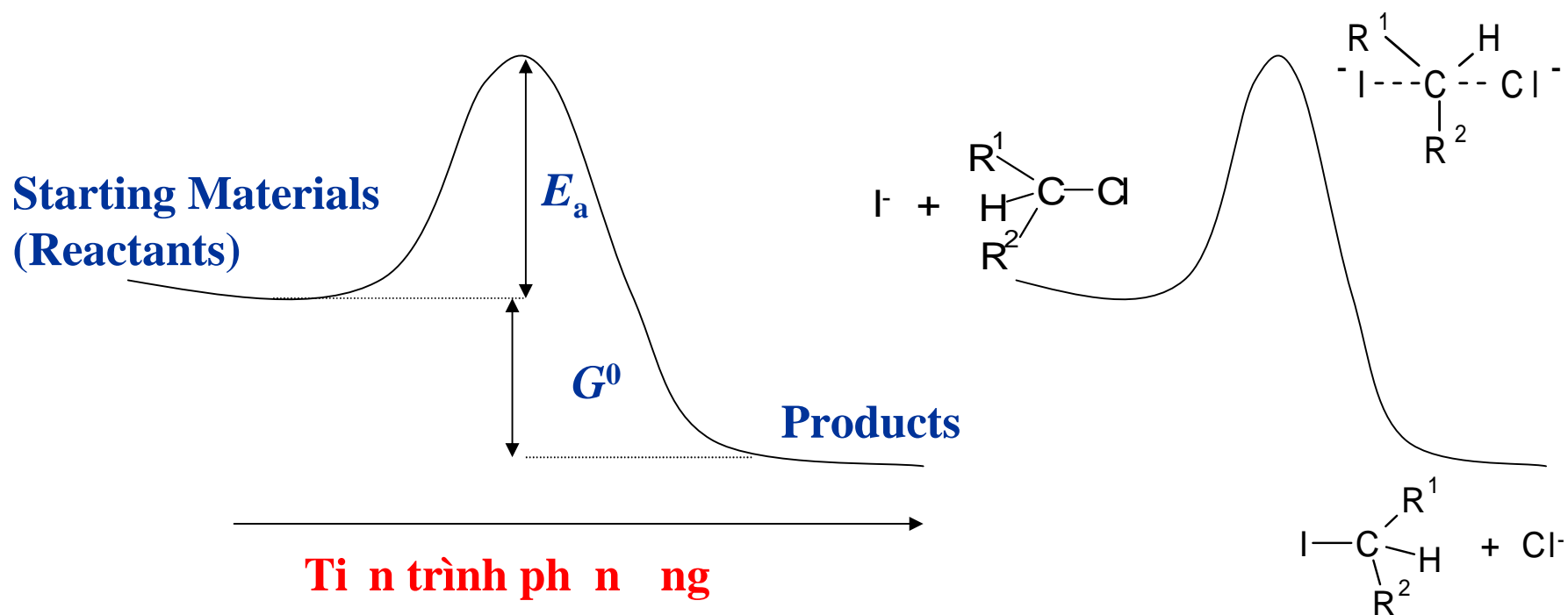
- **Phân t s** c a ph n n g là s phân t SM c n t o ph c ho t hoá.

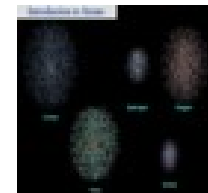
- Va ch m theo úng h n g.



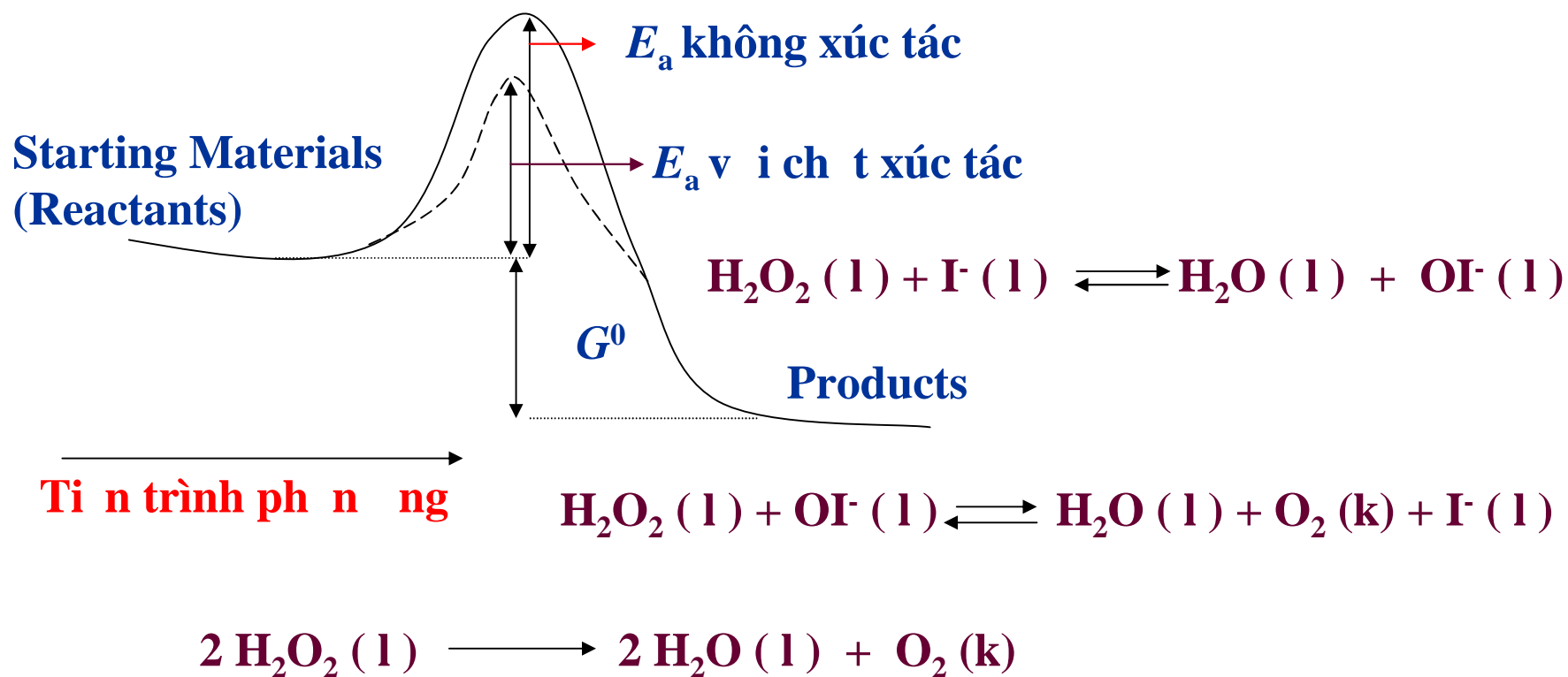


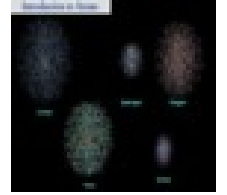
3-NĂNG LƯỢNG HOẠT HOÁ





3-NĂNG LƯỢNG HOẠT HOÁ





4- PHƯƠNG TRÌNH ARRHENIUS

Vận tốc phản ứng thu được khi nhiệt độ tăng các phân tử chuyển động nhanh và va chạm nhiều, tăng năng lượng. Vì thế, phản ứng hóa học vượt qua hàng rào năng lượng hoạt hóa càng tăng theo nhiệt độ.

Trong 1889, **Svante Arrhenius** đã đưa ra công thức toán học mô tả mối liên hệ giữa T và k

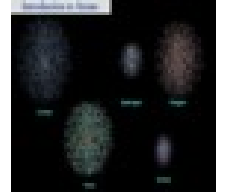
$$k = A \times e^{-E_a/RT}$$

E_a = năng lượng hoạt hóa.

$R = 8,314 \text{ J/mol.K}$.

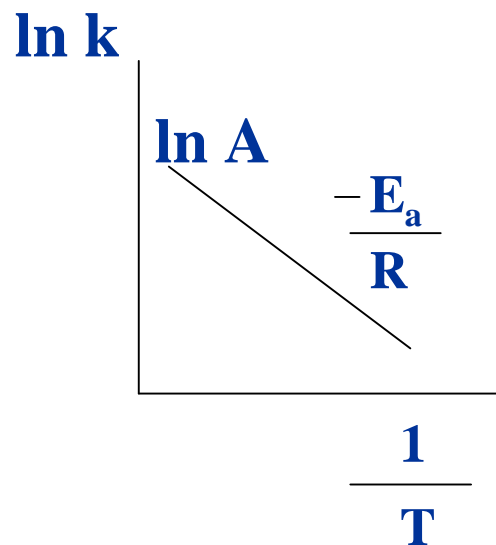
T = nhiệt độ tuyệt đối Kelvins.

A là hằng số tần số va chạm và hằng số hướng không gian.



4- PHƯƠNG TRÌNH ARRHENIUS

Lấy logarithm tự nhiên hai vế của $k = A \times e^{-E_a/RT}$

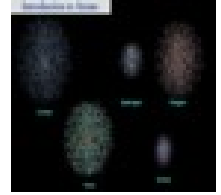


$$\ln k = \ln A - E_a/RT$$

$$\ln k = -\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} \right) + \ln A$$

$$\lg k = -\frac{E_a}{2,303R} \left(\frac{1}{T} \right) + \lg A$$

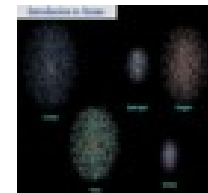
$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$



4- PHƯƠNG TRÌNH ARRHENIUS

Ví dụ : xác định năng lượng hoạt hóa của phản ứng phân huỷ HI. Tính hằng số vận tốc phản ứng ở 600 °C. Bảng dữ liệu

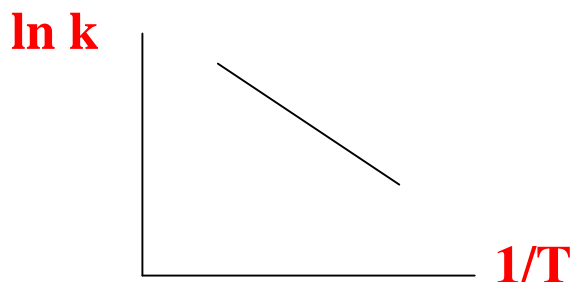
Nhiệt độ (K)	Hằng số vận tốc (M/s)
573	$2,91 \times 10^{-6}$
673	$8,38 \times 10^{-4}$
773	$7,65 \times 10^{-2}$



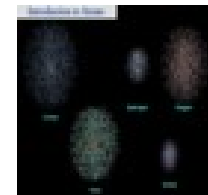
4- PHƯƠNG TRÌNH ARRHENIUS

Nhiệt độ (K)	Hằng số vận tốc (M/s)	ln k	1/T
573	$2,91 \times 10^{-6}$	- 12,75	0,00175
673	$8,38 \times 10^{-4}$	- 7,08	0,00149
773	$7,65 \times 10^{-2}$	- 2,57	0,00129

Xây dựng đồ thị ln k và xác định góc, - 22,200 K



$$- 22,200 \text{ K} = \frac{- E_a}{8,314 \text{ J/mol.K}} \rightarrow E_a = 184 \text{ kJ/mol}$$



4- PHƯƠNG TRÌNH ARRHENIUS

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

$$\ln \frac{2,91 \times 10^{-6} \text{ M/s}}{k_2} = \frac{184 \text{ J/mol}}{8,314 \text{ J/mol.K}} \left(\frac{1}{873 \text{ K}} - \frac{1}{573 \text{ K}} \right)$$

$$\ln \frac{2,91 \times 10^{-6} \text{ M/s}}{k_2} = -13,20 \longrightarrow \frac{2,91 \times 10^{-6} \text{ M/s}}{k_2} = 1,85 \times 10^{-6}$$

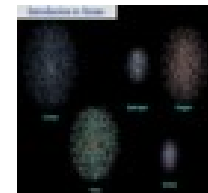
$$k_2 = 1,6 \text{ M/s}$$



4- PHƯƠNG TRÌNH ARRHENIUS

Ví dụ : xác định năng lượng hoạt hóa của phản ứng (J/mol). Với tốc độ phản ứng thực nghiệm tại hai nhiệt độ khác nhau, cho biết quá trình như sau:

Nhiệt độ (C)	Tốc độ phản ứng (M/s)
25	$1,55 \times 10^{-4}$
50	$3,88 \times 10^{-4}$



4- PHƯƠNG TRÌNH ARRHENIUS

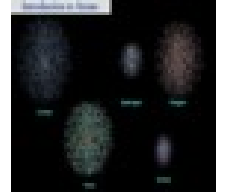
$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$T_1 = 25 + 273 = 298 \text{ K}$$

$$T_2 = 50 + 273 = 323 \text{ K}$$

$$\ln \frac{1,55 \times 10^{-4} \text{ M/s}}{3,88 \times 10^{-4} \text{ M/s}} = \frac{E_a}{8,314 \text{ J/mol.K}} \left(\frac{1}{323 \text{ K}} - \frac{1}{298 \text{ K}} \right)$$

$$E_a = 2,94 \times 10^4 \text{ J/mol}$$

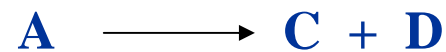


5- PHẢN ỨNG BẬC NHẤT

5.1 Định nghĩa:

- Phản ứng mà vận tốc của nó phụ thuộc bậc nhất vào nồng độ.

5.2 Phương trình động học phản ứng

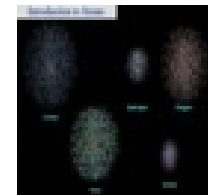


$$[A]_0 = a : \text{nồng độ ban đầu}$$

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

$$[A] = a - x : \text{nồng độ thời điểm}$$

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



5- PHẢN ỨNG BẬC NHẤT

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

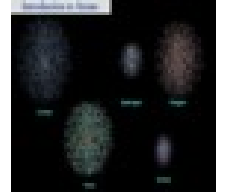
$$[A]_0 = a : n \text{ ng ban đầu}$$

$$[A] = a - x : n \text{ ng thời điểm}$$

$$-\frac{d[a - x]}{[a - x]} = k dt$$

$$\frac{d[x]}{[a - x]} = k dt$$

$$-\frac{d[x]}{[a - x]} = -k dt$$



5- PHẢN ỨNG BẬC NHẤT

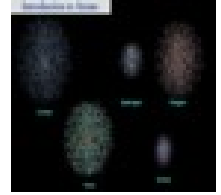
$$-\frac{d[x]}{[a-x]} = -k dt$$

$$\ln [a-x] = -kt + C$$

thời điểm $t = 0$ thì $x = 0$, $C = \ln a$

$$\ln [a-x] = -kt + \ln a$$

Phương trình vi phân bậc nhất



5- PHẢN ỨNG BẬC NHẤT

5.3 Thời gian bán huỷ, chu kỳ bán huỷ, thời gian nửa phản ứng (half-life)

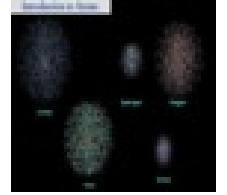
Thời gian phản ứng chất phản ứng giảm một nửa, ký hiệu $t_{1/2}$

$$\ln [a - x] = -kt + \ln a$$

thời điểm $t_{1/2}$ thì $x = 1/2 a$

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

$$t_{1/2} = \frac{0,693}{k}$$



5- PHẢN ỨNG BẬC NHẤT

^{14}C phân huỷ theo phản ứng bậc nhất, có hằng số vận tốc phân rã $1,21 \times 10^{-4} \text{ y}^{-1}$

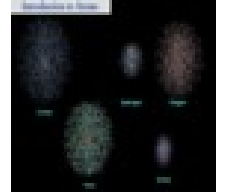
Tính thời gian bán huỷ của một mẫu ^{14}C .

$$t_{1/2} = \frac{0,693}{k}$$

$$t_{1/2} = \frac{0,693}{1,21 \times 10^{-4} \text{ y}^{-1}} = 5727 \text{ years}$$

HOÁ HỌC CÔNG NGHỆ

IHCYD CTP.H CHÍ MINH

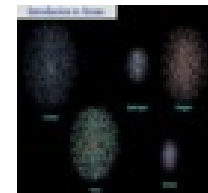


Giáo sư nghiên cứu sinh viên **quên mất** rằng anh nghĩ rằng **chức** **sau 6 tháng** nếu không ôn tập, một sinh viên năm I bắt đầu học môn học mà không có điều kiện ôn tập. Hai sau khi thi xong (5 năm) bao nhiêu rằng nghĩ rằng **chức** mà sinh viên này còn nhớ. Có lẽ quên như là quá trình học tập.



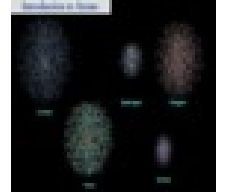
HOÁ HỌC LỊCH SỬ

I H C Y D C T P. H C H Í M I N H



Cho biết nồng độ phóng xạ $^{14}_6\text{C}$ có chu kỳ bán rã là 5727 năm, sự phân rã phóng xạ này là quá trình bất ổn định. Một mẫu gỗ nguyên gốc phát hiện có hàm lượng $^{14}_6\text{C}$ giảm chỉ còn 1% so với thời điểm ban đầu của nó. Tuổi của mẫu gỗ này bằng bao nhiêu năm?





6- PHẢN ỨNG BẬC HAI

6.1 Định nghĩa:

- Phản ứng mà vận tốc của nó phụ thuộc bậc hai vào nồng độ.

6.2 Phương trình động học phản ứng



$$V = - \frac{d[A]}{dt} = k [A][B] \quad [A] = [B] = a - x : \text{nồng độ thời điểm}$$

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



6- PHẢN ỨNG BẬC HAI

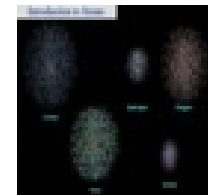
$$-\frac{d[A]}{[A][B]} = k dt$$

$$[A]_0 = [B]_0 = a : n \text{ ng ban đầu}$$

$$[A] = [B] = a - x : n \text{ ng thời điểm}$$

$$-\frac{d[a - x]}{[a - x]^2} = k dt$$

$$\frac{d[x]}{[a - x]^2} = k dt$$



6- PHẢN ỨNG BẬC HAI

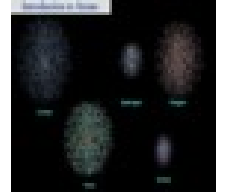
$$\frac{d[x]}{[a - x]^2} = k dt$$

$$\frac{1}{[a - x]} = kt + C$$

thời điểm $t = 0$ thì $x = 0$, $C = 1/a$

$$\frac{1}{[a - x]} = kt + \frac{1}{a}$$

Phương trình động học phản ứng bậc hai



6- PHẢN ỨNG BẬC HAI

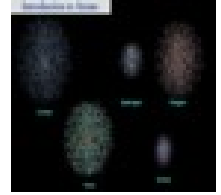
6.3 Thời gian bán huỷ, chu kỳ bán huỷ, thời gian nửa phản ứng (half-life)

Thời gian nửa phản ứng của một chất phản ứng bậc hai, ký hiệu $t_{1/2}$

$$\frac{1}{[a - x]} = kt + \frac{1}{a}$$

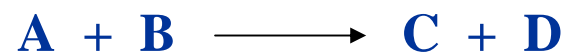
thời điểm $t_{1/2}$ thì $x = \frac{1}{2} a$

$$t_{1/2} = \frac{1}{ka}$$



6- PHẢN ỨNG BẬC HAI

6.4 Phản ứng trình tự bậc hai



$$[A]_0 = a : \text{nồng độ ban đầu}$$

$$[B]_0 = b : \text{nồng độ ban đầu}$$

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

$$[A] = a - x : \text{thời gian}$$

$$[B] = b - x : \text{thời gian}$$

$$- \frac{d[a - x]}{[a - x][b - x]} = k dt$$



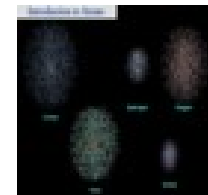
6- PHẢN ỨNG BẬC HAI

$$\frac{d[x]}{[a-x][b-x]} = k dt$$

$$\frac{1}{[a-x][b-x]} = \frac{M}{[a-x]} + \frac{N}{[b-x]}$$

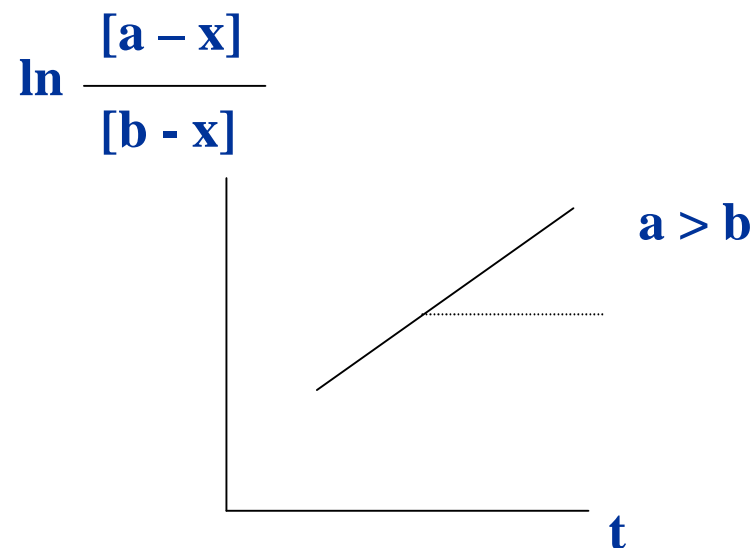
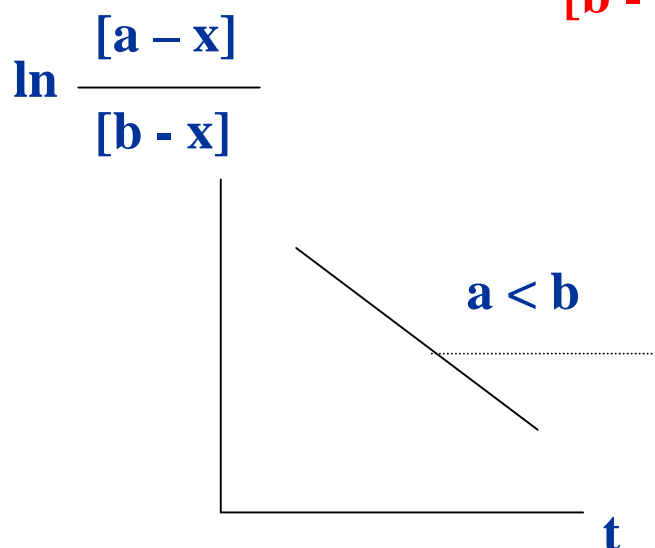
$$\frac{M}{[a-x]} + \frac{N}{[b-x]} = \frac{(Mb + Na) - (M + N)x}{[a-x][b-x]}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} (Mb + Na) = 1 \\ (M + N) = 0 \end{array} \right. \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} Mb - Ma = 1 \\ N = -M \end{array} \right. \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} M = 1/(b - a) \\ N = -1/(b - a) \end{array} \right.$$



6- PHẢN ỨNG BẬC HAI

$$\ln \frac{[a-x]}{[b-x]} = [a-b]kt + \ln \frac{a}{b}$$





7- ẢNH HƯỞNG NHIỆT ĐỘ

Số lượng chất phản ứng

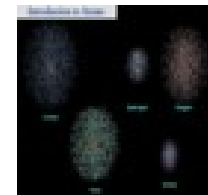
Một quy luật nổi tiếng của Van Hoff đã phát hiện ra rằng:

“khi nhiệt độ tăng, số lượng chất phản ứng thêm 10°C thì tốc độ phản ứng tăng 2 đến 4 lần”.

Ký hiệu gamma ($\gamma = 2$ đến 4, là hệ số nhiệt của phản ứng).

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

Lưu ý phản ứng trong hệ thống, phản ứng sinh học ở 1°C và nhiệt độ 10°C .



7- ẢNH HƯỞNG NHIỆT ĐỘ

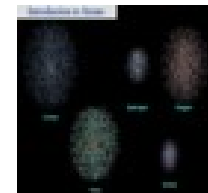
Số lượng nhiệt sinh ra làm tăng tốc độ phản ứng

Một quy luật nhĩnĩng tổng quát hĩnĩnĩng Arrhenius ra ra:

$$k = A \times e^{-E_a/RT}$$

$$\ln k = -\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} \right) + \ln A$$

Một phản ứng cĩĩnĩnĩng hành 15 °C cĩĩnĩnĩng vĩnĩnĩng v. Hĩnĩnĩng nhiệt độ lên bao nhiĩnĩng C vĩnĩnĩng cĩĩnĩnĩng phản ứng tăng lên 8 lĩnĩng? Cho $\gamma = 2$.



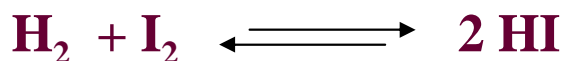
8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

Chất xúc tác là chất làm biến đổi vận tốc phản ứng, nhưng không bị biến đổi về lượng và chất.

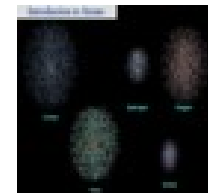
Chất xúc tác làm tăng vận tốc phản ứng, là xúc tác dương.

Chất làm giảm vận tốc phản ứng, là chất ức chế phản ứng.

Chất xúc tác có tác dụng làm giảm năng lượng hoạt hóa của phản ứng.



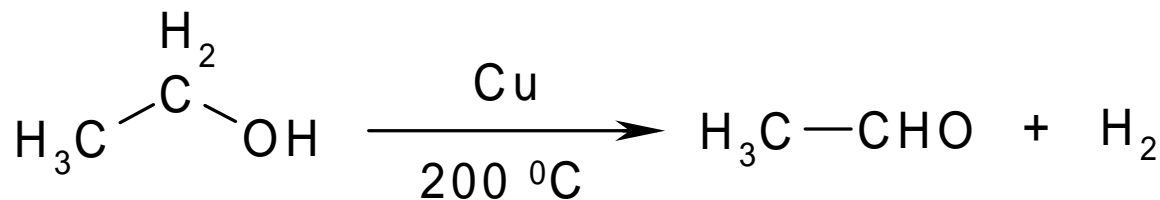
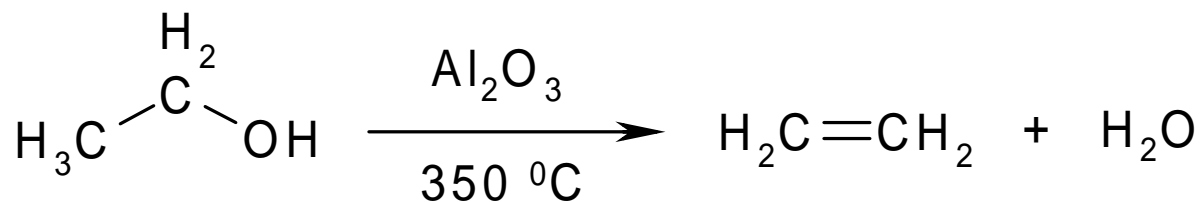
Không có mặt xúc tác $E_a = 184 \text{ kJ/mol}$. Có mặt Pt thì $E_a = 58,6 \text{ kJ/mol}$.

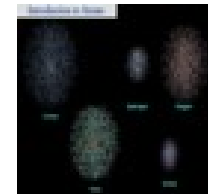


8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

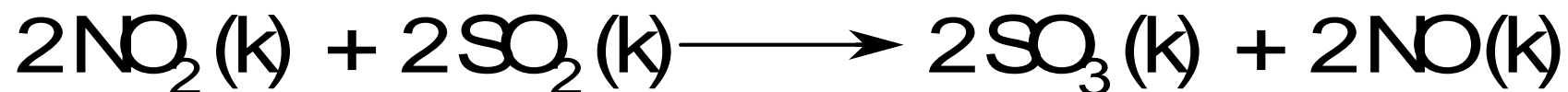
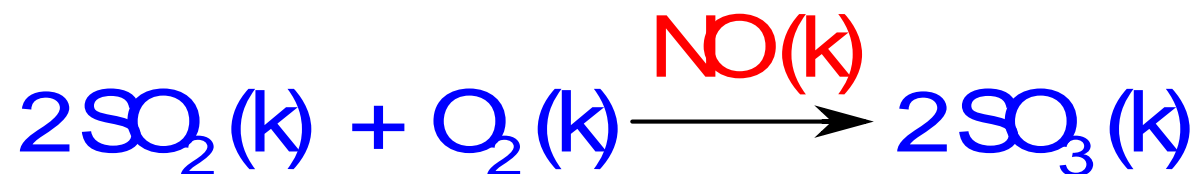
ng và r u làm gi m v n t c ph n ng: $2 \text{Na}_2\text{SO}_3 + \text{O}_2 = 2 \text{Na}_2\text{SO}_4$

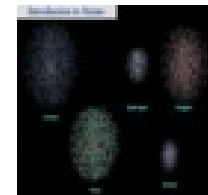
Ch t xúc tác có tính ch n l c.



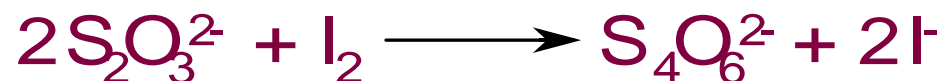
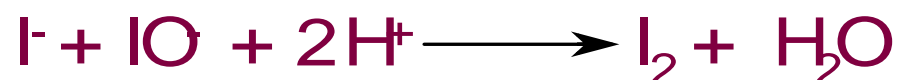
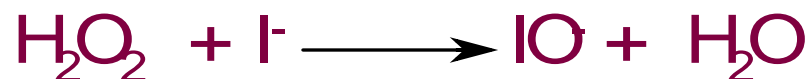
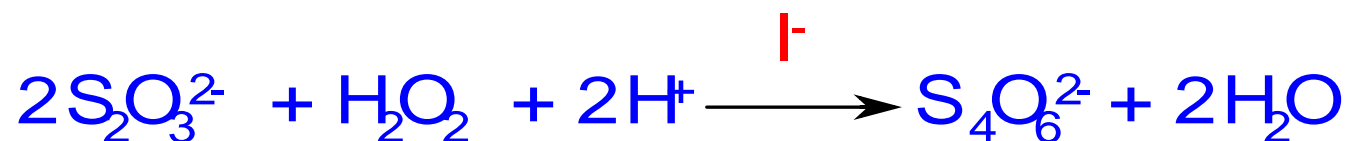


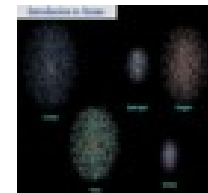
8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC



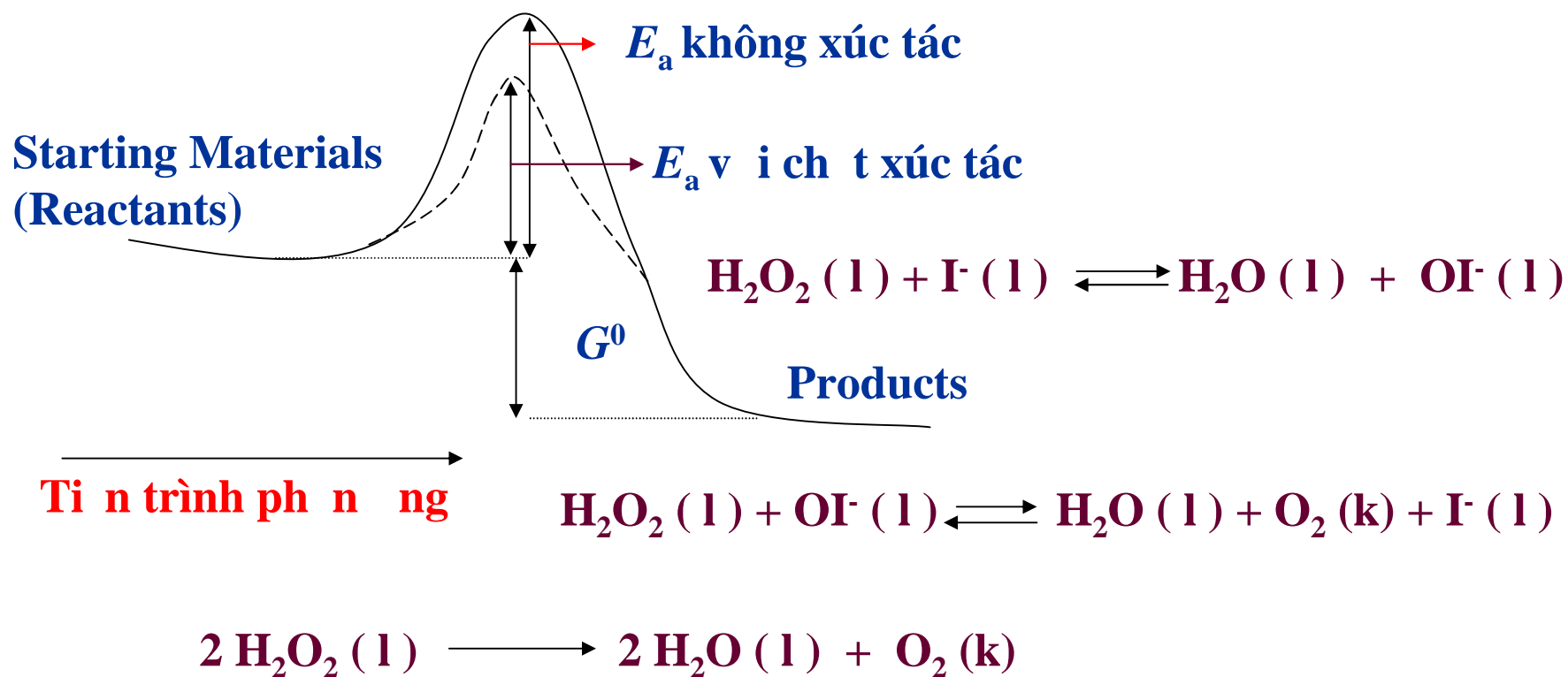


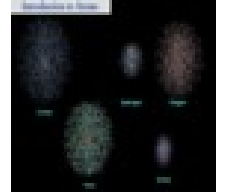
8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC





8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC





8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

Chất xúc tác phi độc hại và 4 tiêu chí

Chất xúc tác làm tăng vận tốc phản ứng.

Chất xúc tác không bị tiêu thụ sau phản ứng.

Loại chất xúc tác nào có thể hình thành vận tốc các phản ứng khác nhau.

Chất xúc tác không làm thay đổi hằng số cân bằng của phản ứng.



8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

Xúc tác dị thể

Nhiều phản ứng quan trọng trong công nghiệp diễn ra trong điều kiện xúc tác dị thể, ví dụ Fe dùng xúc tác phản ứng tổng hợp amoniac, Pt hay V_2O_5 dùng cho phản ứng tổng hợp SO_3 .

Quá trình xúc tác dị thể gồm 5 giai đoạn:

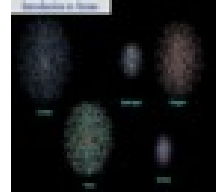
Chuyển chất phản ứng từ pha phân tử (bề mặt xúc tác).

Hấp phụ chất phản ứng.

Phản ứng diễn ra trên bề mặt xúc tác.

Giải hấp phụ các sản phẩm.

Chuyển sản phẩm ra khỏi bề mặt chất xúc tác.



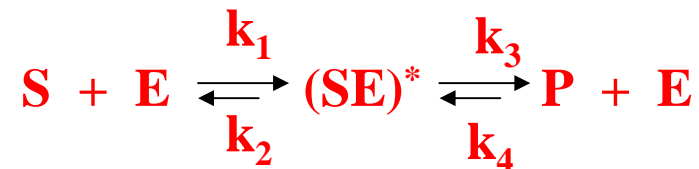
8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

Xúc tác enzym

Nhiệm vụ quan trọng trong cơ thể diễn ra nhờ xúc tác enzym, phần lớn enzym là protein.

Quá trình xúc tác enzym

Enzym có chứa vài tâm hoạt động, tức oxy ra tác động giữa enzym và chất nền (tác chất). Các tâm hoạt động có cấu trúc phù hợp với phân tử chất nền.





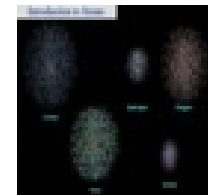
8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

Bài tập A: Phản ứng hoá học làm cho sữa chua có năng lượng hoạt hoá bằng $43,05 \text{ kJ/mol}$. Hãy so sánh vận tốc của phản ứng này ở 30°C và 5°C .

Bài tập B: Phản ứng phân huỷ H_2O_2 là phản ứng bậc nhất. Năng lượng hoạt hoá $E_a = 75,312 \text{ kJ/mol}$. Khi có mặt men (enzym) xúc tác trong vát thí nghiệm, năng lượng hoạt hoá chỉ còn là $8,368 \text{ kJ/mol}$. Tính xem ở 20°C khi có mặt men xúc tác vận tốc phản ứng tăng lên bao nhiêu lần so với khi không có xúc tác.

Bài tập C: Phản ứng xà phòng hoá ester ethyl acetat bằng dung dịch xút ở 10°C có hằng số tốc độ $k = 2,38 \text{ (mol/l và min.)}$. Tính thời gian cần xà phòng hoá 50% ethyl acetat ở 10°C khi trộn 1 lit dung dịch ethyl acetat $0,05 \text{ M}$ với: a- (1 lit NaOH $0,05 \text{ M}$), b- (1 lit NaOH $0,10 \text{ M}$), c- (1 lit NaOH $0,04 \text{ M}$).

Phản ứng xà phòng hoá ester ethyl acetat là bậc II.

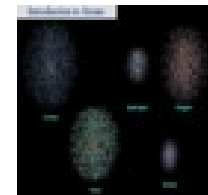


8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

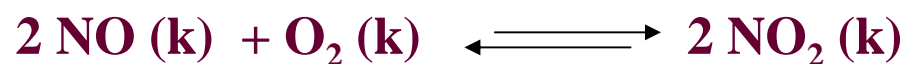
Bài tập D: Hằng số vận tốc của phản ứng thuận và phản ứng nghịch của phản ứng: $\text{ClNO}_2 + \text{NO} \rightleftharpoons \text{NO}_2 + \text{ClNO}$ ở 25°C cho biết $k_f = 7,3 \times 10^3 \text{ M/s}$ và $k_r = 0,55 \text{ M/s}$. Tính hằng số cân bằng của phản ứng.

Bài tập E: Acetaldehyde, CH_3CHO bị phân huỷ theo phản ứng trình tự bậc 1. Hằng số vận tốc $k = 0,334 \text{ M/s}$ ở 500°C . Tính thời gian để 80% acetaldehyde bị phân huỷ nếu nồng độ ban đầu là $0,0075 \text{ M}$.

$$\frac{1}{[a - x]} = kt + \frac{1}{a}$$

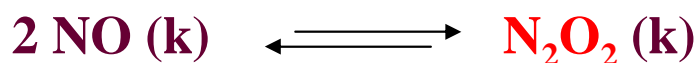


9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG



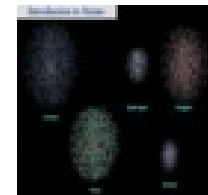
$$V_{2\text{ndstep}} = k \times [\text{N}_2\text{O}_2] \times [\text{O}_2]$$

Công thức này không thuận tiện trong tính toán vì khó đo nồng độ N_2O_2 .

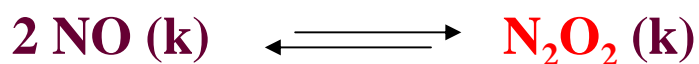


$$V_f = k_f \times [\text{NO}]^2$$

$$V_r = k_r \times [\text{N}_2\text{O}_2]$$



9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG



$$V_f = k_f \times [\text{NO}]^2$$

$$V_r = k_r \times [\text{N}_2\text{O}_2]$$

Bước đầu tiên của phản ứng xảy ra nhanh và ở trạng thái cân bằng.

$$k_f \times [\text{NO}]^2 = k_r \times [\text{N}_2\text{O}_2]$$

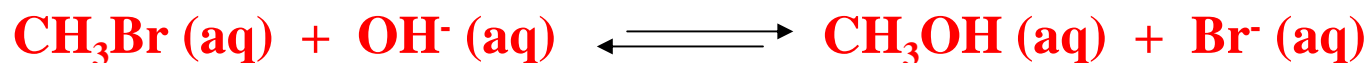
$$V_{2\text{ndstep}} = k \times k_f / k_r \times [\text{NO}]^2 \times [\text{O}_2]$$

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

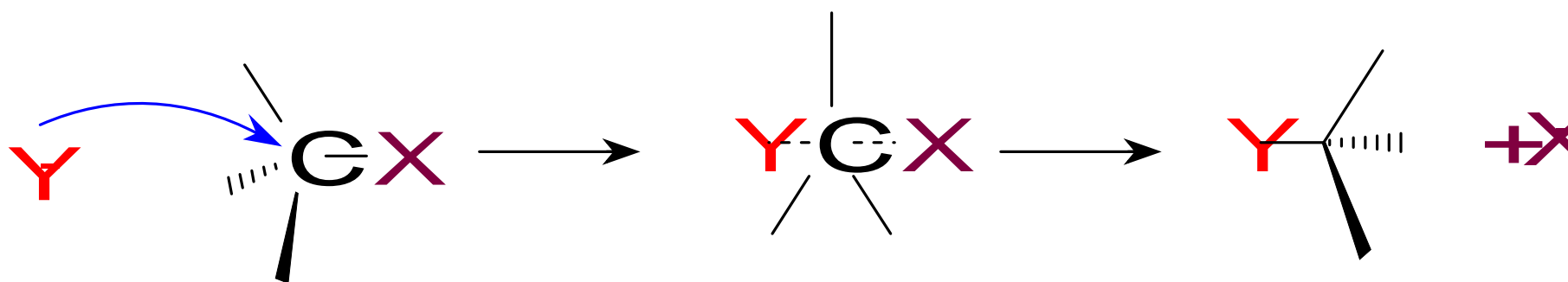


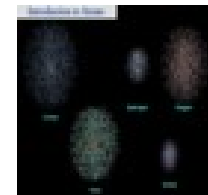
9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG

Cơ chế phản ứng nhân loại phân tử (S_N2)



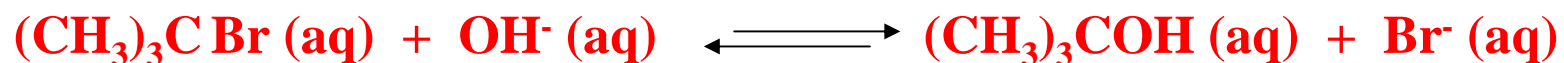
$$V = k \times [\text{CH}_3\text{Br}][\text{OH}^-]$$



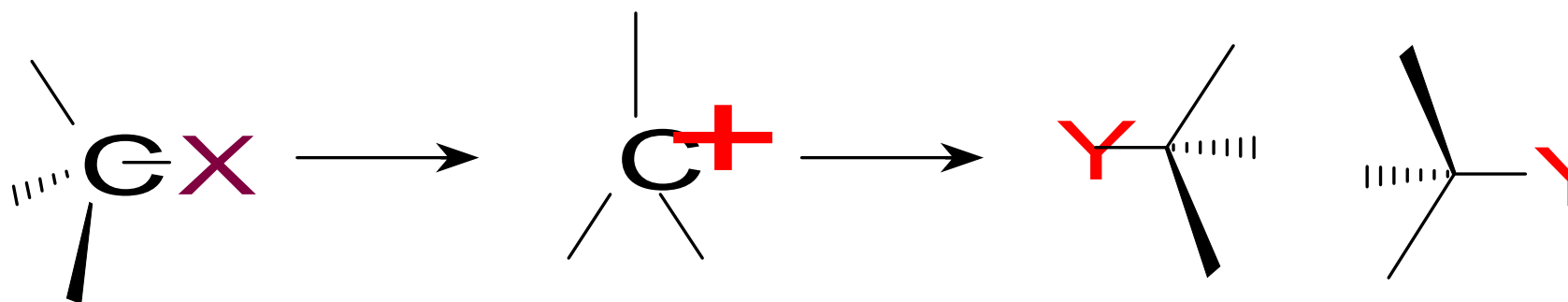


9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG

Cơ chế phản ứng phân tử (S_N1)



$$V = k \times [(\text{CH}_3)_3\text{CBr}]$$

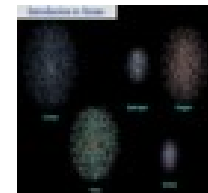




8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

Bài tập A: Phản ứng hoá học làm cho sản phẩm chưa có năng lượng hoạt hoá bằng $43,05 \text{ kJ/mol}$. Hãy so sánh vận tốc của phản ứng này ở 30°C và 5°C .

$$\ln k = -\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} \right) + \ln A$$



8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

Bài tập B: Phản ứng phân huỷ H_2O_2 là phản ứng bậc nhất. Năng lượng hoạt hoá $E_a = 75,312 \text{ kJ/mol}$. Khi có mặt men (enzym) xúc tác trong vial thì năng lượng hoạt hoá chỉ còn là $8,368 \text{ kJ/mol}$. Tính xem ở 20°C khi có mặt men xúc tác vận tốc phản ứng tăng lên bao nhiêu lần so với khi không có xúc tác.

$$\ln k = -\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} \right) + \ln A$$



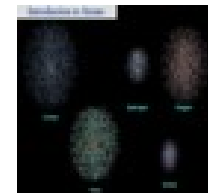
8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

Bài tập C: Phản ứng xà phòng hoá ester ethyl acetat bằng dung dịch xút 10°C có hằng số tốc độ $k = 2,38$ (mol/l và min.). Tính thời gian cần xà phòng hoá 50% ethyl acetat 10°C khi trộn 1 lit dung dịch ethyl acetat 0,05 M với: a- (1 lit NaOH 0,05M), b- (1 lit NaOH 0,10 M), c- (1 lit NaOH 0,04 M).

Phản ứng xà phòng hoá ester ethyl acetat là bậc II.

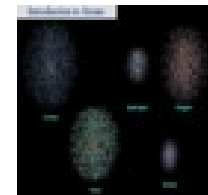
$$\frac{1}{[a - x]} = kt + \frac{1}{a}$$

$$\ln \frac{[a - x]}{[b - x]} = [a - b]kt + \ln \frac{a}{b}$$



8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

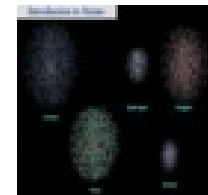
Bài tập D: Hằng số vận tốc của phản ứng thuận và phản ứng nghịch của phản ứng: $\text{ClNO}_2 + \text{NO} \rightleftharpoons \text{NO}_2 + \text{ClNO}$ ở nhiệt độ 25°C cho kết quả $k_f = 7,3 \times 10^3 \text{ M/s}$ và $k_r = 0,55 \text{ M/s}$. Tính hằng số cân bằng của phản ứng.



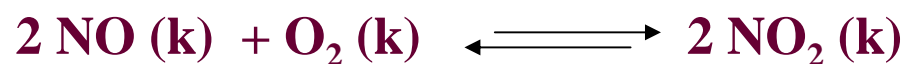
8- ẢNH HƯỞNG CỦA XÚC TÁC

Bài tập E: Acetaldehyde, CH_3CHO bị phân huỷ theo phản ứng trình tự bậc II với hằng số vận tốc $k = 0,334 \text{ M/s}$ ở 500°C . Tính thời gian để 80% acetaldehyde bị phân huỷ trong bình phản ứng ban đầu là $0,0075 \text{ M}$.

$$\frac{1}{[a - x]} = kt + \frac{1}{a}$$

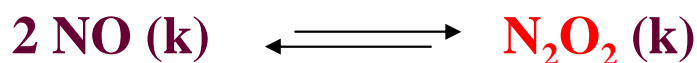


9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG



$$V_{2\text{ndstep}} = k \times [\text{N}_2\text{O}_2] \times [\text{O}_2]$$

Công thức này không thuận tiện trong tính toán vì khó đo nồng độ N_2O_2 .

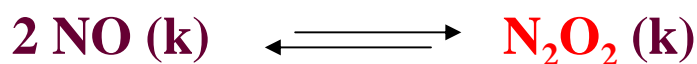


$$V_f = k_f \times [\text{NO}]^2$$

$$V_r = k_r \times [\text{N}_2\text{O}_2]$$



9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG



$$V_f = k_f \times [\text{NO}]^2$$

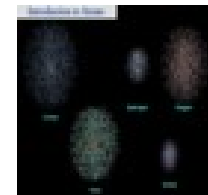
$$V_r = k_r \times [\text{N}_2\text{O}_2]$$

Bước đầu tiên của phản ứng xảy ra nhanh và ở trạng thái cân bằng.

$$k_f \times [\text{NO}]^2 = k_r \times [\text{N}_2\text{O}_2]$$

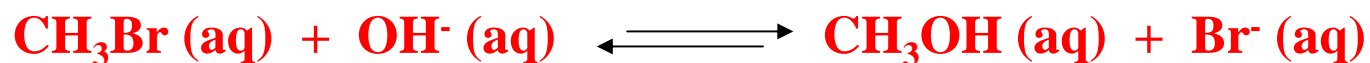
$$V_{2\text{ndstep}} = k \times k_f / k_r \times [\text{NO}]^2 \times [\text{O}_2]$$

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

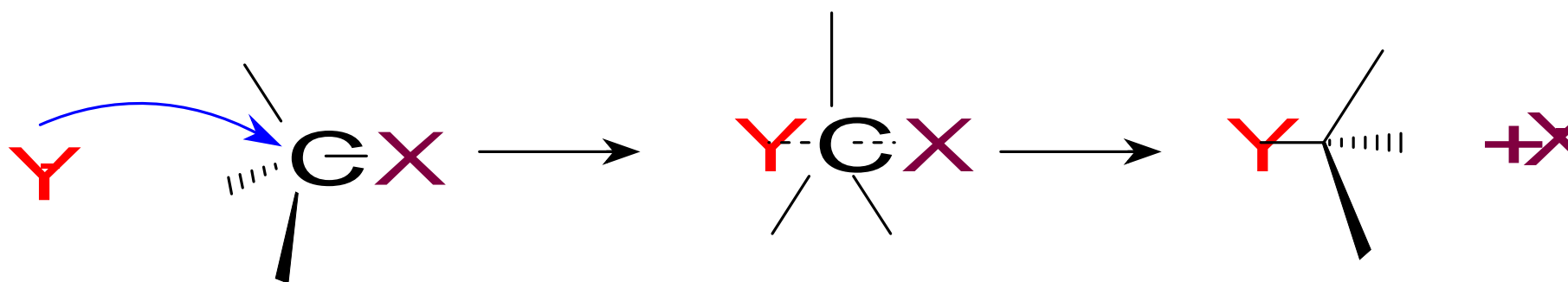


9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG

Cơ chế phản ứng nhân loại phân tử (S_N2)



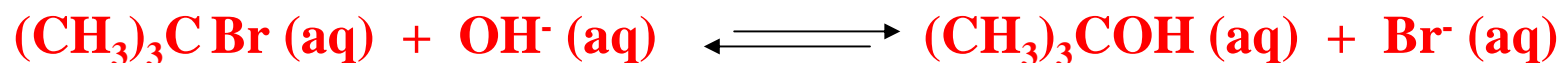
$$V = k \times [\text{CH}_3\text{Br}][\text{OH}^-]$$



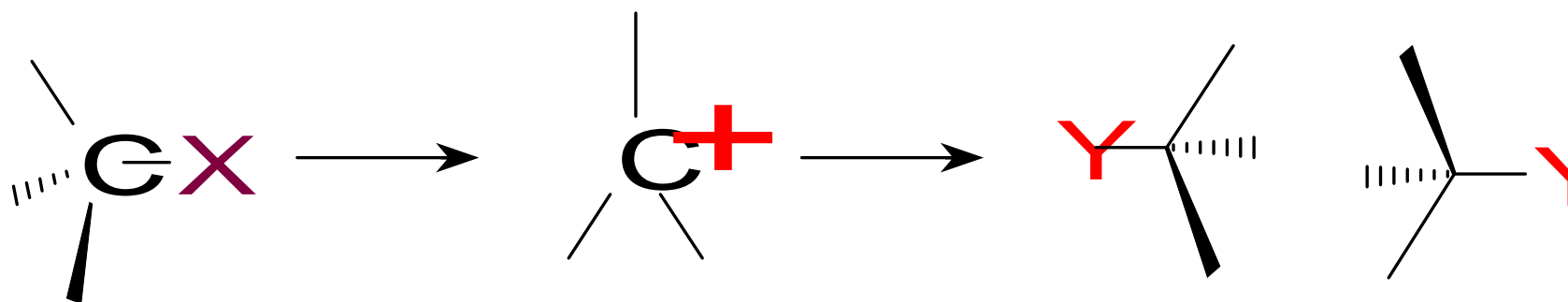


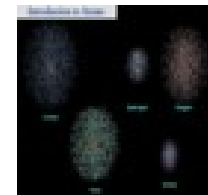
9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG

Cơ chế phản ứng phân rã (S_N1)

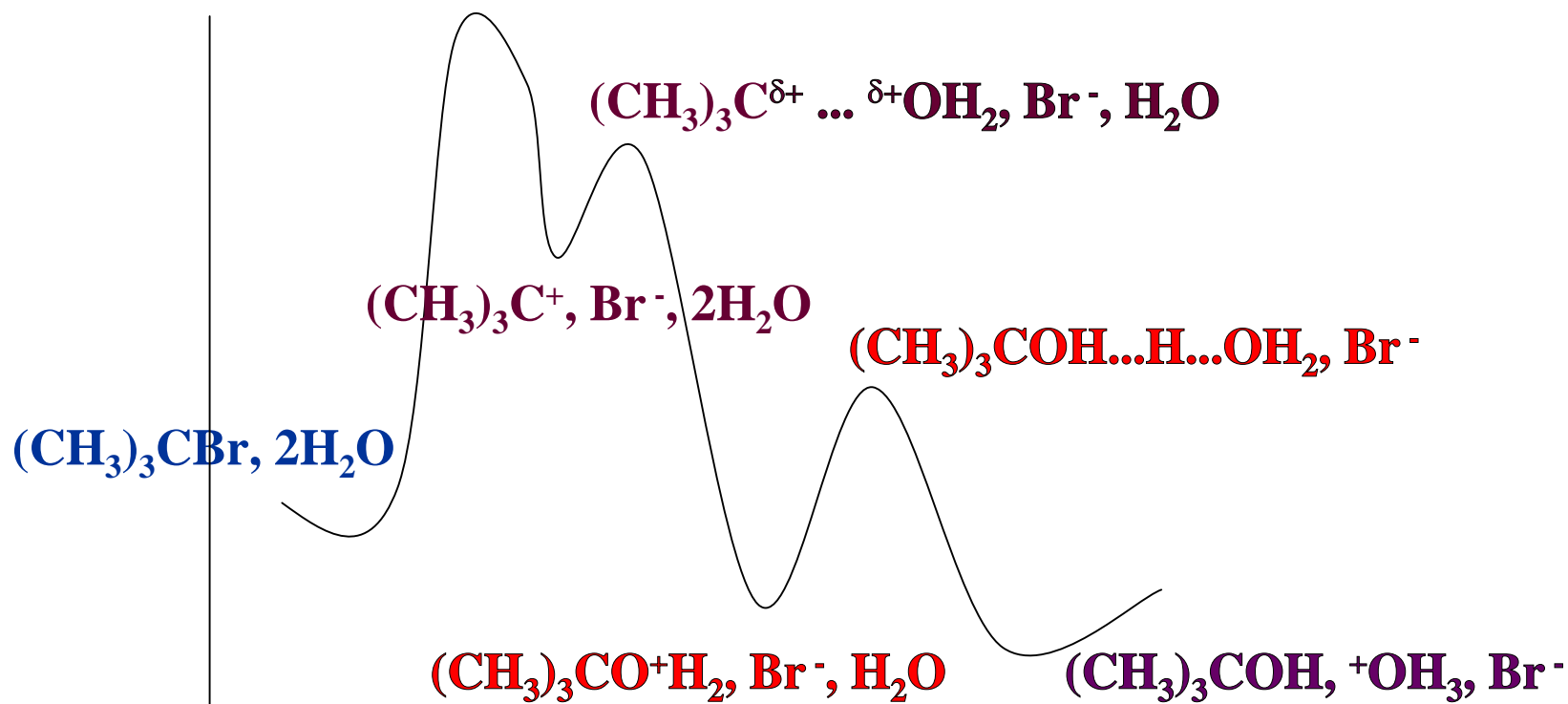


$$V = k \times [(\text{CH}_3)_3\text{CBr}]$$





9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG





9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG

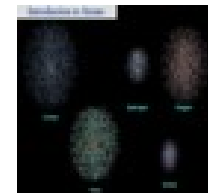
Phản ứng dây chuyền: gốc tự do hoạt động, chia bão hòa nên có hoạt tính cao (khả năng phản ứng), tác động với phân tử bão hòa phát sinh gốc tự do mới (phản ứng m-ch), sau cùng là sự kết thúc của các chuỗi hoạt động (ngắt m-ch).

Ví dụ phản ứng của khí metan và chloroform tác động ánh sáng khuếch tán.

Phản ứng quang hoá: thực vật xanh hấp thụ khí carbonic và nước dưới tác động ánh sáng mặt trời $4000 - 7000 \text{ \AA}$ tổng hợp glucid và phóng thích oxy.

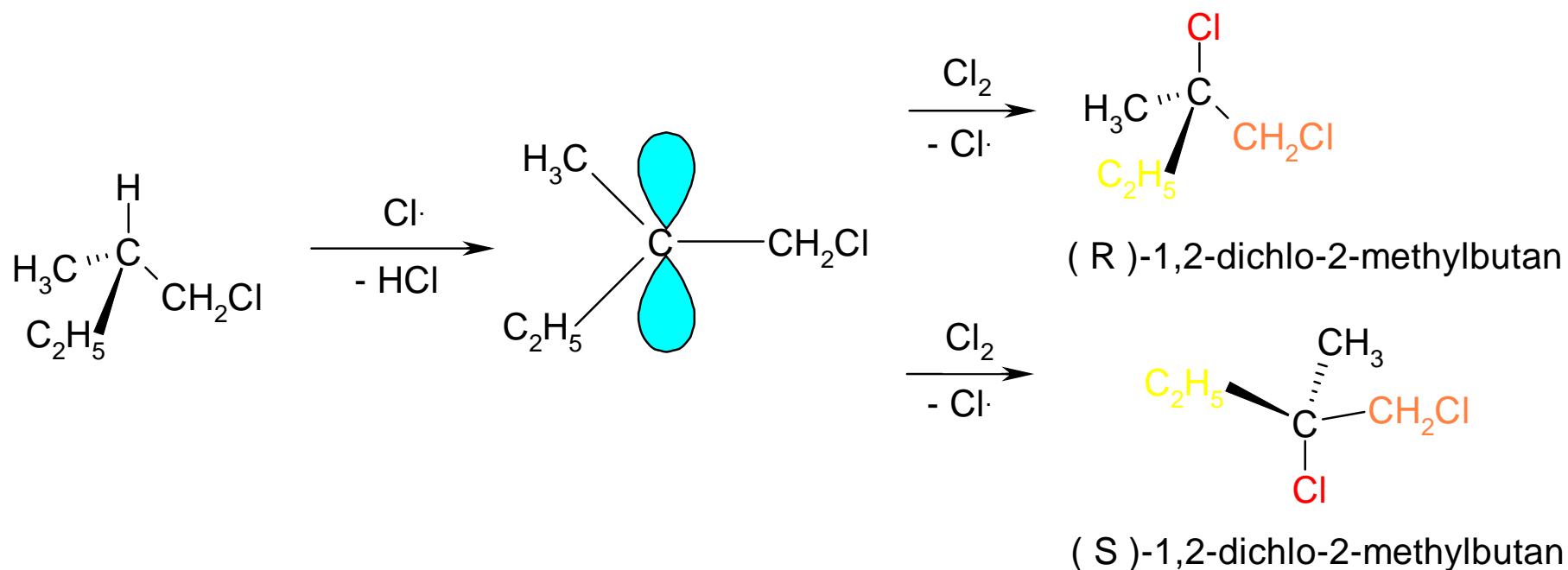
Diệp lục tố có màu xanh nên hấp thụ các bước sóng vùng tím-lam $4400 - 4700 \text{ \AA}$ và vàng- $6400 - 6600 \text{ \AA}$, năng lượng hấp thụ này chuyển thành năng lượng cho carbonic và nước qua va chạm, thực hiện phản ứng quang hợp.

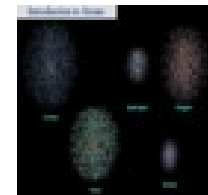
Thu hoạch 6 tấn lúa/ha thì đã có 20 tấn carbonic, 7 tấn nước chuyển hoá và tạo ra 14 tấn oxy. Sản lượng 2 - 20% năng lượng ánh sáng mặt trời.



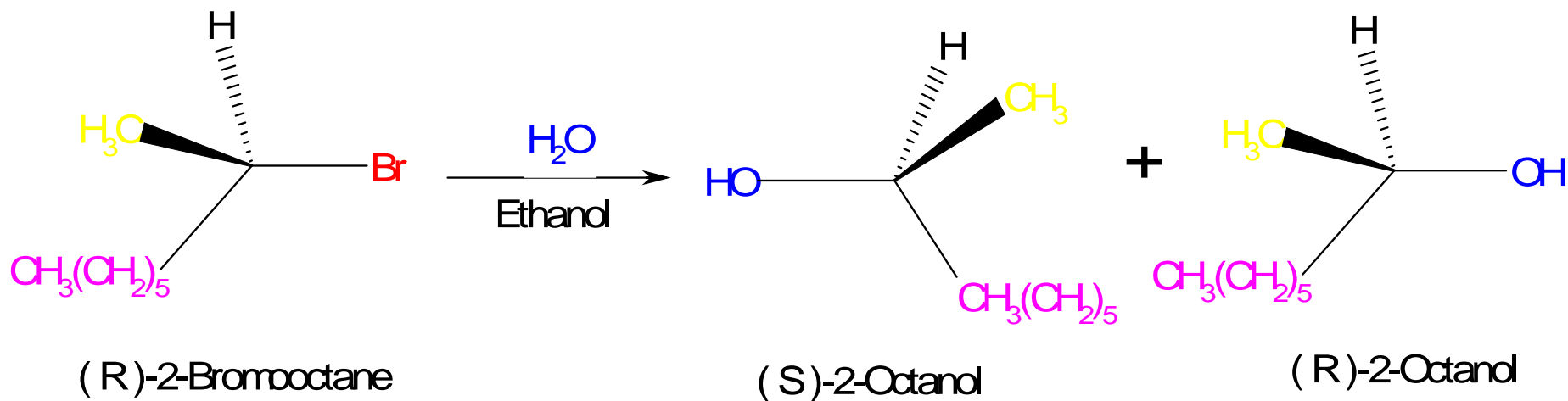
9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG

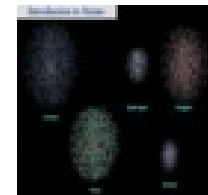
Phản ứng dây chuyền: gốc tự do hoạt động, chaina bão hòa nên có hoạt tính cao (khả năng phản ứng), tác động với phân tử bão hòa phát sinh gốc tự do mới (phản ứng mch), sau cùng là sự kết thúc của các chuỗi (ngắt mch).



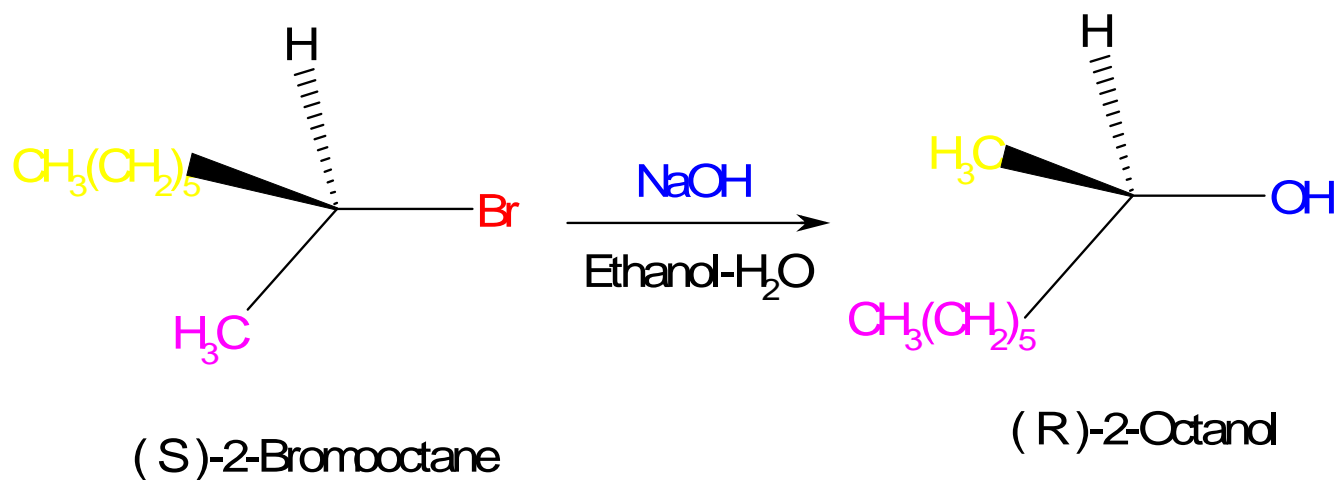


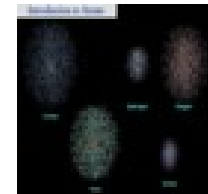
9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG





9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG

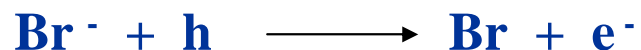




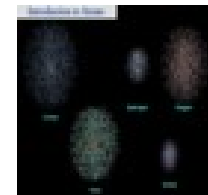
9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG

Phản ứng quang hoá trong chụp hình

Niepce sáng lập năm 1824, Daguerre công nghệ thực tế 1839, Talbot công nghệ kỹ thuật phát minh 1841.



AgBr có kích thước từ 1/1000 – 1/10 000 mm, mật độ hạt từ 10¹¹ – 10¹² c/p ion Ag⁺, Br⁻ trên bề mặt gelatin thành nhũ tương, tráng lên bề mặt chất trong suốt (celluloid, thủy tinh, chất dẻo ...) thu được film nhũ tương, kỹ thuật.



9- CƠ CHẾ PHẢN ỨNG

Phản ứng quang hoá trong chụp hình

Lượng bức xạ tới làm ion hóa photon ánh sáng thành electron và ion.

Chụp ảnh bằng phim ảnh, cảm quang, có 1 số muối bạc halogen (AgX) được tráng lên phim (làm hiện ảnh). Những film đã chụp vào chất khử như hydroquinon, AgBr sẽ khử thành Ag, chính là lúc chụp ảnh khi electron photon thì sẽ tạo ra electron của Ag, khi tráng sẽ cho electron của Ag, thu được ảnh âm.

AgBr còn lại sẽ loại bỏ bằng Natri thiosulfate, rửa film ảnh để loại bỏ ảnh âm.

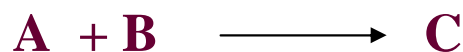
Muối thu được ảnh thì là quá trình trên ngược lại, phản ứng ánh sáng hiện ảnh. Tiếp theo làm hiện ảnh bằng cách làm mất ảnh âm, phản ứng ánh sáng để thu được ảnh dương.



BÀI TẬP

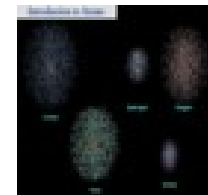
Vận tốc của nó có thể khác nhau vận tốc khác lúc

Thí nghiệm	Vận tốc (M. s ⁻¹)	Nồng độ các chất ban đầu	
		[A]	[B]
Thí nghiệm 1	1,7 x 10⁻⁸	0,030	0,100
Thí nghiệm 2	6,8 x 10⁻⁸	0,060	0,100
Thí nghiệm 3	4,9 x 10⁻⁸	0,030	0,200



a, Hãy viết biểu thức vận tốc phản ứng dựa vào kết quả thí nghiệm trên.

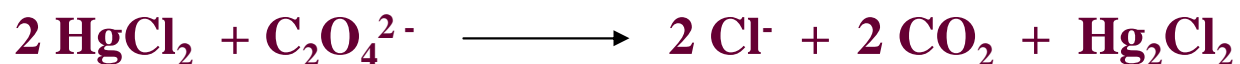
b, Tính hằng số vận tốc k, tính vận tốc nếu [A] = 0,05 M và [B] = 0,02 M.



BÀI TẬP

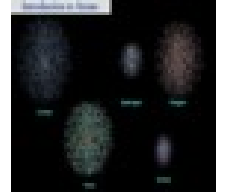
Vận tốc của nó có thể khác nhau vận tốc khác lúc

Thí nghiệm	Vận tốc (M. s ⁻¹)	Nồng độ các chất ban đầu	
		[HgCl ₂]	[C ₂ O ₄ ²⁻]
Thí nghiệm 1	3,1 x 10 ⁻⁵	0,100	0,200
Thí nghiệm 2	1,2 x 10 ⁻⁵	0,100	0,400
Thí nghiệm 3	6,2 x 10 ⁻⁵	0,050	0,400



a, Hãy viết biểu thức vận tốc phản ứng dựa vào kết quả thí nghiệm trên.

b, Tính hằng số, tính vận tốc nếu [HgCl₂] = 0,20 M và [C₂O₄²⁻] = 0,30 M.



BÀI TẬP

Số thặng dư kim loại trong không khí là **bc I** và có thời gian bán rã là **60 ngày**. Một người cân nặng **75 kg** đang hít thở **$6,4 \times 10^{-3}$ grams** kim loại trong ngày. Hỏi phải hít thở bao nhiêu ngày để mức kim loại trong cơ thể này về mức bình thường (bình thường **23 ppb** theo trọng lượng).

Thời gian bán rã của một phân tử là **726 s**, tác chất có nồng độ ban đầu là **0,6 M**. Hỏi tác chất này bằng bao nhiêu sau **1452 s** nếu phân tử là **bc 1**. Hỏi phải hít thở bao lâu thì nồng độ tác chất còn **0,1 M**.

Thời gian bán rã của một phân tử là **2,6 nm**, tác chất có nồng độ ban đầu là **0,25 M**. Hỏi tác chất này bằng bao nhiêu sau **9,9 nm** nếu phân tử là **bc 1**.