

CHƯƠNG V

ĐỘNG HOÁ HỌC

Động hoá học nghiên cứu tốc độ của các phản ứng hoá học và các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ như: nồng độ, nhiệt độ, chất xúc tác ... Từ đó cho phép tìm hiểu về cơ chế của các phản ứng hoá học.

I. Một số khái niệm

1. Tốc độ phản ứng

Để biểu thị mức độ nhanh hay chậm của một phản ứng người ta dùng khái niệm tốc độ phản ứng.

Tốc độ của một phản ứng hoá học được biểu thị bằng biến thiên nồng độ của chất tham gia phản ứng hay sản phẩm của phản ứng trong một đơn vị thời gian.

Ví dụ:



Nếu phản ứng thực hiện ở nhiệt độ và thể tích không đổi, tại các điểm t_1 và t_2 , ta lấy nồng độ chất A tương ứng là C_1 và C_2 thì tốc độ trung bình của các phản ứng trên trong khoảng thời gian $(t_2 - t_1)$ là:

$$\bar{v} = - \frac{C_2 - C_1}{t_2 - t_1} = - \frac{\Delta C}{\Delta t}$$

Vì nồng độ của các chất biến đổi liên tục, nên để chính xác hơn người ta sử dụng tốc độ tức thời của phản ứng (nghĩa là tốc độ tại thời điểm t xác định).

Lúc đó tốc độ tức thời của phản ứng được tính bằng đạo hàm bậc nhất của nồng độ theo thời gian.

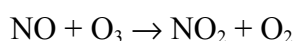
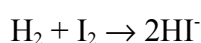
$$v = \pm \frac{dC}{dt}$$

Ở đây nếu C là nồng độ chất tham gia phản ứng ta phải đặt thêm dấu trừ, nếu C là nồng độ sản phẩm thì lấy dấu (+) để đảm bảo tốc độ phản ứng là một đại lượng luôn luôn dương.

2. Phản ứng đơn giản và phản ứng phức tạp

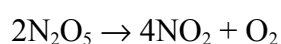
- Phản ứng đơn giản: là phản ứng chỉ diễn ra qua một giai đoạn.

Ví dụ:

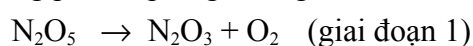


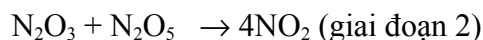
- Phản ứng phức tạp: là phản ứng xảy ra qua nhiều giai đoạn

Ví dụ:



là phản ứng phức tạp vì gồm 2 giai đoạn nối tiếp nhau:





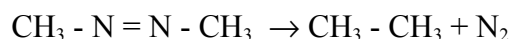
3. Phân tử số và bậc phản ứng

Để tìm ra các qui luật chung về tốc độ phản ứng, người ta phân loại phản ứng dựa theo bậc và phân tử số.

* Phân tử số

Là số tiểu phân (phân tử, nguyên tử hay ion) đồng thời tương tác với nhau trong một giai đoạn của phản ứng. Vì vậy phân tử số là một số nguyên.

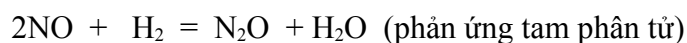
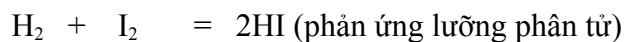
Ví dụ:



tham gia vào tương tác chỉ có một phân tử. Vì vậy phân tử số là một và được gọi là phản ứng đơn phân tử.

Nếu sự tương tác xảy ra khi có sự tham gia của 2,3 phân tử thì được gọi là phản ứng lưỡng phân tử, tam phân tử.

Ví dụ:

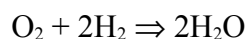


Phản ứng 4 phân tử trở lên thường không gặp trong thực tế vì muốn có xác phản ứng các phân tử phải va chạm nhau và xác suất va chạm của 4 phân tử trở lên thường rất hiếm nên đại đa số phản ứng hoá học là đơn hoặc lưỡng phân tử.

* Bậc phản ứng

Bậc phản ứng là tổng các số mũ của nồng độ viết trong biểu thức của định luật tác dụng khối lượng của một phương trình động học thực nghiệm (yếu tố nồng độ thực sự quyết định tốc độ của một phản ứng).

Ví dụ:

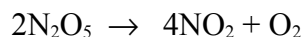


là phản ứng bậc 3 như vậy bậc phản ứng có thể là số nguyên nhưng cũng có thể là phân số.

* Chú ý:

Đối với phản ứng đơn giản, bậc phản ứng trùng với phân tử số, đối với phản ứng phức tạp bậc phản ứng được xác định dựa trên giai đoạn nào xảy ra chậm nhất, lúc đó có thể bậc phản ứng không trùng với phân tử số của phản ứng.

Ví dụ:

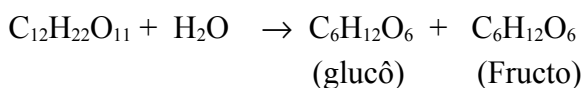


là phản ứng bậc 1 mặc dù có phân tử số là 2 vì bậc phản ứng này được xác định dựa vào giai đoạn 1 là giai đoạn xảy ra chậm hơn.



Ngoài ra khi nồng độ của các chất rất khác nhau thì bậc của chúng cũng không trùng với hệ số tỷ lệ của các chất phản ứng.

Ví dụ: phản ứng thủy phân đường saccoza

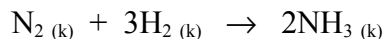


là phản ứng bậc 1 vì lượng nước thuỷ phân rất lớn, nên ảnh hưởng của nước đến quá trình hầu như không đổi nên không cần chú ý đến.

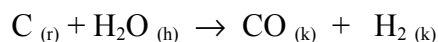
4. Phản ứng đồng thể và phản ứng dị thể

* Phản ứng đồng thể: là phản ứng xảy ra trong hệ đồng thể.

Ví dụ:



* Phản ứng dị thể: là phản ứng xảy ra trong hệ dị thể.



Phản ứng dị thể xảy ra phức tạp luôn phản ứng đồng thể vì ngoài quá trình chuyển hoá học còn phải tính đến quá trình chuyển vật thể đến biên giới tiếp xúc giữa hai pha và ngược lại.

II. Các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng

1. Ảnh hưởng của nồng độ đến tốc độ phản ứng

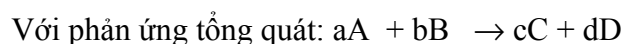
1.1. Định luật tác dụng khối lượng

Một phản ứng hoá học muốn xảy ra, các chất tham gia phản ứng va chạm nhau, những va chạm dẫn đến xảy ra phản ứng gọi là các va chạm có hiệu quả. Khi nồng độ các chất tăng, số va chạm có hiệu quả cũng tăng dần nên phản ứng xảy ra nhanh hơn.

1867 Gulberg và Waager đã đưa định luật tác dụng khối lượng nên ảnh hưởng của nồng độ đến tốc độ của phản ứng có nội dung sau:

"Ở nhiệt độ xác định, tốc độ phản ứng tỷ lệ thuận với tích số nồng độ của các chất tham gia phản ứng, mỗi nồng độ có số mũ là hệ số tỷ lệ của các chất đó trong phương trình phản ứng".

Ví dụ:



Theo định luật này ta có: $v = kC_A^a C_B^b$ hay $v = [\text{A}]^a [\text{B}]^b$

(Biểu thức này là phương trình động học của phản ứng trên).

Trong đó:

- k: hằng số tốc độ, nó phụ thuộc vào bản chất của chất phản ứng và nhiệt độ.
- C_A, C_B : nồng độ của các chất tham gia phản ứng tính theo đơn vị mol/l
- Nếu $C_A = C_B = 1$ thì lúc đó $v = k$ lúc này k được gọi là vận tốc riêng của phản ứng.

* *Chú ý:*

- Đối với phản ứng phức tạp, bậc của phản ứng được xác định dựa vào giai đoạn nào xảy ra chậm nhất do đó v của phản ứng sẽ được xác định bằng v của giai đoạn chậm nhất.

Nghĩa là:

$$v = k[\text{A}]^m[\text{B}]^n$$

Các lũy thừa m, n sẽ được xác định bằng con đường thực nghiệm cho giai đoạn chậm nhất, còn trong trường hợp phản ứng đơn giản thì nó trùng với hệ số a và b của [A] và [B] trong phương trình phản ứng.

Đối với phản ứng thuận nghịch: $a\text{A} + b\text{B} \rightleftharpoons c\text{C} + d\text{D}$

Tốc độ phản ứng tại 1 thời điểm nhất định bằng hiệu số các tốc độ của phản ứng thuận nghịch.