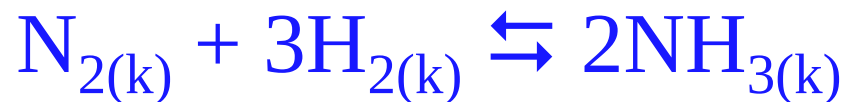
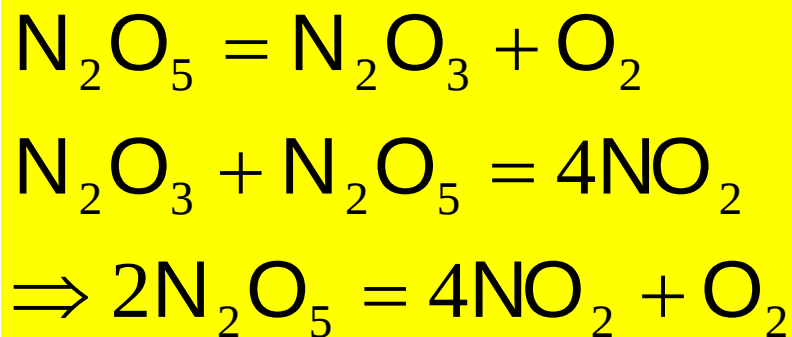


TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG

- Phản ứng đơn giản: chỉ xảy ra 1 giai đoạn.



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



1. TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG

- Tốc độ phản ứng: là sự thay đổi nồng độ tác chất hoặc sản phẩm trong 1 đơn vị thời gian.
- Tốc độ phản ứng tức thời:

Ví dụ: $mA \rightarrow \text{sản phẩm}$.

$$\text{Tốc độ tức thời} = - (dC_A/dt) = k[A]^m$$

- Tốc độ phản ứng trung bình: sự thay đổi nồng độ chất phản ứng hay sản phẩm trong một khoảng thời gian xác định.

$$\begin{aligned}\text{Average rate} &= \frac{\text{change in number of moles of B}}{\text{change in time}} \\ &= \frac{\Delta(\text{moles of B})}{\Delta t}\end{aligned}$$

TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG TỔNG QUÁT

- Ví dụ:



- Tốc độ phản ứng tổng quát là:

$$v = k.C_A^a.C_B^b$$

Trong đó, k là hệ số tốc độ phản ứng.

- Ta nói phản ứng bậc a theo A , bậc b theo B .
- Bậc tổng quát của phản ứng: $a+b+\dots$ (nếu nhiều hơn 2 tác chất)

Tốc độ theo từng cấu tử



$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{p} \frac{d[P]}{dt} = \frac{1}{q} \frac{d[Q]}{dt}$$

- Tác chất: dấu –
- Sản phẩm: dấu +
- Đơn vị tốc độ phản ứng, theo IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), là $\text{mol.dm}^{-3}.\text{s}^{-1}$.

Hệ số tốc độ phản ứng k

- K chứa các yếu tố ảnh hưởng tới tốc độ phản ứng như nhiệt độ, năng lượng hoạt hóa của phản ứng,... nhưng không phụ thuộc nồng độ các chất.
- Năng lượng hoạt hóa của phản ứng: là năng lượng tối thiểu các phân tử phản ứng cần phải có để phản ứng có thể xảy ra được.

■ Đơn vị của hệ số tốc độ phản ứng phụ thuộc vào bậc phản ứng:

- ☐ Với phản ứng bậc zero, đơn vị của k là $\text{mol.l}^{-1}.\text{s}^{-1}$.
- ☐ Phản ứng bậc 1 là s^{-1} .
- ☐ Phản ứng bậc 2 là $\text{l.mol}^{-1}.\text{s}^{-1}$.
- ☐ Phản ứng bậc n là $\text{mol}^{1-n}.\text{l}^{n-1}.\text{s}^{-1}$.

NGHIÊN CỨU CÁC YẾU TỐ ẢNH HƯỞNG ĐẾN TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG

1. ẢNH HƯỞNG CỦA NỒNG ĐỘ

Phản ứng bậc nhất

A ---> sản phẩm

Tốc độ phản ứng: $v = - dC_A/dt = kC_A$.

Lấy tích phân từ 0 (ứng với 0 s và C_{A_0}) đến t (ứng với t s và C_A). Ta có:

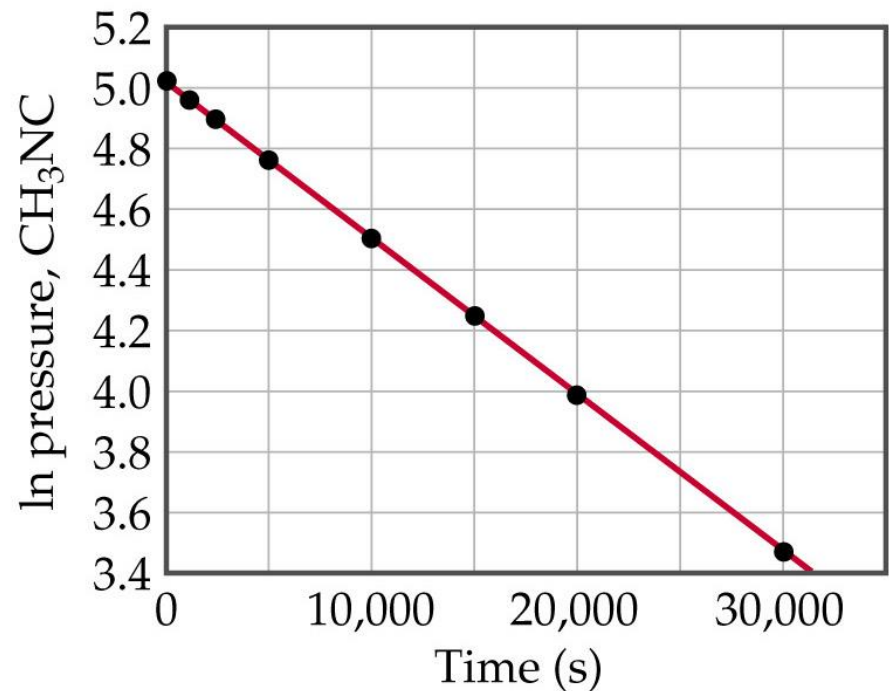
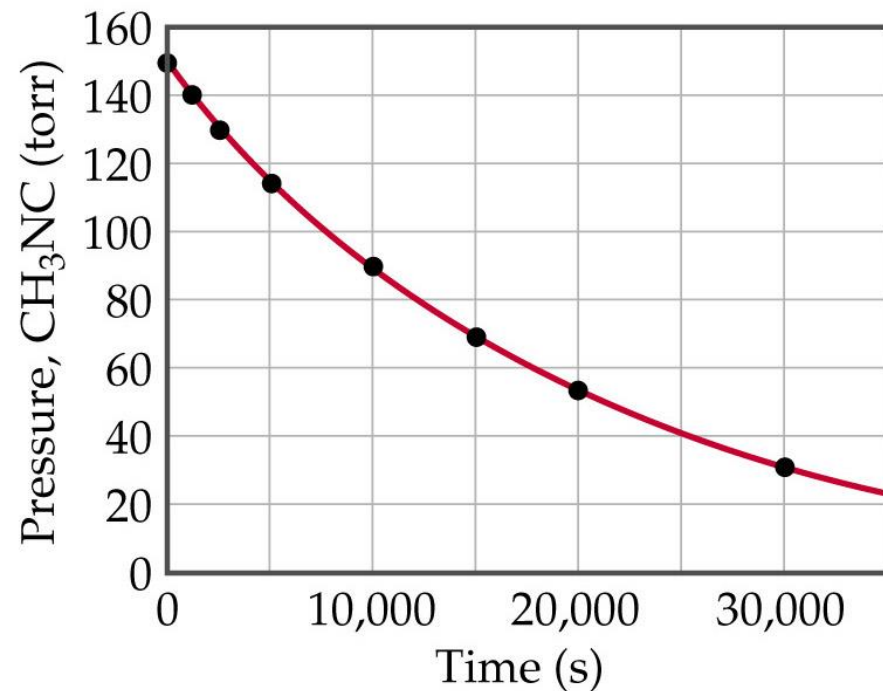
$$\ln C_A - \ln C_{A_0} = -kt$$

$$\ln \left(\frac{C_A}{C_{A_0}} \right) = -kt$$

Dạng đồ thị biểu diễn

$$\ln C_A = -kt + \ln C_{A_0}$$

Ứng với dạng đồ thị $\ln y = ax + b$ (bên trái)
hay $y = ax + b$ (bên phải).



Bán chu kỳ phản ứng

- Bán chu kỳ phản ứng, $t_{1/2}$ là thời gian phản ứng diễn ra đến lúc tác chất còn một nửa so với ban đầu ($C_{A1/2} = 1/2C_{A0}$).
- Biểu thức tính $t_{1/2}$:

$$t_{1/2} = -\frac{\ln\left(\frac{1}{2}\right)}{k} = \frac{0.693}{k}$$

- Bán chu kỳ của phản ứng bậc 1 chỉ phụ thuộc k.

2. Ảnh hưởng của nhiệt độ

Qui tắc van't Hoff

- “Khi tăng nhiệt độ lên 10^0 thì tốc độ phản ứng tăng lên 2÷4 lần”.

$$\gamma = \frac{k_{T+10}}{k_T} = 2 \div 4$$

- Tổng quát:

$$\gamma^n = \frac{k_{T+10n}}{k_T} = (2 \div 4)^n$$

- Qui tắc này đúng trong khoảng nhiệt độ không lớn.

■ Ví dụ: Với phản ứng phân hủy N_2O_5 , cho:

$$k_{0^\circ\text{C}} = 7.9 \times 10^{-7} \text{ và } k_{30^\circ\text{C}} = 3.6 \times 10^{-5} \text{ tính } k_{100^\circ\text{C}} ?$$

Ta có

$$\gamma^3 = \frac{k_{0^\circ\text{C}+10 \times 3}}{k_{0^\circ\text{C}}} = \frac{3.6 \times 10^{-5}}{7.9 \times 10^{-7}} = (3.86)^3$$

$$\Rightarrow \gamma^{10} = \frac{k_{100^\circ\text{C}}}{k_{0^\circ\text{C}}} = (3.86)^{10}$$

$$\Rightarrow k_{100^\circ\text{C}} = (3.86)^{10} \times 7.9 \times 10^{-7}$$

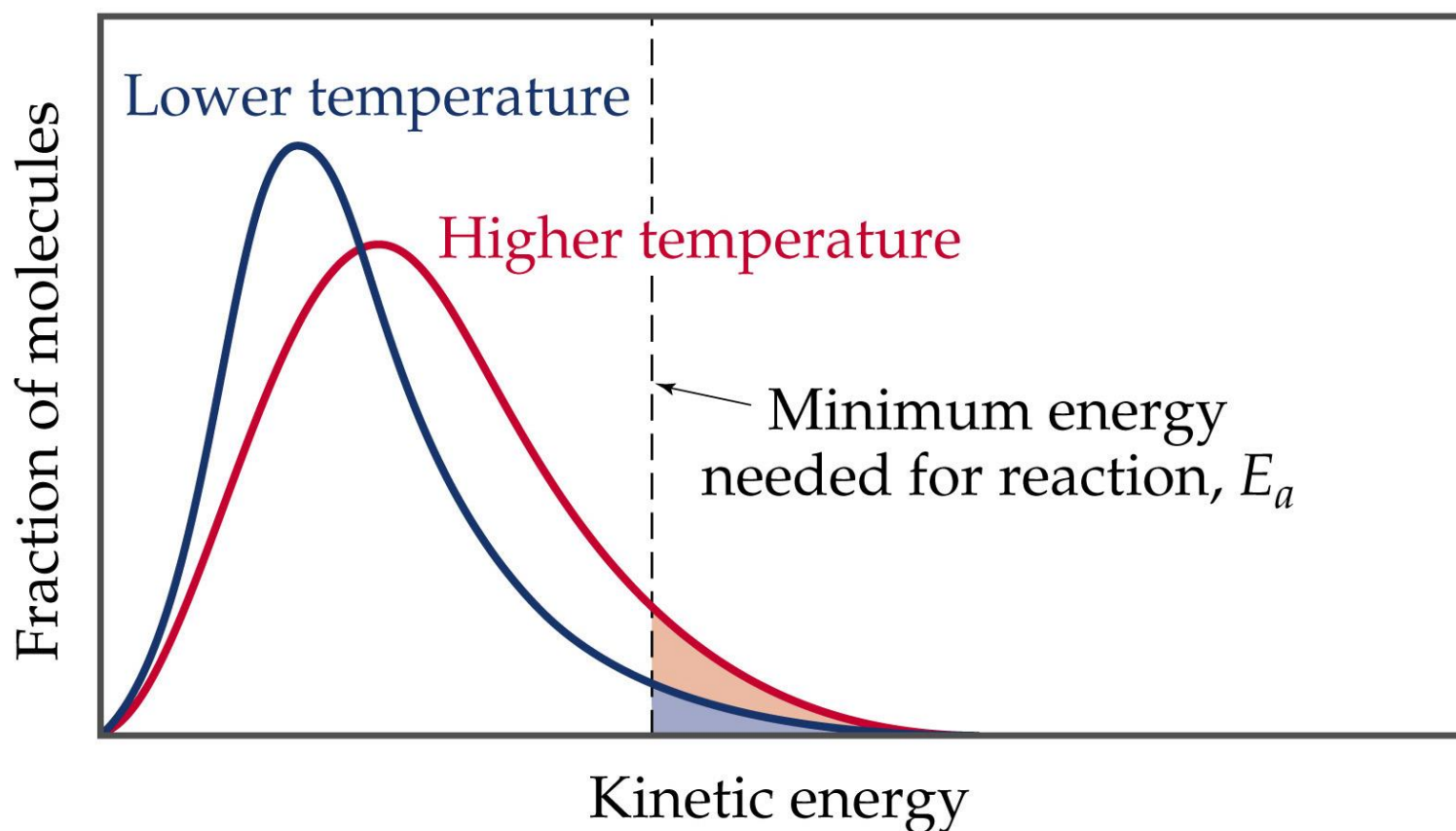
Qui tắc Arrhenius

- Arrhenius thấy rằng hầu hết các phản ứng hóa học tuân theo phương trình sau:

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

- k là hệ số tốc độ phản ứng, E^* (J), là năng lượng hoạt hóa, R là hằng số khí (8.314 J/(K.mol)) và T là nhiệt độ (K).
- A là hằng số, đo xác suất va chạm có ích.
- Cả A và E^* được cho theo từng phản ứng.

- Năng lượng hoạt hóa, E^* , là năng lượng cần thiết nhỏ nhất để phản ứng bắt đầu xảy ra.



- Dựa trên phương trình Arrhenius, nếu biết k_1 ở một nhiệt độ T_1 thì sẽ tính được k_2 ở nhiệt độ T_2 theo biến đổi sau:

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

Ảnh hưởng của xúc tác

■ Khái niệm:

□ “Chất xúc tác là những chất làm tăng tốc độ phản ứng do tham gia vào tương tác hóa học với các phản ứng ở giai đoạn trung gian, nhưng sau phản ứng nó được phục hồi lại và giữ nguyên về lượng cũng như về thành phần và tác chất hóa học.”

■ Tác dụng chủ yếu của chất xúc tác là làm giảm năng lượng hoạt hóa của phản ứng bằng cách thay đổi cơ chế phản ứng từ đó làm tăng tốc độ phản ứng.

Biểu diễn ảnh hưởng của xúc tác

