

CÁC QUY LUẬT ĐỘNG HỌC PHỨC TẠP

Phản ứng thuận nghịch

Phản ứng nối tiếp

Phản ứng song song

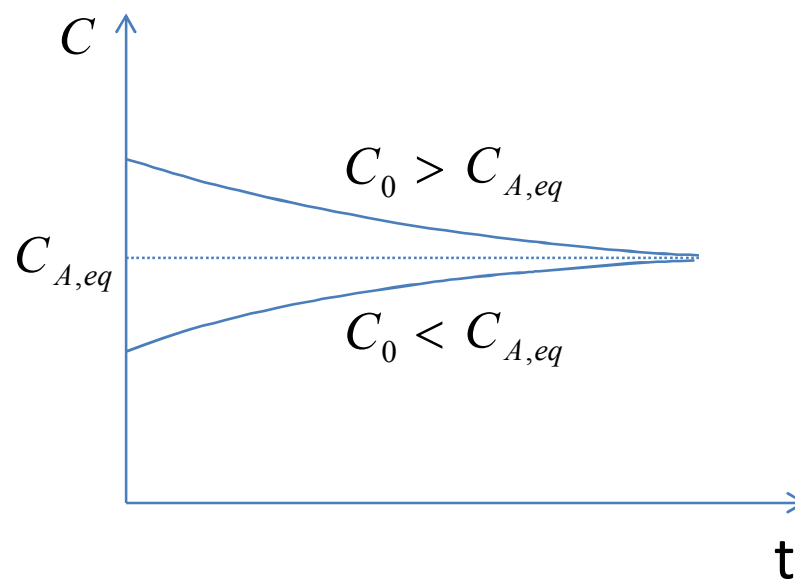
1. Phản ứng thuận nghịch

Phản ứng thuận nghịch bậc 1: $A \xrightleftharpoons[k']{k} B$

Tốc độ phản ứng thuận : $r = kC_A$

Tốc độ phản ứng nghịch: $r' = k'C_B$

Khi đạt cân bằng : $r = r' \rightarrow kC_{A,eq} = k'C_{B,eq} ; K_{eq} = k/k' = C_{B,eq}/C_{A,eq}$
 K_{eq} hằng số cân bằng



1. Phản ứng thuận nghịch

Tốc độ phản ứng: $r = -\frac{dC_A}{dt} = kC_A - k'C_B$

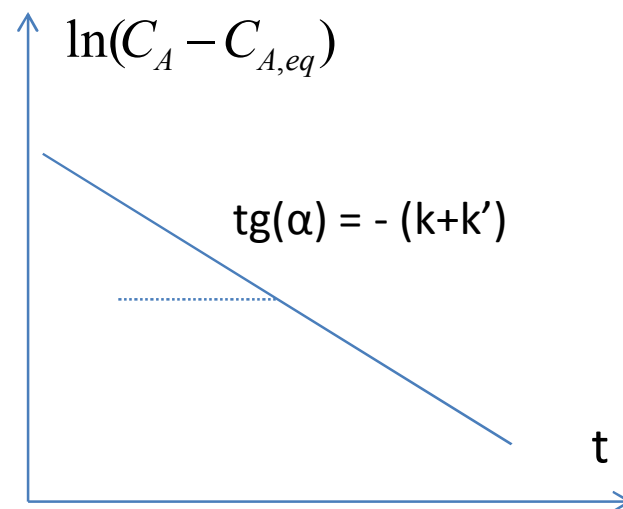
Cân bằng chất: $C_B = C_{B,0} + (C_{A,0} - C_A)$

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A - k'[C_{B,0} + (C_{A,0} - C_A)]$$

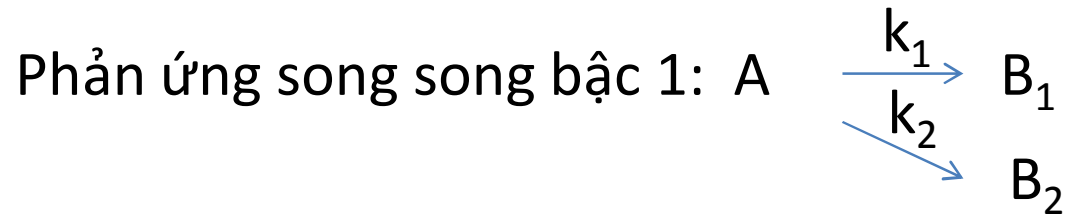
Phản ứng cân bằng: $-\frac{dC_A}{dt} = 0 \longrightarrow C_{A,eq} = \frac{k'}{k+k'}(C_{A,0} + C_{B,0})$

$$r = -\frac{dC_A}{dt} = -\frac{d(C_A - C_{A,eq})}{dt} = (k+k')(C_A - C_{A,eq})$$

$$C_A - C_{A,eq} = (C_{A,0} - C_{A,eq})e^{-(k+k')t}$$



2. Phản ứng song song



Tốc độ phản ứng 1: $r_1 = k_1 C_A$

Tốc độ phản ứng 2: $r_2 = k_2 C_A$

Tốc độ tiêu thụ A : $r = r_1 + r_2 = k_1 C_A + k_2 C_A = k C_A = -dC_A/dt$
($k = k_1 + k_2$)

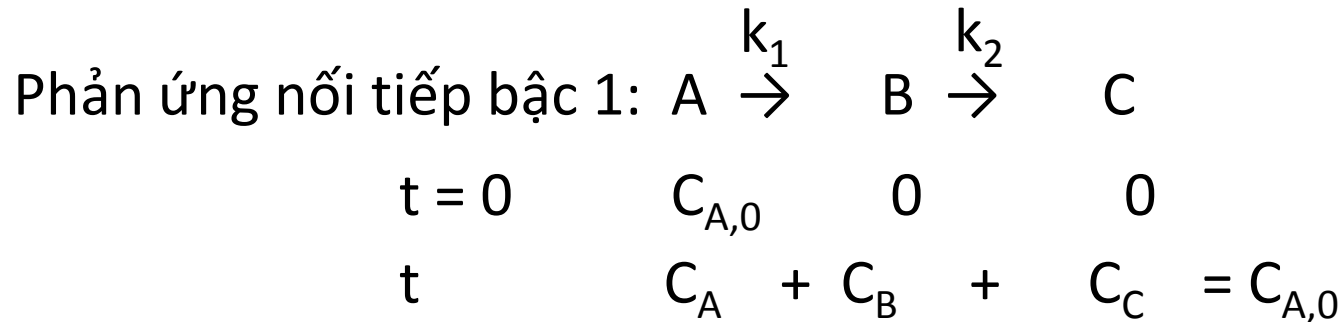
$$\longrightarrow \ln \frac{C_{A,0}}{C_A} = kt \quad \text{hay} \quad C_A = C_{A,0} e^{-(k_1+k_2)t}$$

Nhận xét: phương trình giống với phản ứng bậc 1

Tỉ lệ tạo sản phẩm $B_1/B_2 = r_1/r_2 = k_1/k_2$

$$C_{B1} = \frac{k_1 C_{A,0}}{k_1 + k_2} (1 - e^{-(k_1+k_2)t}) \quad C_{B2} = \frac{k_2 C_{A,0}}{k_1 + k_2} (1 - e^{-(k_1+k_2)t})$$

3. Phản ứng nối tiếp



Tốc độ tiêu thụ A : $-dC_A/dt = k_1 C_A \longrightarrow C_A = C_{A,0} e^{-k_1 t}$ (pt. 3.1)

Tốc độ biến thiên B : $dC_B/dt = k_1 C_A - k_2 C_B$ (pt. 3.2)

Thay (pt. 3.1) vào (pt. 3.2) và lấy tích phân:

$$C_B = \frac{k_1 C_{A,0}}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) \quad (\text{pt. 3.3})$$

Tốc độ hình thành C:

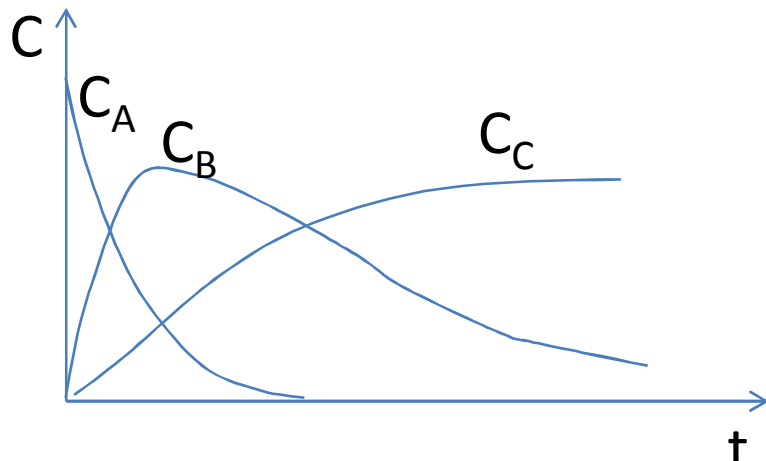
$$C_C = C_{A,0} - C_A - C_B = C_{A,0} \left[1 + \frac{1}{k_2 - k_1} (k_1 e^{-k_2 t} - k_2 e^{-k_1 t}) \right] \quad (\text{pt. 3.4})$$

3. Phản ứng nối tiếp

- Xét trường hợp 1 $k_1 \gg k_2$:
A chuyển hóa rất nhanh thành B,
B phản ứng chậm thành C

$$(\text{pt. 3.4}) \rightarrow C_C = C_{A,0}[1 - e^{-k_2 t}]$$

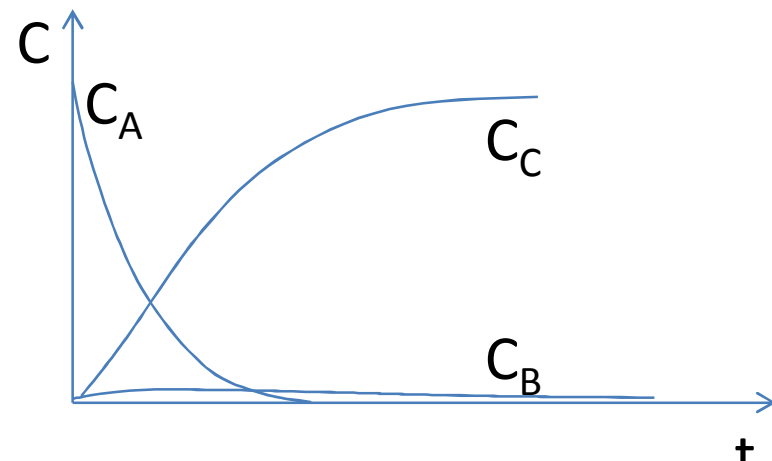
Tốc độ hình thành C không phụ thuộc vào k_1 , phụ thuộc vào k_2



- Xét trường hợp 2 $k_2 \gg k_1$:
A chuyển hóa chậm thành B, B
phản ứng nhanh thành C

$$(\text{pt. 3.4}) \rightarrow C_C = C_{A,0}[1 - e^{-k_1 t}]$$

Tốc độ hình thành C không phụ thuộc vào k_2 , phụ thuộc vào k_1



Tốc độ phản ứng phức tạp gồm nhiều bước nối tiếp phụ thuộc vào giai đoạn chậm nhất