

## NHIỆT ĐỘNG HÓA HỌC

**Nhiệt động hóa học** – là môn khoa học nghiên cứu các quy luật về sự chuyển biến tương hỗ giữa hóa năng và các dạng năng lượng khác trong quá trình hóa học. Giá trị và sức mạnh của nhiệt động hóa học là ở chỗ không cần phải làm thí nghiệm – thường rất tốn tiền và thì giờ - hoàn toàn chỉ dựa vào nhiệt động hóa học xác định những hiệu ứng năng lượng của các quá trình hóa học mà có thể tính toán trả lời các vấn đề sau đây:

- ✚ **Hiệu ứng nhiệt của các phản ứng hóa học.** (chương: Nhiệt hóa học)
- ✚ **Dự đoán mức độ tự diễn ra của các quá trình hóa học.**  
( chương: Mức độ và chiều hướng diễn ra của các quá trình hóa học)
- ✚ **Điều kiện cân bằng và các yếu tố bên ngoài ảnh hưởng đến cân bằng.**  
**Xác định hiệu suất phản ứng.** (chương: Cân bằng hóa học)

## CHƯƠNG IV : NHIỆT HÓA HỌC

### I.CÁC KHÁI NIỆM CƠ BẢN

#### 1. Một số khái niệm cần thiết

**a. Hệ hóa học:** là phần vật chất vĩ mô (gồm một số lớn tiểu phân )được giới hạn để nghiên cứu, phần còn lại của thế giới xung quanh hệ được gọi là môi trường.

**Ví dụ :** Hệ ( 1 lít dd NaCl 1M và bình chứa ) + **Môi trường** ( không khí xung quanh)

Hệ có thể tương tác với bên ngoài qua những ranh giới của nó. Tương tác đó bao gồm việc trao đổi năng lượng (dưới dạng nhiệt và công ). Người ta phân biệt:

- ✓ **Hệ hở:** là hệ có thể trao đổi cả chất và năng lượng với môi trường.
- ✓ **Hệ kín:** là hệ không có sự trao đổi chất mà chỉ có sự trao đổi năng lượng với môi trường và thể tích của nó có thể thay đổi
- ✓ **Hệ cô lập:** là hệ không trao đổi cả chất và năng lượng với môi trường. Thể tích của nó phải không đổi, vì mọi biến thiên thể tích đều gắn liền với việc sản ra công chống áp suất ngoài (trừ trường hợp áp suất ngoài bằng không ).
- ✓ **Hệ đoạn nhiệt:** là hệ không trao đổi chất và nhiệt, song có thể trao đổi công với môi trường.
- ✓ **Hệ đồng thể:** là hệ mà các thuộc tính không đổi hoặc thay đổi đều liên tục từ điểm này qua điểm kia, hoàn toàn không có những bề mặt phân chia trong hệ. Bề mặt phân chia là những bề mặt vật lý mà khi đi qua nó có sự thay đổi đột biến những thuộc tính vĩ mô nào đó của hệ.

- ✓ **Hệ đồng nhất:** là hệ có thành phần như nhau và có các thuộc tính như nhau ở khắp mọi điểm của hệ. Nếu hệ không được như thế thì hệ là không đồng nhất.

Hệ đồng nhất bắt buộc phải là đồng thể. Nhưng hệ đồng thể không tất yếu là hệ đồng nhất.

**Ví dụ-** khí quyển là một hệ đồng thể, không có bề mặt phân chia, nhưng các thuộc tính của nó như áp suất, tỉ khối v.v.. thay đổi dần theo độ cao, nên nó là hệ không đồng nhất.

- ✓ **Hệ dị thể:** là hệ có những bề mặt phân chia.

**Ví dụ-** hệ hợp bởi nước lỏng và nước đá là hệ dị thể. Bề mặt phân chia nước lỏng và nước đá là một bề mặt vật lý biểu thị sự đứt đoạn trong những thuộc tính của nước: khi đi qua nó, tỉ khối của nước thay đổi đột biến (tỉ khối của nước lỏng xấp xỉ 1, tỉ khối nước đá xấp xỉ 0,9)

- ✓ **Khái niệm pha:** Tập hợp những phần đồng thể giống nhau của một hệ hợp thành một pha.

Hệ đồng thể bao giờ cũng là hệ một pha. Hệ dị thể là hệ có từ hai pha trở lên.

**Ví dụ-** hỗn hợp các chất khí luôn luôn là hệ đồng thể

**Ví dụ-** hệ nước lỏng – nước đá là hệ dị thể có hai pha

**Hệ cân bằng:** là hệ có nhiệt độ, áp suất, thành phần giống nhau ở mọi điểm của hệ và không thay đổi theo thời gian.

### **b. Trạng thái của hệ và thông số trạng thái, hàm trạng thái**

\***Trạng thái của hệ** được xác định bằng tập hợp các thông số trạng thái biểu diễn các tính chất lý hoá của hệ như: nhiệt độ, áp suất, thể tích, năng lượng....

Các thông số trạng thái liên hệ với nhau bằng các phương trình trạng thái.

Các thông số trạng thái được chia làm hai loại:

\* **Thông số dung độ:** là những thông số tỷ lệ với lượng chất như: thể tích, khối lượng, năng lượng, ... và có tính chất cộng.

\* **Thông số cường độ:** là những thông số không phụ thuộc vào lượng chất như: nhiệt độ, áp suất, nồng độ, khối lượng riêng... Các thông số này không có tính chất cộng

\* **Trạng thái cân bằng:** Một hệ ở trạng thái cân bằng nhiệt động khi giá trị của các thông số trạng thái ở mọi điểm của hệ phải như nhau và không thay đổi theo thời gian.

✚ **Hàm trạng thái**- là hàm số của các thông số trạng thái, đặc trưng cho trạng thái của hệ.

Các thông số trạng thái có thể là một hàm trạng thái nhưng đồng thời cũng có thể là biến số trạng thái.

Chẳng hạn đối với khí lý tưởng:

$$P = \frac{nRT}{V} = f(T, V) \quad P : \text{là hàm trạng thái} ; \quad T, V : \text{là biến số trạng thái.}$$

$$V = \frac{nRT}{P} = f(T, P) \quad V : \text{là hàm trạng thái} ; \quad T, P : \text{là biến số trạng thái.}$$

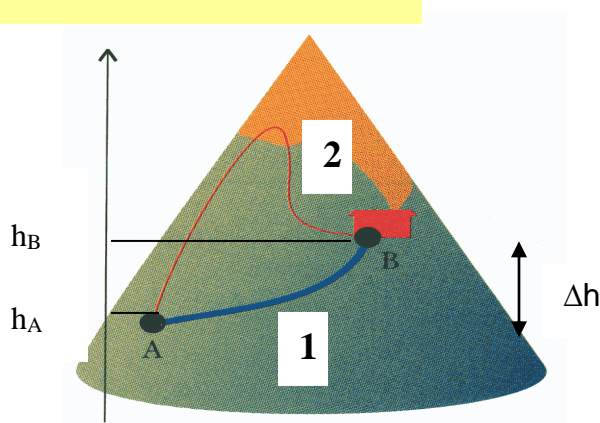
Trong nhiệt động hóa học, sau này ta thường nói đến các hàm trạng thái khác như : nội năng U, entanpi H, entropi S, thế đẳng nhiệt đẳng áp G...

✚ **Đặc điểm của hàm trạng thái :**

- Các hàm trạng thái có giá trị chỉ phụ thuộc vào trạng thái của hệ.
- Trong quá trình biến đổi trạng thái bất kỳ, thì biến thiên của hàm trạng thái chỉ phụ thuộc vào trạng thái đầu và cuối mà không phụ thuộc vào cách tiến hành biến đổi trạng thái nghĩa là không phụ thuộc các trạng thái trung gian ( tức không phụ thuộc vào đường đi )

**Ví dụ :** Xét sự biến đổi độ cao cho hai cách tiến thành khác nhau :

Độ cao so với mực nước biển



Khi thực hiện quá trình biến đổi từ A đến B theo hai con đường 1 và 2 thì độ biến đổi độ cao so với mực nước biển vẫn như nhau:  
 $\Delta h = h_B - h_A$

### TRẠNG THÁI CHUẨN (°)

- ❖ Áp suất chuẩn là 1 atm.
- ❖ Nhiệt độ có thể chọn nhiệt độ bất kỳ, nhưng thường lấy ở 25°C ( nhiệt độ chuẩn).
- ❖ Chất phải ở trạng thái tập hợp bền nhất hoặc thông thường nhất ở điều kiện đã cho.
- ❖ Đối với chất lỏng và chất rắn phải ở dạng nguyên chất, bền nhất hoặc thường gặp nhất ở 1 atm và ở nhiệt độ T đã cho.

**Ví dụ :** ở 1 atm, 25°C đối với cacbon thì dạng tinh thể bền là graphit (than chì) chứ không phải là kim cương ; đối với lưu huỳnh dạng bền là tà phương chứ không phải đơn tà.

- ❖ Đối với chất khí, ở nhiệt độ T trạng thái chuẩn là trạng thái giả định của khí nguyên chất, bền nhất hoặc thường gặp nhất (ví dụ oxy  $O_2$  , chứ không phải ozon  $O_3$  ) xem như khí lý tưởng có áp suất riêng phần  $P=1\text{ atm}$ .
- ❖ Dung dịch thì nồng độ 1 mol/l.

**c. Quá trình:** là con đường mà hệ chuyển từ trạng thái này sang trạng thái khác ( có sự biến đổi ít nhất 1 thông số trạng thái)

**\*Quá trình thuận nghịch:** là quá trình có thể xảy ra theo 2 chiều ngược nhau và tương đối chậm, sao cho ở mỗi thời điểm người ta có thể biết được trạng thái của hệ. Quá trình thuận và quá trình nghịch cùng theo một con đường và do đó hệ không gây ra một biến đổi nào về môi trường xung quanh.

**\*Quá trình bất thuận nghịch:** là quá trình không tuân theo các điều kiện trên.

Tất cả các quá trình tự diễn ra trong tự nhiên đều là bất thuận nghịch.

✓ **Quá trình đẳng áp:**  $p = \text{const}$

✓ **Quá trình đẳng tích:**  $V = \text{const}$

✓ **Quá trình đẳng nhiệt:**  $T = \text{const}$

✓ **Quá trình đoạn nhiệt :**  $Q = \text{const}$ . Hệ không trao đổi nhiệt song có thể trao đổi công với môi trường xung quanh.

#### **d .Nhiệt và công**

**Nhiệt (Q)** – là thước đo sự chuyển động nhiệt hỗn loạn của các tiểu phân.

**Công (A)** – là thước đo của sự chuyển động có trật tự có hướng của các tiểu phân trong trường lực.

Nhiệt và công là hai hình thức trao đổi năng lượng của hệ với môi trường.

Nhiệt và công chỉ xuất hiện trong quá trình biến đổi trạng thái của hệ nên nó là hàm của quá trình và phụ thuộc vào cách thức của quá trình biến đổi.

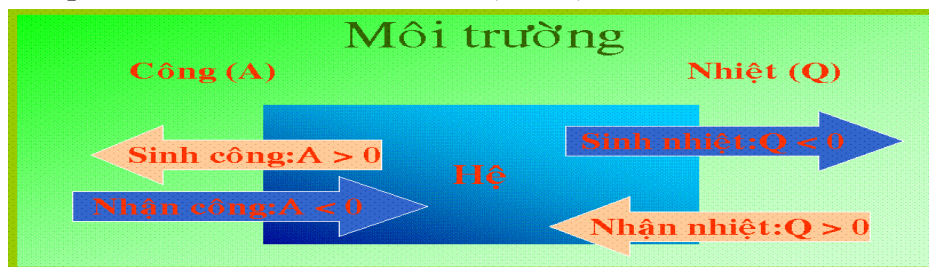
#### **QUI ƯỚC VỀ DẤU CỦA NHIỆT VÀ CÔNG ( theo nhiệt động học)**

**CÔNG** – hệ sinh công  $\rightarrow$  công có dấu + (  $A > 0$  )

hệ nhận công  $\rightarrow$  công có dấu – (  $A < 0$  )

**NHIỆT** – hệ thu nhiệt  $\rightarrow$  nhiệt có dấu dương (  $Q > 0$  )

hệ phát nhiệt  $\rightarrow$  nhiệt có dấu âm ( $Q < 0$ )



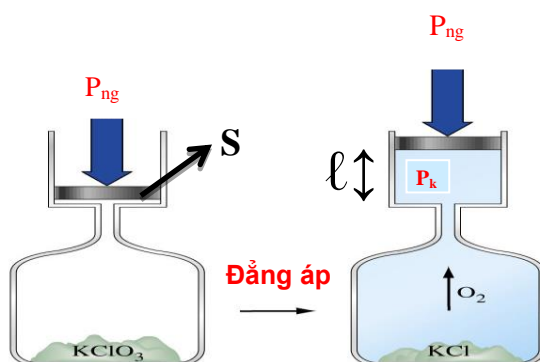
✚ **CÔNG** – tổng quát công  $A$  mà hệ thực hiện được trong quá trình hệ chuyển từ trạng thái 1 sang trạng thái 2 để chống lại các lực bên ngoài tác dụng lên hệ như áp suất, điện trường, từ trường, sức căng bề mặt .....

Trong các quá trình hóa học, hệ chỉ trao đổi công với môi trường ngoài khi có sự biến thiên thể tích, đó là công dẫn nở (công cơ học)

Công dẫn nở bằng tích của lực tác dụng  $F$  của môi trường ngoài với quãng đường dịch chuyển  $\ell$ .

Khi thực hiện quá trình hóa học ở điều kiện đẳng áp, công dẫn nở được xác định như sau:

$$A = F \cdot \ell = P_{ng} \cdot S \cdot \ell = P_{ng} \cdot \Delta V$$



Đối với các phản ứng hóa học, trên thực tế công dẫn nở chỉ cần xét khi có sự thay đổi thể tích của các chất khí tham gia phản ứng. Đối với phản ứng trong môi trường lỏng hay đối với chất rắn tham gia phản ứng thì sự biến thiên thể tích quá nhỏ nên công dẫn nở được coi như bằng không.

Ở điều kiện phản ứng đẳng áp, đẳng nhiệt:  $P_{ng} = P_k$

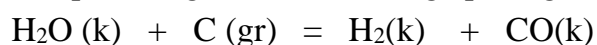
Vì khí được xem là khí lý tưởng, nên ta có:  $P_k \cdot V = nRT$  hay  $P_k \cdot \Delta V = \Delta n \cdot RT$

Trong đó  $\Delta n$  là biến thiên số mol khí trong phản ứng.

$\Delta n$  = tổng số mol khí của sản phẩm - tổng số mol khí chất đầu.

Công dẫn nở:  $A = P_{ng} \cdot \Delta V = P_k \cdot \Delta V = \Delta n \cdot RT$

**Ví dụ** - Cho phản ứng ở điều kiện đẳng áp đẳng nhiệt ở 273K:



Dựa vào phản ứng ta có :  $\Delta n = 2-1=1$  (mol)

Công dẫn nở cho phản ứng trên là :  $A = (1).(8,314).(273) = 22,7.10^2 \text{ J} > \text{hệ sinh công}$

**Ghi chú :** Các đơn vị năng lượng chuyển đổi:

$$1 \text{ cal} = 4,1840 \text{ J} = 0,0413 \text{ l.atm} = 41,3 \text{ cm}^3 \cdot \text{atm}$$

$$1 \text{ J} = 0,239 \text{ cal} = 9,869 \text{ cm}^3 \cdot \text{atm} = 9,869 \cdot 10^{-3} \text{ l.atm}$$


$$1 \text{ l.atm} = 101,33 \text{ J} = 24,2 \text{ cal}$$

 **NHIỆT ĐỘ**- các tính toán nhiệt độ thường sử dụng nhiệt độ Kenvin (K)

$$T(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273,15$$

## II. CÁC ĐẠI LƯỢNG NHIỆT ĐỘNG VÀ HIỆU ỨNG NHIỆT

### 1. Các đại lượng nhiệt động

 **Nội năng U:** là năng lượng sẵn có, ẩn dấu bên trong hệ, bao gồm:

- ✓ Năng lượng của tất cả các dạng chuyển động tịnh tiến, chuyển động quay, chuyển động dao động của phân tử, nguyên tử, hạt nhân, electron trong hệ.
- ✓ Năng lượng tương tác đẩy của phân tử, nguyên tử, hạt nhân, electron.
- ✓ Năng lượng bên trong hạt nhân.

**Nói cách khác, nội năng là năng lượng toàn phần của hệ trừ động năng và thế năng toàn hệ.**

**Đơn vị đo nội năng :** kJ/mol ; kcal/mol                      1 cal = 4,184J

- Nội năng hệ nói chung phụ thuộc vào bản chất, lượng chất, nhiệt độ, áp suất, thể tích và thành phần. Nhưng đối với hệ gồm n mol khí lý tưởng, **nội năng của khí lý tưởng chỉ phụ thuộc vào nhiệt độ** vì áp suất và thể tích không ảnh hưởng lên thế năng của hạt.
- Người ta không thể xác định được trị tuyệt đối của nội năng ngay cả với một hệ đơn giản nhất (vì không thể đưa hệ về nhiệt độ 0 tuyệt đối). Tuy nhiên trong nhiệt động học người ta không cần xét giá trị tuyệt đối của nội năng mà chỉ cần xác định biến thiên  $\Delta U$  của nội năng trong quá trình biến đổi trạng thái.
- Khi chuyển từ trạng thái có nội năng  $U_1$  sang trạng thái có nội năng  $U_2$  dựa vào năng lượng phát ra hay thu vào của một hệ người ta có thể suy ra một cách chính xác độ biến thiên nội năng  $\Delta U$  của hệ :  $\Delta U = U_2 - U_1$



**Khi truyền một nhiệt lượng  $Q$  cho hệ, trong trường hợp chung, lượng nhiệt đó sẽ dùng để làm tăng nội năng của hệ và thực hiện một công  $A$  chống lại các lực bên ngoài tác dụng lên hệ.  $Q = \Delta U + A$  (đl bảo toàn năng lượng)**

Trong các quá trình hóa học công  $A$  thường là công giãn nở :

$$\text{Công giãn nở } A = P \Delta V \rightarrow Q = \Delta U + P \Delta V$$

$$\text{Nếu quá trình là đẳng tích: } \Delta V = 0 \text{ (công giãn nở } A = 0) \rightarrow Q_v = \Delta U$$

→ **Trong quá trình đẳng tích, nếu hệ không thực hiện một công nào khác ngoài công giãn nở thì nhiệt lượng  $Q_v$  cung cấp cho hệ sẽ làm thay đổi nội năng  $U$  của hệ.**

Tuy nhiên các phản ứng hóa học thường được thực hiện ở áp suất không đổi của khí quyển là 1 atm

### **Entanpi $H$**

Trong trường hợp áp suất không đổi ta có:

$$Q_p = \Delta U + P \Delta V \quad \text{mà} \quad \begin{aligned} \Delta U &= U_2 - U_1 \\ \Delta V &= V_2 - V_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Nên: } Q_p &= (U_2 - U_1) + P(V_2 - V_1) \\ &= (U_2 - P V_2) - (U_1 - P V_1) \end{aligned}$$

$$\text{đặt: } H = U + P V.$$

**$H$  được gọi là entanpi** và cũng là một thông số trạng thái của hệ.

$H$  bao gồm  $U$  và khả năng sinh công tiềm ẩn của hệ.

Vậy  $H$  là dự trữ năng lượng toàn phần của hệ.

$$\text{Vậy: } Q_p = H_2 - H_1 = \Delta H$$

→ **Trong quá trình đẳng áp, nếu hệ không thực hiện công nào khác ngoài công giãn nở thì nhiệt lượng  $Q_p$  cung cấp cho hệ sẽ làm thay đổi entanpi của hệ**

**Đơn vị đo của entanpi :** kJ/mol hay kcal/mol

## **2. Hiệu ứng nhiệt của các quá trình hóa học và phương trình nhiệt hóa học**

### **a. Hiệu ứng nhiệt của quá trình hóa học**

**Hiệu ứng nhiệt:** là lượng nhiệt mà hệ thu vào hay phát ra trong quá trình hóa học dùng để thay đổi nội năng (đẳng tích) hoặc entanpi (đẳng áp) của hệ

✓ Các phản ứng hóa học xảy ra trong điều kiện đẳng tích, hiệu ứng của nhiệt phản ứng hóa học chính là độ thay đổi nội năng :  $Q_v = \Delta U_v$

✓ Thông thường các phản ứng hóa học xảy ra trong điều kiện đẳng áp nên hiệu ứng của nhiệt phản ứng hóa học chính là độ thay đổi entanpi :  $Q_p = \Delta H_p$

**Quan hệ giữa  $\Delta H$  và  $\Delta U$  trong quá trình đẳng áp:  $Q_p = \Delta H_p = \Delta U_p + P \cdot \Delta V$**

➤ Trong các phản ứng chỉ có chất lỏng và chất rắn tham gia:  $\Delta V \approx 0$ . Nếu những phản ứng này được thực hiện ở áp suất tương đối bé như áp suất khí quyển thì  $P \Delta V \approx 0$  nên  $\Delta H \approx \Delta U$ .

➤ Trong các phản ứng có chất phản ứng hay sản phẩm là chất khí,  $\Delta H$  và  $\Delta U$  có thể khác nhau

Đối với khí lý tưởng:  $PV = nRT$

Nên :  $P \Delta V = \Delta n RT$

Khi  $\Delta n = 0$  thì  $\Delta H = \Delta U$

Khi  $\Delta n \neq 0$  thì  $\Delta H = \Delta U + \Delta n RT$

 **Quan hệ giữa hiệu ứng nhiệt đẳng tích và hiệu ứng nhiệt đẳng áp:**

$$Q_v = \Delta U_v$$

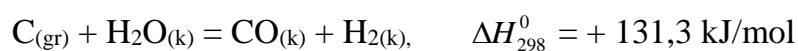
$$Q_p = \Delta H_p = \Delta U_p + P \cdot \Delta V$$

$$\text{Do } \Delta U_v \approx \Delta U_p$$

$$\text{Ta có: } Q_p - Q_v \approx P \cdot \Delta V \approx \Delta n \cdot RT$$

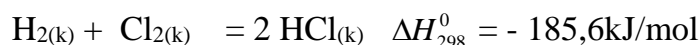
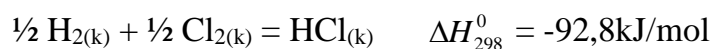
## b. Phương trình nhiệt hóa học

- ✓ *Phương trình nhiệt hóa học* là phương trình phản ứng hóa học thông thường có ghi kèm hiệu ứng nhiệt và trạng thái tập hợp của các chất tham gia phản ứng và sản phẩm
- ✓ *Quy ước*: Phản ứng thu nhiệt có  $\Delta H > 0$   
Phản ứng tỏa nhiệt có  $\Delta H < 0$
- ✓ *Dự đoán chiều hướng diễn ra của phản ứng hóa học (đẳng áp)*: Trong điều kiện bình thường (nhiệt độ thấp), phản ứng tỏa nhiệt ( $\Delta H < 0$ ) là phản ứng có khả tự xảy ra
- ✓ *Hiệu ứng nhiệt tiêu chuẩn* :  $\Delta H_T^0$ 
  - Áp suất chuẩn : 1 atm
  - Nhiệt độ T , thường chọn ở 298K (25°C) Ký hiệu  $\Delta H_{298}^0$
  - Các chất phản ứng và sản phẩm tạo thành đều ở cùng nhiệt độ T và ở trạng thái chuẩn (nếu chất khí thì  $P_k = 1$  atm, nếu dung dịch thì  $C = 1$  mol/l)



- ✓ **Chú ý:** Hiệu ứng nhiệt phản ứng tỷ lệ với lượng chất phản ứng và sản phẩm:





### c. Nhiệt tạo thành và nhiệt đốt cháy:

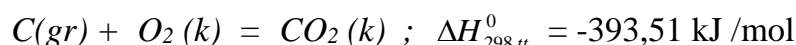
✚ **Nhiệt tạo thành:** là hiệu ứng nhiệt của phản ứng tạo thành 1 mol chất từ các đơn chất ứng với trạng thái tự do bền nhất trong những điều kiện đã cho về áp suất và nhiệt độ.

*Khi điều kiện đã cho là điều kiện chuẩn thì ta có nhiệt tạo thành tiêu chuẩn.*

✓ Ký hiệu nhiệt tạo thành tiêu chuẩn:  $\Delta H_{298,tt}^0$

Các đơn chất bền ở điều kiện chuẩn như:  $\text{Cl}_{2(k)}$ ,  $\text{H}_{2(k)}$ ,  $\text{O}_{2(k)}$ ,  $\text{N}_{2(k)}$ ,  $\text{Br}_2(\text{lỏng})$ ,  $\text{I}_2(\text{rắn})$ ,  $\text{C}_{(gr)}$ ,  $\text{S}(\text{tả phương})$ .

**Ví dụ:** ở điều kiện chuẩn, phản ứng tạo thành  $\text{CO}_2(k)$  là:



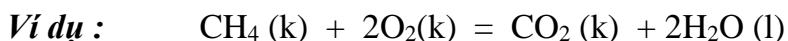
✓ Nhiệt tạo thành của các đơn chất bền ở điều kiện tiêu chuẩn được quy ước bằng 0

✓ Nhiệt tạo thành tiêu chuẩn của ion  $\text{H}^+ .n\text{H}_2\text{O}$  trong dung dịch nước được quy ước bằng không.

**Nhận xét:** *Phản ứng phân hủy là phản ứng nghịch của phản ứng tạo thành.*

✚ **Nhiệt đốt cháy:** là hiệu ứng nhiệt của phản ứng đốt cháy 1 mol chất đó bằng khí oxy tạo thành các oxit cao bền ở điều kiện phản ứng.

✚ Đối với các hợp chất hữu cơ là hiệu ứng nhiệt của phản ứng đốt cháy bằng oxy 1 mol chất hữu cơ để tạo thành khí  $\text{CO}_2$ , nước lỏng và một số sản phẩm khác.



✚ Cần chú ý rằng trong một số trường hợp, sản phẩm cháy có thể không phải là oxyt. Chấn hạn các chất chứa halogen cháy có thể tạo thành halogen tự do, hydro halogenua...

✓ Khi điều kiện đã cho là điều kiện chuẩn thì ta có nhiệt đốt cháy tiêu chuẩn.

Ký hiệu nhiệt đốt cháy tiêu chuẩn:  $\Delta H_{298,đc}^0$

✓ Nhiệt đốt cháy tiêu chuẩn của khí  $\text{CO}_2$  và nước lỏng được quy ước bằng không.

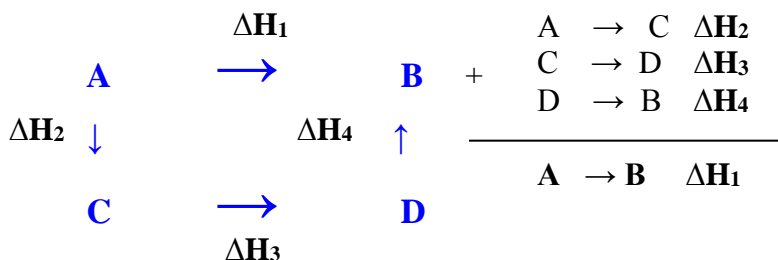
**d. Sự phụ thuộc của hiệu ứng nhiệt vào nhiệt độ**

$\Delta H$  thay đổi theo nhiệt độ không nhiều lắm. Nếu nhiệt độ  $T$  không cao quá, một cách gần đúng có thể xem  $\Delta H^0_T \approx \Delta H^0_{298}$ .

**III. Định luật nhiệt Hess và hệ quả****1. Định luật Hess:**

Hiệu ứng nhiệt của phản ứng hóa học ở điều kiện đẳng áp hay đẳng tích chỉ phụ thuộc vào bản chất và trạng thái của các chất đầu và sản phẩm cuối chứ không phụ thuộc vào đường đi của quá trình, nghĩa là không phụ thuộc vào số lượng và đặc điểm của các chất giai đoạn trung gian.

→ có thể cộng hay trừ những phương trình nhiệt hóa như những phương trình đại số.



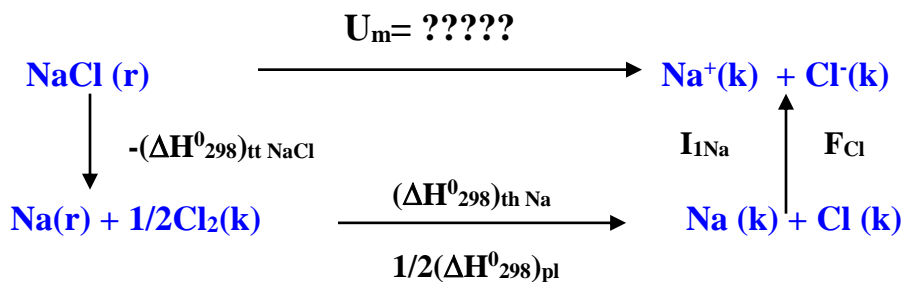
Hiệu ứng nhiệt của một phản ứng bằng tổng hiệu ứng nhiệt của các phản ứng trung gian ở cùng điều kiện.

$$\Delta H_1 = H_B - H_A = H_B - H_D + H_D - H_C + H_C - H_A = \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4$$

➤ **Hệ quả 1 (định luật Lavoisier – Laplace):** Hiệu ứng nhiệt của phản ứng thuận có độ lớn bằng hiệu ứng nhiệt của phản ứng nghịch nhưng ngược dấu.

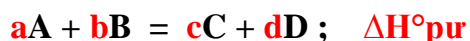
**➤ Hệ quả 2 – Chu trình BORH HABER**

Tính năng lượng mạng tinh thể ion của NaCl ở điều kiện chuẩn, 298K.



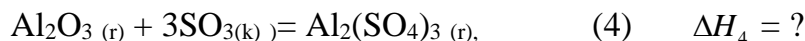
$$U_m = -(\Delta H^0_{298})_{tt \text{ NaCl}} + (\Delta H^0_{298})_{th \text{ Na}} + \frac{1}{2}(\Delta H^0_{298})_{pl \text{ Cl}_2} + I_{\text{Na}} + F_{\text{Cl}}$$

➤ **Hệ quả 3-** Hiệu ứng nhiệt của phản ứng bằng tổng nhiệt tạo thành của các sản phẩm trừ đi tổng nhiệt tạo thành của các chất đầu.

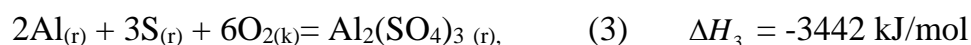


$$\Delta H^{\circ}_{\text{pr}} = [c\Delta H^{\circ}_{\text{tt}}(C) + d\Delta H^{\circ}_{\text{tt}}(D)] - [a\Delta H^{\circ}_{\text{tt}}(A) + b\Delta H^{\circ}_{\text{tt}}(B)]$$

**Ví dụ :** Tính hiệu ứng nhiệt của phản ứng sau:



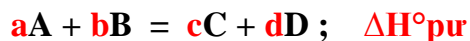
Biết nhiệt tạo thành từ các nguyên tố của các chất sau đây:



giải: ta có  $(4) = (3) - [(1) - 3 \times (2)]$

$$\rightarrow \Delta H_4 = \Delta H_3 - (\Delta H_1 + 3\Delta H_2)$$

➤ **Hệ quả 4:** Hiệu ứng nhiệt của phản ứng bằng tổng nhiệt đốt cháy của các chất đầu trừ đi tổng nhiệt đốt cháy của các sản phẩm phản ứng



$$\Delta H^{\circ}_{\text{pr}} = [a\Delta H^{\circ}_{\text{dc}}(A) + b\Delta H^{\circ}_{\text{dc}}(B)] - [c\Delta H^{\circ}_{\text{dc}}(C) + d\Delta H^{\circ}_{\text{dc}}(D)]$$

➤ **Hệ quả 5** – Hiệu ứng nhiệt của phản ứng bằng tổng năng lượng liên kết của chất đầu trừ đi tổng năng lượng liên kết của sản phẩm.

Hiệu ứng nhiệt của phản ứng bằng tổng năng lượng liên kết bị đứt (của chất đầu) trừ đi tổng năng lượng liên kết ráp (của sản phẩm) .

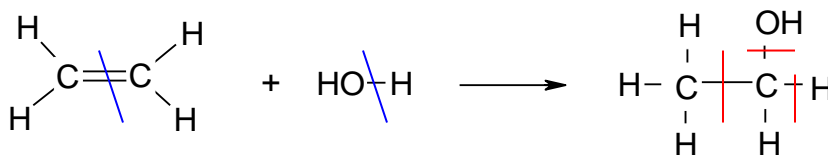
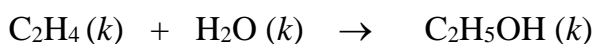
➤ **Chú ý :** phản ứng với các chất tham gia là hợp chất cộng hóa trị ở trạng thái khí.

**TABLE 7.1 Average Bond Dissociation Energies,  $D$  (kJ/mol)<sup>a</sup>**

H—H 436 <sup>a</sup>	C—H 410	N—H 390	O—H 460	F—F 159 <sup>a</sup>
H—C 410	C—C 350	N—C 300	O—C 350	Cl—Cl 243 <sup>a</sup>
H—F 570 <sup>a</sup>	C—F 450	N—F 270	O—F 180	Br—Br 193 <sup>a</sup>
H—Cl 432 <sup>a</sup>	C—Cl 330	N—Cl 200	O—Cl 200	I—I 151 <sup>a</sup>
H—Br 366 <sup>a</sup>	C—Br 270	N—Br 240	O—Br 210	S—F 310
H—I 298 <sup>a</sup>	C—I 240	N—I —	O—I 220	S—Cl 250
H—N 390	C—N 300	N—N 240	O—N 200	S—Br 210
H—O 460	C—O 350	N—O 200	O—O 180	S—S 225
H—S 340	C—S 260	N—S —	O—S —	

Multiple covalent bonds<sup>b</sup>

C=C 611	C≡C 835	C=O 732	O=O 498 <sup>a</sup>	N≡N 945 <sup>a</sup>
---------	---------	---------	----------------------	----------------------

**Ví dụ :** Tính hiệu ứng nhiệt tiêu chuẩn  $\Delta H^0_{298}$  của phản ứng sau ở 298K :

$$\begin{aligned}
 \Delta H^0_{298} &= \sum E(\text{liên kết đứt}) - \sum E(\text{liên kết tạo thành}) \\
 &= \sum E(\text{H-O} + \text{C=C}) - \sum E(\text{H-C} + \text{C-O} + \text{C-C}) \\
 &= (460 + 835) - (410 + 350 + 350) = \mathbf{-185 \text{ kJ/mol} < 0}
 \end{aligned}$$