

Chuyên đề: Năng lượng liên kết và Tính biến thiên Enthalpy của phản ứng

Trong các phản ứng hóa học, sự phá vỡ các liên kết cũ và hình thành các liên kết mới luôn đi kèm với sự thay đổi về năng lượng. Hiểu rõ về năng lượng liên kết và biến thiên enthalpy giúp chúng ta dự đoán được một phản ứng là tỏa nhiệt hay thu nhiệt.

I. Năng lượng liên kết (E_b)

1. Khái niệm

Năng lượng liên kết, ký hiệu là E_b , là năng lượng cần thiết để phá vỡ 1 mol liên kết hóa học đó ở thể khí để tạo thành các nguyên tử ở thể khí.

Ngược lại, nó cũng chính là năng lượng tỏa ra khi 1 mol liên kết đó được hình thành từ các nguyên tử ở thể khí.

- **Đơn vị:** kilojoule trên mol (kJ/mol).
- **Ví dụ:** Để phá vỡ 1 mol liên kết H-H trong phân tử H_2 (khí) cần một năng lượng là 436 kJ. Vậy, năng lượng liên kết của H-H là $E_b(H-H) = 436 \text{ kJ/mol}$.

2. Đặc điểm và Ý nghĩa

- **Giá trị dương:** Năng lượng liên kết luôn có giá trị dương vì cần phải cung cấp năng lượng để phá vỡ một liên kết.

- **Độ bền liên kết:** Giá trị năng lượng liên kết càng lớn thì liên kết đó càng bền vững và càng khó bị phá vỡ.
- **Ý nghĩa:** Dựa vào giá trị năng lượng liên kết, ta có thể so sánh độ bền của các liên kết và dự đoán khả năng phản ứng của các chất. Nó là cơ sở để tính toán biến thiên enthalpy của phản ứng hóa học.

3. Bảng giá trị năng lượng liên kết trung bình của một số liên kết phổ biến

Trong các phân tử có nhiều nguyên tử, năng lượng của một loại liên kết có thể bị ảnh hưởng bởi các liên kết xung quanh. Do đó, người ta thường sử dụng giá trị năng lượng liên kết trung bình.

Liên kết	Năng lượng liên kết trung bình (kJ/mol)
H-H	436
C-H	418
C-C	346
C=C	612
C≡C	839
O-H	464
O=O	498
C=O (trong CO ₂)	799
N≡N	946
N-H	389
H-Cl	431

II. Biến thiên Enthalpy của phản ứng ($\Delta_r H$)

1. Khái niệm

Biến thiên enthalpy của phản ứng (hay nhiệt phản ứng), ký hiệu là $\Delta_r H$, là lượng nhiệt tỏa ra hoặc thu vào của một phản ứng hóa học ở một điều kiện xác định về nhiệt độ và áp suất.

Giá trị biến thiên enthalpy chuẩn của phản ứng được ký hiệu là $\Delta_r H^\circ_{298}$, đo ở điều kiện chuẩn (áp suất 1 bar đối với chất khí, nồng độ 1 mol/L đối với chất tan và nhiệt độ thường được chọn là 298 K hay 25 °C).

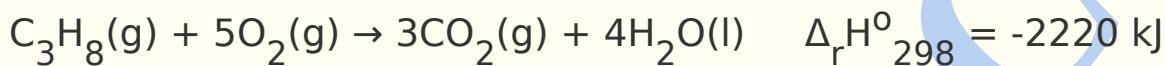
2. Phân loại phản ứng

- **Phản ứng tỏa nhiệt (Exothermic Reaction)**

Là phản ứng giải phóng năng lượng dưới dạng nhiệt ra môi trường.

$$\Delta_r H < 0$$

Ví dụ: Phản ứng đốt cháy khí gas (propane):



- **Phản ứng thu nhiệt (Endothermic Reaction)**

Là phản ứng hấp thụ năng lượng dưới dạng nhiệt từ môi trường.

$$\Delta_r H > 0$$

Ví dụ: Phản ứng nhiệt phân đá vôi (calcium carbonate):



III. Tính Biến thiên Enthalpy của phản ứng theo năng lượng liên kết

1. Nguyên tắc

Quá trình phản ứng hóa học có thể được xem như gồm hai giai đoạn:

1. **Giai đoạn 1:** Phá vỡ các liên kết trong phân tử chất đầu. Giai đoạn này cần cung cấp năng lượng, tức là thu nhiệt.
2. **Giai đoạn 2:** Hình thành các liên kết mới trong phân tử sản phẩm. Giai đoạn này giải phóng năng lượng, tức là tỏa nhiệt.

Biến thiên enthalpy của phản ứng chính là hiệu số giữa tổng năng lượng cần để phá vỡ các liên kết của chất đầu và tổng năng lượng tỏa ra khi hình thành các liên kết của sản phẩm.

2. Công thức tính

Biến thiên enthalpy chuẩn của phản ứng được tính theo công thức:

$$\Delta_r H^\circ_{298} = \Sigma E_b(\text{chất đầu}) - \Sigma E_b(\text{sản phẩm})$$

Trong đó:

- **$\Sigma E_b(\text{chất đầu})$:** Tổng năng lượng của tất cả các liên kết bị phá vỡ trong các phân tử chất phản ứng.
- **$\Sigma E_b(\text{sản phẩm})$:** Tổng năng lượng của tất cả các liên kết được hình thành trong các phân tử sản phẩm.

*Lưu ý quan trọng: Công thức này lấy tổng năng lượng liên kết của **chất đầu trừ đi sản phẩm**.*

3. Các bước tính toán chi tiết

1. **Bước 1: Viết và cân bằng phương trình hóa học.** Vẽ công thức cấu tạo của các chất để xác định rõ các loại liên kết và số lượng của chúng.

2. **Bước 2: Xác định và đếm số lượng các liên kết** bị phá vỡ trong chất đầu và các liên kết được hình thành trong sản phẩm.
3. **Bước 3: Tính tổng năng lượng cần để phá vỡ liên kết trong chất đầu ($\Sigma E_b(\text{chất đầu})$).** Lấy số lượng mỗi loại liên kết nhân với năng lượng liên kết tương ứng (tra bảng) rồi cộng tất cả lại.
4. **Bước 4: Tính tổng năng lượng tỏa ra khi hình thành liên kết trong sản phẩm ($\Sigma E_b(\text{sản phẩm})$).** Làm tương tự như bước 3 cho các chất sản phẩm.
5. **Bước 5: Áp dụng công thức và tính $\Delta_r H^\circ_{298}$.** Lấy kết quả bước 3 trừ đi kết quả bước 4.
6. **Bước 6: Kết luận.** Dựa vào dấu của $\Delta_r H^\circ_{298}$ để xác định phản ứng là tỏa nhiệt (dấu âm) hay thu nhiệt (dấu dương).

4. Ví dụ minh họa

Ví dụ 1: Tính biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy methane (CH_4)

Xét phản ứng: $\text{CH}_4(\text{g}) + 2\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{g})$

Cho năng lượng liên kết (kJ/mol): $E_b(\text{C-H}) = 418$, $E_b(\text{O=O}) = 498$, $E_b(\text{C=O}) = 799$, $E_b(\text{O-H}) = 464$.

• Bước 1 & 2: Xác định liên kết:

- Chất đầu: 1 phân tử CH_4 (có 4 liên kết C-H) và 2 phân tử O_2 (có 1 liên kết O=O mỗi phân tử).

- Sản phẩm: 1 phân tử CO_2 (có 2 liên kết $\text{C}=\text{O}$) và 2 phân tử H_2O (có 2 liên kết $\text{O}-\text{H}$ mỗi phân tử).

• **Bước 3: Tính ΣE_b (chất đầu):**

$$\Sigma E_b(\text{đầu}) = 4 \times E_b(\text{C-H}) + 2 \times E_b(\text{O}=\text{O}) = 4 \times 418 + 2 \times 498 = 1672 + 996 = 2668 \text{ kJ}$$

• **Bước 4: Tính ΣE_b (sản phẩm):**

$$\Sigma E_b(\text{sản phẩm}) = 2 \times E_b(\text{C}=\text{O}) + 2 \times [2 \times E_b(\text{O}-\text{H})] = 2 \times 799 + 4 \times 464 = 1598 + 1856 = 3454 \text{ kJ}$$

• **Bước 5: Tính $\Delta_r H^\circ_{298}$:**

$$\Delta_r H^\circ_{298} = \Sigma E_b(\text{đầu}) - \Sigma E_b(\text{sản phẩm}) = 2668 - 3454 = -786 \text{ kJ}$$

• **Bước 6: Kết luận:**

Vì $\Delta_r H^\circ_{298} = -786 \text{ kJ} < 0$, đây là phản ứng tỏa nhiệt.

Ví dụ 2: Tính biến thiên enthalpy của phản ứng tổng hợp ammonia (NH_3)

Xét phản ứng: $\text{N}_2(\text{g}) + 3\text{H}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NH}_3(\text{g})$

Cho năng lượng liên kết (kJ/mol): $E_b(\text{N}\equiv\text{N}) = 946$, $E_b(\text{H}-\text{H}) = 436$, $E_b(\text{N}-\text{H}) = 389$.

• **Bước 1 & 2: Xác định liên kết:**

- Chất đầu: 1 phân tử N_2 (1 lk $\text{N}\equiv\text{N}$), 3 phân tử H_2 (1 lk $\text{H}-\text{H}$ mỗi phân tử).
- Sản phẩm: 2 phân tử NH_3 (3 lk $\text{N}-\text{H}$ mỗi phân tử).

• **Bước 3: Tính ΣE_b (chất đầu):**

$$\Sigma E_b(\text{đầu}) = 1 \times E_b(\text{N}\equiv\text{N}) + 3 \times E_b(\text{H-H}) = 1 \times 946 + 3 \times 436 = 946 + 1308 = 2254 \text{ kJ}$$

• **Bước 4: Tính ΣE_b (sản phẩm):**

$$\Sigma E_b(\text{sản phẩm}) = 2 \times [3 \times E_b(\text{N-H})] = 6 \times 389 = 2334 \text{ kJ}$$

• **Bước 5: Tính $\Delta_r H^\circ_{298}$:**

$$\Delta_r H^\circ_{298} = \Sigma E_b(\text{đầu}) - \Sigma E_b(\text{sản phẩm}) = 2254 - 2334 = -80 \text{ kJ}$$

• **Bước 6: Kết luận:**

Vì $\Delta_r H^\circ_{298} = -80 \text{ kJ}$, đây là phản ứng tỏa nhiệt.

IV. Tổng kết

- Năng lượng liên kết là năng lượng cần để phá vỡ 1 mol liên kết ở thể khí. Giá trị E_b càng lớn, liên kết càng bền.
- Biến thiên enthalpy ($\Delta_r H$) cho biết lượng nhiệt tỏa ra hay thu vào của phản ứng.
- Công thức tính biến thiên enthalpy theo năng lượng liên kết là: **$\Delta_r H = \text{Tổng } E_b(\text{chất đầu}) - \text{Tổng } E_b(\text{sản phẩm})$** .
- **$\Delta_r H < 0$:** Phản ứng tỏa nhiệt. Năng lượng giải phóng khi tạo liên kết mới lớn hơn năng lượng cần để phá vỡ liên kết cũ.
- **$\Delta_r H > 0$:** Phản ứng thu nhiệt. Năng lượng cần để phá vỡ liên kết cũ lớn hơn năng lượng giải phóng khi tạo liên kết mới.