

نمذجة التحول الكيميائي

(1) المجموعة الكيميائية

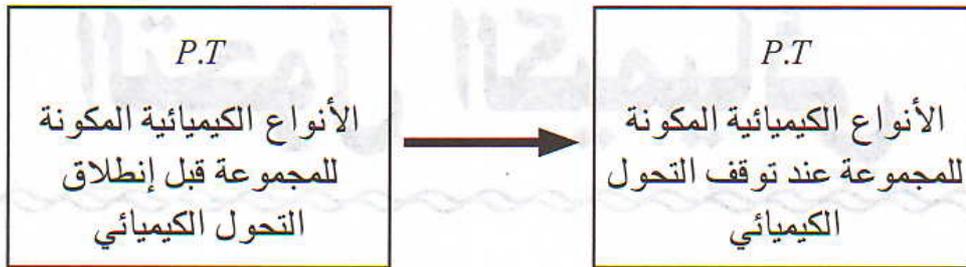
❖ وصف المجموعة الكيميائية

المجموعة الكيميائية: مجموعة من الأنواع الكيميائية والتي توصف بتحديد

- طبيعة وكمية مادة الأنواع الكيميائية المتواجدة في المجموعة.
- الحالة الفيزيائية لكل نوع كيميائي
- درجة حرارة المجموعة T
- ضغط المجموع الكيميائية P.

❖ تطور حالة المجموعة الكيميائية

تتطور حالة المجموعة الكيميائية من الحالة البدئية وهي الحالة التي تتواجد فيها الأنواع الكيميائية قبل إنطلاق التحول الكيميائي إلى الحالة النهائية وهي الحالة التي يتوقف فيها تطور المجموعة أي يتوقف التحول الكيميائي حيث يكون تركيب المجموعة مختلفا لتركيبها الأول يعبر عن التحول الكيميائي لمجموعة كيميائية بالخطاطة التالية:



ملحوظة: النوع الذي لا يطرأ عليه أي تحول فهو غير نشيط ويكتب في الحالة البدئية والنهائية.

(2) المجموعة الكيميائية

ننمدج التحول الكيميائي بالتفاعل الكيميائي الذي نعبر عنه بمعادلة كيميائية تضم صيغ ورموز المتفاعلات والنواتج والتي تتحفظ عناصرها الكيميائية نوعا وعددا. كما تتحفظ الشحنة الكهربائية الإجمالية، ويتم هذا الإنحفاظ بإضافة أعدادا صحيحة إلى صيغ ورموز الأنواع الكيميائية تسمى المعاملات التناسبية. ونحصل بذلك على معادلة متوازنة.

حصيلة المادة

1) مبادئ أولية عن مفهوم تطور مجموعة كيميائية.

يتطور التفاعل الكيميائي بتغير كميات مادة الأنواع الكيميائية المشاركة في التفاعل وفق المعاملات التناسبية في المعادلة المتوازنة.

وللتعرف على حالة مجموعة كيميائية خلال تطورها نستعمل مقداراً نرمز إليه بـ x يسمى تقدم التفاعل وحدته المول.



يصاحب إختفاء x مول من Cu^{2+} إختفاء $2x$ مول من OH^- وتكون x مول من $Cu(OH)_2$

2) الدراسة الكمية للتفاعل الكيميائي.

بصفة عامة نعبر عن تطور التفاعل بجدول وصفي كالتالي:

معادلة التفاعل	$\alpha A + \beta B \longrightarrow \varphi C$		
الحالة البدئية $t = 0$	$n_0(A)$	$n_0(B)$	0
خلال التطور t	$n_0 - \alpha x$	$n_0(B) - \beta x$	φx
الحالة النهائية t_f	$n_0 - \alpha x_{max}$	$n_0(B) - \beta x_{max}$	φx_{max}

يتوقف التفاعل عندما يختفي أحد المتفاعلات أو المتفاعلات كلها، فنحصل على الحالة النهائية للمجموعة الكيميائية.

تختفي المتفاعلات بكاملها إذا كانت كميات مادة المتفاعلات متناسبة مع المعاملات التناسبية للمعادلة.

يسمى المتفاعل الذي يختفي كلياً في المجموعة الكيميائية خلال تحولها، المتفاعل الحدي لكونه يحد من إستمرار التحول.

يسمى كل متفاعل متبق في المجموعة الكيميائية عند توقف التحول المتفاعل الأوفر.

يوافق التقدم الأقصى x_{max} للتفاعل أصغر قيمة تأخذها x عند إختفاء المتفاعل الحدي معرفة x_{max} تمكن من حساب كميات الأنواع الكيميائية في الحالة النهائية أي تحديد حصيلة المادة.