

1- نمذجة التحول الكيميائي لمجموعة:

1- تعريف التحول الكيميائي:

- أثناء تحول كيميائي لمجموعة كيميائية تظهر أنواع كيميائية جديدة وفي نفس الوقت تختفي أنواع كيميائية أخرى، وفق ظروف معينة.
- نسمي الأنواع الكيميائية التي تختفي كلياً أو جزئياً: المتفاعلات.
- نسمي الأنواع الكيميائية الجديدة التي تظهر: نواتج التفاعل.

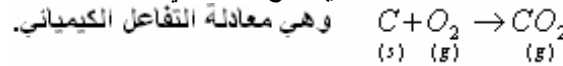
2- تعريف الحالة البدئية و الحالة النهائية:

- نسمي الحالة البدئية لمجموعة كيميائية: الحالة التي تكون عليها المجموعة عند انطلاق التحول.
- نسمي الحالة النهائية لمجموعة كيميائية: الحالة التي تكون عليها المجموعة عند انتهاء التحول.
- و للتعبير عن حالة مجموعة كيميائية يتم تحديد:
 - المقادير الفيزيائية التي تحدد ظروف الحالة كالضغط و درجة الحرارة.
 - طبيعة وكمية مادة الأنواع الكيميائية المتواجدة: سائلة (l)، صلبة (s)، غازية (g)، مركب مذاب في محلول (aq).

3- نمذجة التفاعل الكيميائي:

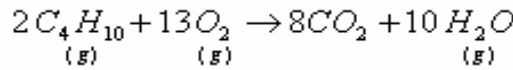
أ) الطريقة المستعملة:

نمثل كل تحول كيميائي بنموذج مبسط يسمى تفاعل كيميائي فهو يمكن، من وصف هذا التحول .
فمثلاً ننمذج تفاعل احتراق الكربون في أكسجين الهواء والذي ينتج عنه ثاني أكسيد الكربون بما يلي :



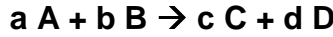
خلال التفاعل الكيميائي تحفظ العناصر الكيميائية من حيث النوع والعدد (انحفاظ الكتلة) ، وتحفظ الشحنة الكهربائية الإجمالية .
أجل ذلك نستعمل المعاملات التناسبية وهي أعداد صحيحة تضاف إلى رموز أو صيغ الأنواع الكيميائية لكي تصبح المعادلة متوازنة.

مثال:



ب) تعميم:

- بصفة عامة المعادلة الكيميائية هي الكتابة الرمزية للتفاعل الكيميائي.
- ولكتابة معادلة كيميائية يجب أن:
 - نمثل كل نوع كيميائي بصيغته الكيميائية مع وضع صيغ المتفاعلات على اليسار و صيغ النواتج على اليمين.
 - نرسم سهماً يتجه من اليسار نحو اليمين لتمثيل منحى التحول الكيميائي.



a, b, c, d : تسمى المعاملات التناسبية .

A و B: الأجسام المتفاعلة . C و D: الأجسام الناتجة عن التفاعل .

4- العلاقة بين كمية المادة لنوع كيميائي و المعاملات التناسبية:

تكون كميات مادة الأجسام المتفاعلة الداخلية في التفاعل و كميات مادة الأجسام الناتجة المحصلة عليها متناسبة اضطراداً مع المعاملات التناسبية.

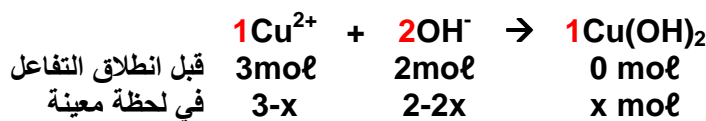
$$\frac{n_A}{a} = \frac{n_B}{b} = \frac{n_C}{c} = \frac{n_D}{d}$$

II- حصيلة المادة:

1) مفهوم تقدم تفاعل كيميائي:

للتبعية تطور كميات مادة كل الأنواع الكيميائية المشاركة في التفاعل الكيميائي نستعمل مفهوم كيميائي يطلق عليه اسم: تقدم التفاعل، و نرسم له ب X. و نقوم برسم جدول وصفي خاص بالتفاعل يتم فيه تحديد كمية مادة كل نوع كيميائي بدلالة التقدم X.

مثال:



يستعمل تقدم التفاعل لتحديد كمية مادة الأنواع الكيميائية للمجموعة في حالتها النهائية بمعرفة كميات مادة هذه الأنواع في الحالة البدئية و هذا ما يسمى بحصيلة المادة.

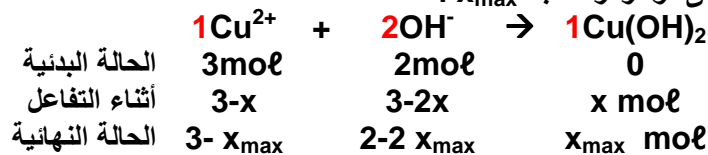
عندما يتوقف التفاعل الكيميائي نقول أن المجموعة توجد في حالتها النهائية و نعتبر أن المجموعة في حالتها النهائية عندما يختفي كليا، على الأقل، أحد المتفاعلات.

2 - المتفاعل المُحد (limitant) و المتفاعل المستعمل بوفرة (en excès).

عندما يستهلك أحد المتفاعلات كليا، ينتج عنه توقف التفاعل الكيميائي، رغم توفر المتفاعلات الأخرى، يسمى هذا المتفاعل بالمتفاعل المُحد (أي هو الذي وضع حدا للفاعل).
و المتفاعلات المتبقية في الحالة النهائية تعتبر متفاعلات مستعملة بوفرة.

3- التقدم الأقصى:

يكون التطور منعدما في الحالة البدئية، و خلال التفاعل يزداد التطور حتى بلوغ الحالة النهائية التي توافق الإستهلاك الكلي للمتفاعل المُحد ونحصل على التقدم الأقصى، و نرمز له ب x_{max} .



تحديد التقدم الأقصى x_{max} :

الإفتراض الأول: المتفاعل المحد هو Cu^{2+} . $n(\text{Cu}^{2+})=0 \Leftrightarrow$ أي $3 - x_{max} = 0 \Leftrightarrow x_{max} = 3\text{mol}$ و منه $n_f(\text{OH}^-) = 2 - 2x_m = -4\text{mol}$ و هذا غير ممكن و بالتالي Cu^{2+} ليس بالمتفاعل المحد.

الإفتراض الثاني: المتفاعل المحد هو OH^- . $n(\text{OH}^-) = 0 \Leftrightarrow$ أي $x_m = 1\text{mol} \Leftrightarrow n(\text{OH}^-) = 2 - 2x_m = 0$ و منه $n_f(\text{Cu}^{2+}) = 3 - x_m = 2\text{mol}$ و هذا ممكن و بالتالي OH^- هو المحد .

إذن التقدم الأقصى : $x_m = 1\text{mol}$ و منه يمكننا معرفة تركيب المجموعة عند نهاية التفاعل.

