نمذجة التحول الكيميائي –حصيلة المادة

I-نمذجة التحول الكيميائي لمجموعة :

1-تعريف التحول الكيميائي :

خلال تحول كيميائي لمجموعة كيميائية تظهر أنواع كيميائية جديدة بينما تختفي أنواع كيميائية أخرى .
الانواع الكيميائية التي تختفي كليا أو جزئيا تسمى **متفاعلات** .
والانواع الكيميائية التي تظهر تسمى **نواتج** .
مجموعة المتفاعلات والنواتج تكون **مجموعة كيميائية** .

2-تعريف الحالة البدئية والحالة 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 .
- للتعبير عن حالة مجموعة كيميائية نحديد :
  - المقادير الفيزيائية التي تحدد شروط هذه الحالة (درجة الحرارة والضغط)
  - الحالة الفيزيائية للأنواع الكيميائية المكونة للمجموعة باستعمال الرموز التالية :
    سائل (ℓ) صلب (s) ، مميه (aq) ، غاز (g) .
  - كمية المادة للأنواع الكيميائية المكونة للمجموعة .

II-التفاعل الكيميائي :

1-تعريف :

التفاعل نموذج يصف التحول الكيميائي ، حيث يشير الى طبيعة المتفاعلات والنواتج .فهو يمكن من إبراز تطور المجموعة الكيميائية .
مثال : تفاعل أيونات الهيدروكسيد مع أيونات الحديد II .
يحدث تفاعل كيميائي بين أيونات الهيدروكسيد HO^- مع أيونات النحاس II (Cu^{2+}) فينتج عنه هيدروكسيد النحاس II ($Cu(OH)_2$) .

2-المعادلة الكيميائية :

يعبر عن تفاعل كيميائي بمعادلة تسمى المعادلة الكيميائية تستعمل فيها رموز أو صيغ الأنواع الكيميائية المتفاعلة والناتجة .
نكتب صيغ المتفاعلات على اليسار وصيغ النواتج عن اليمين و نمثل سهما يتجه من اليسار نحو اليمين لتمثيل منحى التحول الكيميائي .
نوازن المعادلة الكيميائية باعتبار انحفاظ عدد العناصر الكيميائية والشحنة الكهربائية الإجمالية ، تضاف أعدادا صحيحة طبيعية الى صيغ أو رموز الأنواع الكيميائية ، تسمى المعاملات التناسبية .

مثال :

تفاعل أيونات الهيدروكسيد مع أيونات النحاس II ننمذجه بالمعادلة التالية :

$$Cu^{2+}_{(aq)} + HO^-_{(aq)} \rightarrow Cu(OH)_{2\,(s)}$$

III-حصيلة المادة :

1-تقدم تفاعل كيميائي :

خلال تفاعل كيميائي تنقص كميات المادة المتفاعلات و تزداد كميات المادة النواتج وفق المعاملات التناسبية للمعادلة الكيميائية .

لتتبع تطور كميات المادة لكل الأنواع الكيميائية المشاركة في التفاعل الكيميائي نستعمل مفهوما كيميائيا يطلق عليه اسم تقدم التفاعل . ونرمز له ب x وحدته المول (mol).

يتنتج عن اختفاء $x\ mol$ من أيونات النحاس II و $2x\ mol$ من أيونات الهيدروكسيد ، تكون $x\ mol$ من هيدروكسيد النحاس II .

2-المتفاعل المحد :

عندما يستهلك أحد المتفاعلان كليا أو كلاهما يتوقف تحول المجموعة الكيميائية ، يسمى هذا المتفاعل بمتفاعل محد والمتفاعل المتبقي يسمى المتفاعل الأوفر .

3-التقدم الأقصى :

خلال تطور مجموعة كيميائية يتغير تقدم التفاعل من القيمة 0 في الحالة البدئية الى قيمة قصوى x_{max} في الحالة النهائية التي توافق الاستهلاك الكلي للمتفاعل المحد .

4-حصيلة المادة :

إن معرفة التقدم الأقصى يمكننا من حساب كمية المادة في الحالة النهائية لجميع الانواع الكيميائية سواءا المتفاعلات أو النواتج .

مثال :

إنجاز حصيلة المادة للتفاعل بين أيونات النحاس II وأيونات الهيدروكسيد

إنشاء الجدول الوصفي :

المعادلة الكيميائية					
	$Cu^{2+}_{(aq)}$	+ $HO^{-}_{(aq)}$	→	$Cu(OH)_{2\,(s)}$	
حالة المجموعة	التقدم (mol)	كميات المادة (mol)			
حالة بدئية	0	0	----------	2	3
أثناء التفاعل	x	x	----------	$2-2x$	$3-x$
حالة نهائية	x_{max}	x_{max}	----------	$2-2x_{max}$	$3-x_{max}$

تحديد التقدم الأقصى :

❖ نفترض أن Cu^{2+} متفاعل محد :

$$3 - x_{max} = 0 \Rightarrow x_{max} = 3\ mol$$

كمية مادة HO^- النهائية هي : $n_f(HO^-) = 2 - 2x_{max} = -4\ mol$

وهذا غير ممكن وبالتالي Cu^{2+} ليس بمتفاعل محد .

❖ نفترض أن HO^- متفاعل محد :

$$2 - 2x_{max} = 0 \Rightarrow x_{max} = 1\ mol$$

كمية مادة Cu^{2+} النهائية هي : $n_f(Cu^{2+}) = 3 - x_{max} = 2\ mol$

وهذا ممكن وبالتالي HO^- متفاعل محد .

تحديد حصيلة المادة في الحالة النهائية :

في الحالة النهائية نعوض التقدم الأقصى x_{max} بقيمته ونحصل على كمية المادة في الحالة النهائية :

$$n_f(Cu^{2+}) = 3 - x_{max} = 2\ mol$$

$$n_f(HO^-) = 2 - 2x_{max} = 0$$

$$n_f(Cu(OH)_2 = x_{max} = 1\ mol$$