**Ελάχιστη τιμή συντελεστή απόδοσης**

Σε δοχείο σταθερού όγκου διαβιβάζονται ποσότητες των σωμάτων $R_1, R_2, \ldots, R_n$ , που αντιδρούν σύμφωνα με την αμφίδρομη αντίδραση:

$$r_1 \, R_1 \; + \; r_2 \, R_2 \; + \; \cdots \; + \; r_n \, R_n \; \rightleftharpoons \; p_1 \, P_1 \; + \; p_2 \, P_2 \; + \; \cdots \; + \; p_m \, P_m$$

Να βρεθεί η συνθήκη ώστε στην παραπάνω αντίδραση, ανεξάρτητα από τις ποσότητες των αντιδρώντων που θα διαβιβαστούν στο δοχείο, ο συντελεστής απόδοσης $a$ να έχει ελάχιστο όριο, $a_{\min} \in (0, 1)$, το οποίο και να υπολογιστεί.
Δίνεται ότι $r_1, r_2, \ldots, r_n, p_1, p_2, \ldots, p_m$ θετικοί ακέραιοι αριθμοί, όλα τα σώματα είναι αέρια και η θερμοκρασία παραμένει σταθερή.

**Λύση**

$$\begin{array}{ccccccccccc}
r_1 \, R_1 & + & r_2 \, R_2 & + \cdots + & r_n \, R_n & \rightleftharpoons & p_1 \, P_1 & + & p_2 \, P_2 & + \cdots + & p_m \, P_m \\
c_1 & & c_2 & & c_n & & - & & - & & - \\
-r_1 x & & -r_2 x & & -r_n x & & p_1 x & & p_2 x & & p_m x \\
c_1 - r_1 x & & c_2 - r_2 x & & c_n - r_n x & & p_1 x & & p_2 x & & p_m x
\end{array}$$

$$\text{Θέτουμε} \qquad \begin{cases} S_r = r_1 + r_2 + \cdots + r_n \\ S_p = p_1 + p_2 + \cdots + p_m \\ \Delta n = S_p - S_r \end{cases}$$

Χωρίς έκπτωση της γενικότητας έστω ότι το αντιδρών $R_1$ μπορεί θεωρητικώς να αντιδράσει πλήρως άρα ο συντελεστής απόδοσης θα υπολογιστεί μέσω αυτού.

$$a = \frac{r_1 x}{c_1}$$
$$x = \frac{a c_1}{r_1}$$

Για τις ποσότητες των αντιδρώντων ισχύει:

$$\frac{c_1}{r_1} \leqslant \frac{c_i}{r_i}$$
$$\frac{r_i}{r_1} c_1 \leqslant c_i \quad \forall \; i = 2, 3, \ldots n$$

Έστω $\lambda_i$ κατάλληλος συντελεστής ώστε να ισχύει

$$c_i = \lambda_i \frac{r_i}{r_1} c_1$$

επομένως

$$\lambda_i \geqslant 1 \quad \forall \; i = 2, 3, \ldots n$$

$$
\begin{aligned}
K_c &= \frac{(p_1x)^{p_1}\cdot(p_2x)^{p_2}\cdot\ldots\cdot(p_mx)^{p_m}}{(c_1-r_1x)^{r_1}\cdot(c_2-r_2x)^{r_2}\cdot\ldots\cdot(c_n-r_nx)^{r_n}}\\
&= \frac{x^{S_p}\cdot p_1^{p_1}\cdot p_2^{p_2}\cdot\ldots\cdot p_m^{p_m}}{(c_1-r_1x)^{r_1}\cdot\left(\lambda_2\frac{r_2}{r_1}c_1-r_2x\right)^{r_2}\cdot\ldots\cdot\left(\lambda_n\frac{r_n}{r_1}c_1-r_nx\right)^{r_n}}\\
&= \frac{\left(\frac{ac_1}{r_1}\right)^{S_p}\cdot p_1^{p_1}\cdot p_2^{p_2}\cdot\ldots\cdot p_m^{p_m}}{\left(\frac{r_1}{r_1}c_1-r_1\frac{ac_1}{r_1}\right)^{r_1}\cdot\left(\lambda_2\frac{r_2}{r_1}c_1-r_2\frac{ac_1}{r_1}\right)^{r_2}\cdot\ldots\cdot\left(\lambda_n\frac{r_n}{r_1}c_1-r_n\frac{ac_1}{r_1}\right)^{r_n}}\\
&= \frac{a^{S_p}\cdot c_1^{S_p}\cdot p_1^{p_1}\cdot p_2^{p_2}\cdot\ldots\cdot p_m^{p_m}}{r_1^{S_p}\cdot\frac{r_1^{r_1}\cdot r_2^{r_2}\cdot\ldots\cdot r_n^{r_n}}{r_1^{S_r}}\cdot c_1^{S_r}\,(1-a)^{r_1}\cdot(\lambda_2-a)^{r_2}\cdot\ldots\cdot(\lambda_n-a)^{r_n}}
\end{aligned}
$$

επομένως

$$
\boxed{\frac{a^{S_p}}{(1-a)^{r_1}\cdot(\lambda_2-a)^{r_2}\cdot\ldots\cdot(\lambda_n-a)^{r_n}}\cdot c_1^{\Delta n}=\frac{r_1^{r_1}\cdot r_2^{r_2}\cdot\ldots\cdot r_n^{r_n}}{p_1^{p_1}\cdot p_2^{p_2}\cdot\ldots\cdot p_m^{p_m}}\cdot r_1^{\Delta n}\cdot K_c} \tag{1}
$$

Το δεύτερο μέλος της σχέσης (1) είναι μια σταθερά και για να μελετήσουμε το πρώτο μέλος θα διακρίνουμε τρεις περιπτώσεις:

**1.** $\Delta n > 0$

**i.** $\lim\limits_{c_1\to 0} c_1^{\Delta n} = 0$

$$\lim_{c_1\to 0}\frac{a^{S_p}}{(1-a)^{r_1}\cdot(\lambda_2-a)^{r_2}\cdot\ldots\cdot(\lambda_n-a)^{r_n}} = +\infty$$

$$\lim_{c_1\to 0} a = 1$$

**ii.** $\lim\limits_{c_1\to +\infty} c_1^{\Delta n} = +\infty$

$$\lim_{c_1\to +\infty}\frac{a^{S_p}}{(1-a)^{r_1}\cdot(\lambda_2-a)^{r_2}\cdot\ldots\cdot(\lambda_n-a)^{r_n}} = 0$$

$$\lim_{c_1\to +\infty} a = 0$$

Επομένως όταν ισχύει $\Delta n > 0$ ο συντελεστής απόδοσης $a$ μπορεί να πάρει όλες τιμές στο $(0,1)$ άρα δεν υπάρχει ούτε $a_{\min}$ ούτε $a_{\max}$.

**2.** $\Delta n < 0$

**i.** $\lim\limits_{c_1\to 0} c_1^{\Delta n} = +\infty$

$$\lim_{c_1\to 0}\frac{a^{S_p}}{(1-a)^{r_1}\cdot(\lambda_2-a)^{r_2}\cdot\ldots\cdot(\lambda_n-a)^{r_n}} = 0$$

$$\lim_{c_1 \to 0} a = 0$$

**ii.** $\lim_{c_1 \to +\infty} c_1^{\Delta n} = 0$

$$\lim_{c_1 \to +\infty} \frac{a^{S_p}}{(1-a)^{r_1} \cdot (\lambda_2 - a)^{r_2} \cdot \ldots \cdot (\lambda_n - a)^{r_n}} = +\infty$$

$$\lim_{c_1 \to +\infty} a = 1$$

Επομένως όταν ισχύει $\Delta n < 0$ ο συντελεστής απόδοσης $a$ μπορεί να πάρει όλες τιμές στο $(0,1)$ άρα δεν υπάρχει ούτε $a_{\min}$ ούτε $a_{\max}$.

**3.** $\Delta n = 0 \quad (S_p = S_r)$

$$\lim_{c_1 \to 0} c_1^{\Delta n} = \lim_{c_1 \to +\infty} c_1^{\Delta n} = c_1^{\Delta n} = c_1^{0} = 1$$

Επομένως

$$\frac{a^{S_p}}{(1-a)^{r_1} \cdot (\lambda_2 - a)^{r_2} \cdot \ldots \cdot (\lambda_n - a)^{r_n}} \cdot c_1^0 = \frac{r_1^{r_1} \cdot r_2^{r_2} \cdot \ldots \cdot r_n^{r_n}}{p_1^{p_1} \cdot p_2^{p_2} \cdot \ldots \cdot p_m^{p_m}} \cdot r_1^0 \cdot K_c$$

$$\frac{a^{S_p}}{(1-a)^{r_1} \cdot (\lambda_2 - a)^{r_2} \cdot \ldots \cdot (\lambda_n - a)^{r_n}} = \frac{r_1^{r_1} \cdot r_2^{r_2} \cdot \ldots \cdot r_n^{r_n}}{p_1^{p_1} \cdot p_2^{p_2} \cdot \ldots \cdot p_m^{p_m}} \cdot K_c \qquad (2)$$

Το πρώτο μέλος της σχέσης (2) είναι γνησίως αύξουσα συνάρτηση του $a$ και γνησίως φθίνουσα συνάρτηση των $\lambda_2, \lambda_3, \ldots, \lambda_n$ ενώ το δεύτερο μέλος είναι μια σταθερά. Επομένως αν αντικαταστήσουμε τα $\lambda_2, \lambda_3, \ldots, \lambda_n$ με τις ελάχιστες τιμές τους η τιμή του $a$ που επαληθεύει την ισότητα είναι η ελάχιστη. Οι ελάχιστες τιμές των $\lambda_2, \lambda_3, \ldots, \lambda_n$ είναι $\lambda_2 = 1, \lambda_3 = 1, \ldots, \lambda_n = 1$ οι οποίες αντιστοιχούν στις στοιχειομετρικές ποσότητες.

$$\frac{a_{\min}^{S_p}}{(1-a_{\min})^{r_1} \cdot (1-a_{\min})^{r_2} \cdot \ldots \cdot (1-a_{\min})^{r_n}} = \frac{r_1^{r_1} \cdot r_2^{r_2} \cdot \ldots \cdot r_n^{r_n}}{p_1^{p_1} \cdot p_2^{p_2} \cdot \ldots \cdot p_m^{p_m}} \cdot K_c$$

$$\left(\frac{a_{\min}}{1-a_{\min}}\right)^{S_r} = \frac{r_1^{r_1} \cdot r_2^{r_2} \cdot \ldots \cdot r_n^{r_n}}{p_1^{p_1} \cdot p_2^{p_2} \cdot \ldots \cdot p_m^{p_m}} \cdot K_c$$

$$\frac{a_{\min}}{1-a_{\min}} = \left(\frac{r_1^{r_1} \cdot r_2^{r_2} \cdot \ldots \cdot r_n^{r_n}}{p_1^{p_1} \cdot p_2^{p_2} \cdot \ldots \cdot p_m^{p_m}} \cdot K_c\right)^{\frac{1}{S_r}}$$

$$a_{\min} = \frac{\left(\frac{r_1^{r_1} \cdot r_2^{r_2} \cdot \ldots \cdot r_n^{r_n}}{p_1^{p_1} \cdot p_2^{p_2} \cdot \ldots \cdot p_m^{p_m}} \cdot K_c\right)^{\frac{1}{S_r}}}{1 + \left(\frac{r_1^{r_1} \cdot r_2^{r_2} \cdot \ldots \cdot r_n^{r_n}}{p_1^{p_1} \cdot p_2^{p_2} \cdot \ldots \cdot p_m^{p_m}} \cdot K_c\right)^{\frac{1}{S_r}}}$$

$$a_{\min} = \frac{1}{1 + \left(\frac{r_1^{r_1} \cdot r_2^{r_2} \cdot \ldots \cdot r_n^{r_n}}{p_1^{p_1} \cdot p_2^{p_2} \cdot \ldots \cdot p_m^{p_m}} \cdot K_c\right)^{-\frac{1}{S_r}}}$$

Τελικά η ελάχιστη τιμή του συντελεστή απόδοσης δίνεται από τη σχέση (3):

$$\boxed{a_{\min} = \frac{1}{1 + \left( \dfrac{p_1^{p_1} \cdot p_2^{p_2} \cdot \ldots \cdot p_m^{p_m}}{r_1^{r_1} \cdot r_2^{r_2} \cdot \ldots \cdot r_n^{r_n}} \cdot \dfrac{1}{K_c} \right)^{\frac{1}{S_r}}}} \tag{3}$$

Από τη σχέση (2) προκύπτει ότι αν έστω ένα εκ των $\lambda_2, \lambda_3, \ldots, \lambda_n$ τείνει στο άπειρο το $a$ τείνει στο 1 επομένως δεν υπάρχει $a_{\max}$.

Συνοψίζοντας η σχέση $\Delta n = 0$ είναι ικανή και αναγκαία συνθήκη για να έχουμε $a_{\min}$, το οποίο δίνεται από τη σχέση (3), ενώ ποτέ δεν έχουμε $a_{\max}$.

Κονδύλης Παναγιώτης
Χημικός
pkondylis@hotmail.com

Λατζώνης Πολυνίκης
Χημικός
polyneices@gmail.com

http://chemistrytopics.xyz/