

anyagmegmaradással. Ehhez néhány, meglehetősen absztraktnak tűnő definícióra van szükségünk.

## 2.1. Mechanizmus, tömegmegőrzés, konzervativitás

**2.1. Definíció.** [2] (Összetett kémiai) mechanizmusnak egy  $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R}, \alpha, \beta \rangle$  rendezett négyest fogunk nevezni, ahol:

(i)  $\mathcal{M}$  és  $\mathcal{R}$  egy  $M$ , illetve  $R$  elemű halmaz ( $M, R \in \mathbb{N}$ );  $\mathcal{R} := \{1, 2, \dots, R\}$ ; az  $\mathcal{M}$  halmaz pedig  $\mathcal{R}$ -től diszjunkt, és elemeit  $\mathcal{X}(1), \mathcal{X}(2), \dots, \mathcal{X}(M)$  jelöli. (Ahol nem okoz félreértést, ott — de csak ott — az  $\mathcal{M}$  halmazt azonosítjuk az  $\{1, 2, \dots, M\}$  halmazzal.)

(ii)  $\alpha$  és  $\beta$   $M \times R$ -es, nemnegatív egész elemű mátrixok, (elemeik a sztöchiometriai együtthatók), amelyekre teljesül, hogy

- (a) minden  $r \in \mathcal{R}$  esetén  $\alpha(\cdot, r) \neq \beta(\cdot, r)$ ,
- (b) ha  $\alpha(\cdot, r) = \alpha(\cdot, r')$  és  $\beta(\cdot, r) = \beta(\cdot, r')$ , akkor  $r = r'$ ,
- (c) minden  $m \in \mathcal{M}$  esetén létezik  $r \in \mathcal{R}$ , amellyel  $\alpha(m, r) \neq 0$  vagy  $\beta(m, r) \neq 0$ .

Az  $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R}, \alpha, \beta \rangle$  mechanizmust így szokás ábrázolni:

$$(2.1) \quad \sum_{m=1}^M \alpha(m, r) \mathcal{X}(m) \longrightarrow \sum_{m=1}^M \beta(m, r) \mathcal{X}(m) \quad (r \in \mathcal{R}),$$

és (2.1)  $r$ -edik elemére úgy hivatkoznak, mint az  $r$ -edik elemi reakcióra. Az  $\mathcal{M}$  halmaz  $\mathcal{X}(m) \in \mathcal{M}$  elemére úgy fogunk hivatkozni, mint az  $m$ -edik kémiai komponensre vagy specieszre.

A 2.1. definíció (ii) (a) pontjában szereplő feltétel azt jelenti, hogy minden elemi reakciónak van valamilyen hatása. A feltétel egy egyszerű következménye:

$$\forall r \in \mathcal{R} \exists m \in \mathcal{M} \quad \alpha(m, r) \neq 0 \text{ vagy } \beta(m, r) \neq 0.$$

A 2.1. definíció (ii) (b) pontjában szereplő feltétel azt jelenti, hogy a sztöchiometriai együtthatók meghatározzák az elemi reakciót.

A 2.1. definíció (ii) (c) pontjában szereplő feltétel pedig azt jelenti, hogy csak olyan kémiai komponenseket vettünk figyelembe, amelyek legalább egy elemi reakcióban megváltoznak.

A (2.1) mechanizmusban az  $r$ -edik elemi reakciót reverzibilisnek nevezzük, ha a mechanizmusban szerepel a

$$(2.1') \quad \sum_{m=1}^M \alpha(m, r) \mathcal{X}(m) \longleftarrow \sum_{m=1}^M \beta(m, r) \mathcal{X}(m)$$

elemi reakció is. Egy reverzibilis mechanizmusban minden elemi reakció reverzibilis.

Nyilvánvaló, hogy ha  $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R}, \alpha, \beta \rangle$  egy mechanizmus, akkor  $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R}, \beta, \alpha \rangle$  is mechanizmus ugyanazokkal a kémiai komponensekkel, és a (2.1')-beli elemi reakciókkal.