

1.2. Jelölések

a) Általános jelölések

e_r	a standard bázis r -edik egységvektora
I_M	$M \times M$ -es egységmátrix
\mathcal{H}	a \mathcal{H} halmaz számossága
\mathbb{N}	a pozitív egész számok halmaza
\mathbb{N}_0	a nemnegatív egész számok halmaza
\mathbb{R}^+	a pozitív valós számok halmaza
\mathbb{R}^-	a negatív valós számok halmaza
\mathbb{R}_0^+	a nemnegatív valós számok halmaza
\mathbb{R}_0^-	a nempozitív valós számok halmaza
$\text{rank}(\gamma)$	a γ mátrix rangja
0	a nulla mátrixot jelöli (ami a szövegtől függően vektorra specializálódhat)
1	összegező vektor; minden koordinátája 1
\top	a transzponált jele
\perp	az ortogonális komplementer jele
$<, \leq, >, \geq$	vektorokra és mátrixokra koordinátánként értendő

b) A szövegben bevezetett speciális jelölések

$\mathcal{A}(d)$	a d -edik atom
\mathcal{D}	az atomok halmaza
$\mathcal{K}(\gamma)$	a γ mátrix oszlopai által generált kúp
$\ell(\eta)$	az η komplex hossza
\mathcal{M}	a kémiai komponensek (speciesszek) halmaza
\mathcal{M}_0	a Volpert-gráf kezdőpontjainak halmaza
\mathcal{R}	az elemi reakciók halmaza
$\mathcal{S}(\gamma)$	a γ mátrix oszlopai által kifeszített lineáris altér
$\text{supp } \eta$	az η komplex tartója
$\mathcal{X}(m)$	az m -edik kémiai komponens vagy speciesz
α, β	a sztöchiometriai együtthatók mátrixai
δ	az atommátrix
\vdash	két vektor vagy mátrix között fönnáll, ha \leq és \neq egyaránt teljesül rájuk
\vdash	két vektor vagy mátrix között fönnáll, ha \geq és \neq egyaránt teljesül rájuk
\emptyset	üres komplex

A vektorok jelölésére félkövér kisbetűket, mátrixokéra félkövér latin nagybetűket (esetenként félkövér görög kisbetűket) használunk; a vektorok, illetve a mátrixok komponenseit pedig a megfelelő vékony, illetve dőlt betűvel jelöljük.

2. Alapfogalmak

Vizsgálatunk tárgya az összetett kémiai reakciók mechanizmusa. Ez szemléletesen azt jelenti, hogy állandó térfogatú és nyomású edényt tekintünk állandó hőmérsékleten, amelyben jelen van véges sok (M számú) speciesz (vagy kémiai komponens); legyenek ezek $\mathcal{X}(1), \dots, \mathcal{X}(M)$. A speciesszek között elemi reakciók mennek végbe, amelyet például az alábbiakban, a (2.1) képlet mutat. Azzal fogunk foglalkozni, hogy az elemi reakciók végbemenetele milyen kapcsolatban van az