

ANYAGMEGMARADÁS ÖSSZETETT KÉMIAI MECHANIZMUSOKBAN

DEÁK JENŐ, TÓTH JÁNOS ÉS VIZVÁRI BÉLA

Budapest, Gödöllő, Ankara

A jelen dolgozat célja, hogy az anyagmegmaradásra vonatkozó vizsgálatokat egységes elméletként mutassa be az Olvasónak. E célból bizonyításokkal és példákkal együtt összefoglalja az összetett kémiai mechanizmusok konzervativitására vonatkozó irodalmi eredményeket, másrészt az ismerteknél jobban kezelhető szükséges, elégséges és ekvivalens feltételeket, illetve algoritmusokat ad meg a konzervativitásra. Az eredmények nemcsak a konzervativitásra (és a vele rokon szub- és szuperkonzervativitásra és hasonló fogalmakra) vonatkoznak, hanem egy új, az eddigiekhez képest duális fogalomrendszerre is, amely az anyagmegmaradást (és a vele rokon fogalmakat) nem a kémiai komponensek anyagmennyiségének követésével, hanem az elemi reakciók hatásának figyelembevételével írja le. A két fogalomrendszer összehasonlításának legfontosabb eszköze egy általános, lineáris egyenlőtlenségekre vonatkozó alternatívátétel.

0. Bevezetés	74
1. Előkészületek	75
1.1. Elnevezések	75
1.2. Jelölések	76
a) Általános jelölések	76
b) A szövegben bevezetett speciális jelölések	76
2. Alapfogalmak	76
2.1. Mechanizmus, tömegmegőrzés, konzervativitás	77
2.2. Atomos szerkezetű specieszeket tartalmazó mechanizmusok	82
2.3. Rekeszrendszerek és elsőrendű mechanizmusok	83
2.4. A Volpert-gráf	84
3. A definiált tulajdonságok fennállására vonatkozó szükséges, elégséges, valamint szükséges és elégséges feltételek	85
3.1. A 2.2. definícióban szereplő fogalmakra vonatkozó feltételek	85
3.2. Konzervativitásra vonatkozó szükséges és elégséges feltételek	85
3.3. Az aciklikusság következményei	86
3.4. A rekeszrendszerek különféle általánosításai	88
3.5. Az atomszám-megmaradás törvénye	91
3.6. Kiegészítések	91
4. Kapcsolatok a definiált tulajdonságok között	92
5. Kitekintés	95
Függelék	95
Irodalom	96