

## 9. ÖSSZEFOGLALÁS

Majdnem minden kémiai folyamat sok reakciólépésen keresztül valósul meg. Ez azt jelenti, hogy a kiindulási anyagok reakciója során először köztitermékek keletkeznek, majd a keletkezett köztitermékek lépnek további reakciókba. Gyakran több száz vagy több ezer reakciólépés lejátszódása után keletkeznek csak az összetett kémiai reakció végtermékei. Ha ismerjük minden reakciólépés kémiai egyenletét és a reakciólépések sebességét, tehát a részletes reakciómechanizmust, akkor teljesen kézben tudjuk tartani a folyamatot [404]. Az iparban ez azt jelenti, hogy úgy tudjuk megválasztani a reakció körülményeit vagy a kiindulási anyagokat, hogy a kémiai folyamat nagy hatékonysággal és ugyanakkor kis környezeti terheléssel játszódjék le. A részletes reakciómechanizmusokat felhasználhatjuk új berendezések tervezésénél, meglévő berendezések felújításánál, vagy berendezések hatékony számítógépes irányítására.

Részletes reakciómechanizmusokat alkalmaznak légkörkémiailag folyamatok modellezésére. A meteorológiai előrejelzések több napra előre, jó térbeli felbontásban képesek megadni a hőmérsékletet, a szél irányát és erősségét, valamint a napsugárzás erősségét. Ezen információk alapján a várható levegőminőség előrejelezhető, tehát a kémiai átalakulások sebességének ismeretében Magyarország minden pontjára, több napra előre, tetszőleges időpontra számítható a szennyező anyagok koncentrációja a levegőben. Ezt az információt fel lehet használni szmogriadó elrendelésére még a környezeti katasztrófa helyzet bekövetkezése előtt. A modellek segítségével számítani lehet a kibocsátást korlátozó intézkedések, mint például a páros/páratlan rendszámú autók közlekedése megtiltásának hatását. Hosszú távú városfejlesztési vagy ipartelepítési döntéseket is lehet alapozni a levegőminőségi modellek számítási eredményére.

Részletes reakciómechanizmusok alkalmazása különösen gyakori égési folyamatok leírására. A kémiai energiát erőművekben tudjuk villamos energiává átalakítani, míg motorokban a kémiai energia mechanikai energiává alakul át. Az égési folyamatok pontos leírásával javíthatjuk a kazánok és a motorok hatásfokát, és ugyanakkor környezetvédelmi szempontból optimalizálhatjuk azokat, tehát adott megkívánt teljesítmény elérése mellett csökkenthetjük a szennyezőanyag-kibocsátásukat.

A vegyiparban a technológia fejlesztésére lehet felhasználni a gyártási folyamat részletes reakciómechanizmuson alapuló modellezését. Ilyen módon növelni lehet a hasznos végtermékek kitermelését, és ugyanakkor a környezetvédelmi szempontokra tekintettel lehet optimalizálni a gyártást.

A részletes reakciómechanizmusok alkalmazásának legújabb területe a biokémiai folyamatok reakciókinetikai modellezése. Számos olyan biokémiai rendszer van, mint például az anyagcsere-hálózatok, a molekuláris jelterjedés vagy a sejtciklus modellezése, amelyeknél már nemcsak az ismert, hogy milyen molekulák vesznek részt a folyamatban, és hogy ezek közül melyek reagálnak egymással, de ismert a lejátszódó reakciók kémiai egyenlete és a reakciók sebességi együtthatója is. Ezen ismeretek birtokában számítani lehet a koncentrációk időbeni lefutását, és a rendszereknek egy korábbinál sokkal pontosabb leírását kaphatjuk meg. Ez teljesen új alapokra helyezheti hatékonyabb gyógyszerek kifejlesztését.

A kémia minden területén a reakciókinetika fejlődésének egyik jele, hogy egyre több folyamatot írnak le részletes reakciómechanizmusokkal, és ezek a reakciómechanizmusok egyre nagyobbak lesznek, tehát egyre több anyagfajtát és reakciólépést tartalmaznak. Még fontosabb, hogy a reakciómechanizmusok egyre pontosabbak, tehát egyre több kísérleti adatot adnak vissza kielégítő pontossággal. Emiatt azt várjuk, hogy az ezeken a mechanizmusokon alapuló modellek prediktív ereje is javul, tehát kísérletileg nem tanulmányozott vagy esetleg nem is tanulmányozható körülményeknél is lehet pontos szimulációkat végezni velük.

A fejlődésnek újabb jele, hogy a reakciómechanizmusok egyre több adatához van már hibabecslés, tehát a reakciókinetikai paraméterek pontosságát is megpróbálják jellemezni. Az újabb hibabecslések már nem egy-egy kísérlet hibáját tükrözik, hanem a több, elvileg különböző módszerrel végzett, független kísérleten alapulnak, így az egyes módszerek szisztematikus hibáját is figyelembe tudják venni.

A részletes reakciómechanizmusokon alapuló szimulációk alkalmasak arra is, hogy új kémiai ismereteket szerezzünk. A számítások alapján meg lehet becsülni olyan anyagfajták koncentrációját, amelyek az adott rendszerben technikai okokból nem mérhetők. A mechanizmusok kinetikai analízise alapján megtudható, hogy adott körülmények között melyek a legfontosabb reakcióutak, hogy milyen kölcsönhatás van az egyes részfolyamatok között, és hogy mely paraméterek értékének kis megváltoztatásától változnak meg jelentősen a számított eredmények.

A legtöbb, a gyakorlatban fontos kémiai kinetikai folyamat inhomogén térben játszódik le, tehát a koncentrációk és a hőmérséklet helyről helyre változnak. A fotokémiai levegőszennyezés és a lángok a mindennapi életben fontos képviselői a térben inhomogén reakciókinetikai rendszereknek. Egyes esetekben a koncentrációk és a hőmérséklet csak egy, illetve két térkoordináta irányában változnak, a megfelelő modelleket térben egydimenziósoknak, illetve kétdimenziósoknak tekintik. Ilyen modellek még szimulálhatók részletes reakciómechanizmusokkal, azonban térben háromdimenziós vagy gyors eredményt kívánó (például valós idejű) szimulációknak mindenképpen gyorsan számítható redukált kinetikai modelleken kell alapulniuk.

A könyv elején összefoglaltuk a később felhasznált reakciókinetikai alapismereteket. Ez a fejezet egy bevezető reakciókinetikai kurzus számára is hasznos lehet. A reakcióutakat gyakran emlegetik a reakciókinetikában; a 3. fejezetben bemutatjuk ezeknek egy konzisztens értelmezését, ami az elemfluxusok vizsgálatán alapul.

A részletes reakciómechanizmusok alkalmazásainak előretörésével az utóbbi években sok és egyre kifinomultabb módszert dolgoztak ki a reakciómechanizmusok vizsgálatára. Az egyik módszercsalád azt vizsgálja, hogy a paraméterek bizonytalansága következtében mekkora lesz a részletes reakciómechanizmuson alapuló szimulációs modell eredményének bizonytalansága. Ezek a módszerek megadják az eredmény szórását, sőt esetleg a modell eredményének közös valószínűségi sűrűségfüggvényét. A módszerek egy része arra is képes, hogy az eredmények bizonytalanságának okát is megadja, tehát visszavezesse azt az egyes paraméterek bizonytalanságára. Az érzékenységi- és bizonytalanságanalízis ezen módszerei (4. fejezet) nagyon fontosak és hasznosak a reakciómechanizmusok és az azokon alapuló modellek fejlesztésére.

A reakciómechanizmusokat tartalmazó dinamikai modellek egyik fontos jellemzője azok időskálái (5. fejezet). Megmutattuk, hogy az időskálák száma azonos a modell változójának számával, de általában nem lehet kölcsönösen egyértelmű megfeleltetést létesíteni ezek között. Az időskálákkal kapcsolatos, hogyan viselkednek a reakciókinetikai modellek azután, hogy az anyagfajták koncentrációját hirtelen megváltoztatjuk (koncentrációperturbáció). Az időskálák kapcsolatosak a dinamikai modellek merevségével, ami a modellek egy gyakorlati szempontból fontos tulajdonsága.

A vegyészek arra törekednek, hogy a reakciómechanizmusok egyre nagyobbak legyenek és így minden rendelkezésre álló kémiai (fizikai, biológiai) információt tartalmazzanak. Amikor azonban ezeket a reakciómechanizmusokat szimulációs programokban alkalmazzák, előnyös a minél kisebb mechanizmus. A reakciómechanizmusok redukciójánál az a cél (6. fejezet), hogy megtaláljuk azt a legkisebb mechanizmust (vagy matematikai modellt), amellyel a számunkra fontos anyagfajták koncentrációjára adott hibahatáron belül azonos eredményt kapunk a vizsgált körülményeknél. A reakciómechanizmusok redukciója alapulhat a felesleges anyagfajták és reakciólépések elhagyásán, anyagfajták és reakciólépések összevonásán, vagy azon az elven, hogy a modellnek nem kell minden időskálát leírnia, a legrövidebb és leghosszabb időskálákat meghatározó folyamatok általában elhagyhatók egy dinamikai modelltől. A reakciókinetika kezdeteitől (l. a klasszikus kinetikai egyszerűsítő elveket) napjainkig (l. CSP, ILDM, repromodellezés) egy sor módszert dolgoztak ki erre az elvre alapozva.

Lokális érzékenységi függvényeknek egy meglepő tulajdonsága, hogy egyes esetekben az alakjuk egymáshoz hasonló és más törvényszerűségek is jellemzők ezekre a függvényekre. A 7. fejezetben tárgyaltuk ezeknek a törvényszerűségeknek az okát és azok következményeit a modellek egyértelműségére és paramétereik meghatározhatóságára. Égési és biológiai modellek egyaránt rendelkezhetnek ezzel a fontos tulajdonsággal.

A könyvben leírt elvek és algoritmusok sok esetben nagyon bonyolultak. Szerencsére majdnem minden módszerhez letölthető egy-egy megfelelő program az Internetről. A 8. fejezetben bemutatunk néhány ilyen programot öt témakör szerint csoportosítva: izoterm homogén rendszerek szimulációja, gázkinetikai szimulációk, reakciómechanizmusok

analízise, bizonytalanságanalízis és biológiai reakciókinetikai rendszerek vizsgálata.

Minden erőfeszítés ellenére bizonyára maradtak még hibák e könyv szövegében. Kérem az Olvasót, hogy a felfedezett hibák listáját küldje el e-mailben ([turanyi@chem.elte.hu](mailto:turanyi@chem.elte.hu)). A könyvvel kapcsolatos újabb híreket és kiegészítéseket a következő Web oldalon lehet elolvasni: <http://garfield.chem.elte.hu/Turanyi/reakciomechanizmusok.html>.