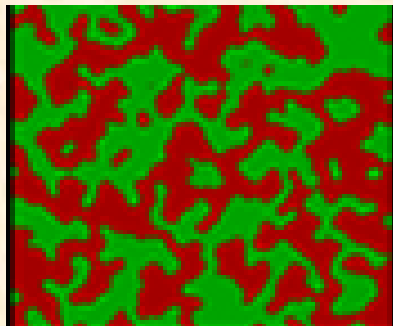




# Kémiai szimuláció I.

# Kémiai modellek

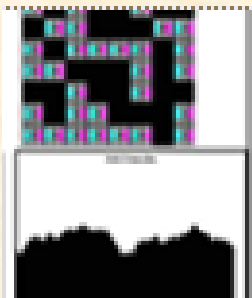
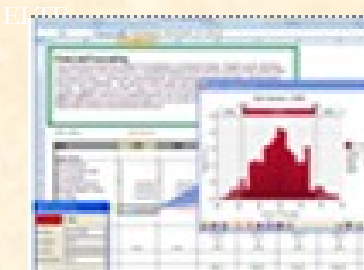


## Reakciókinetika

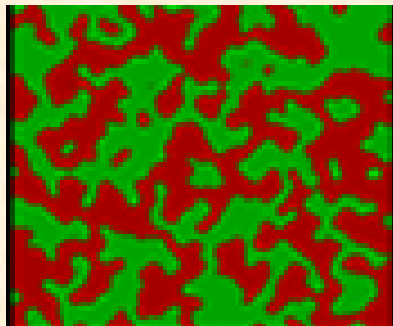
Az elemi reakciókra a következő jegyek jellemzők:

- leírhatók egyetlen sztöchiometriai egyenlettel;
- a reakciósebesség kialakításában csakis a reagáló komponenseknek van szerepe, a termékeknek nem;
- sebességük arányos a reagáló komponensek koncentrációjának megfelelő hatványával.

A homogén reakciókban résztvevő valamennyi anyag ugyanabban a fázisban (gáz alakban vagy oldatban) van jelen.



# Kémiai modellek



## Reakciókinetika

Kiindulunk a síkbeli fizikai (gáz vagy folyadék) modellekből.

A mozgás és a reakció lépéseket külön vizsgáljuk:

Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen\_hely}(N, M)$

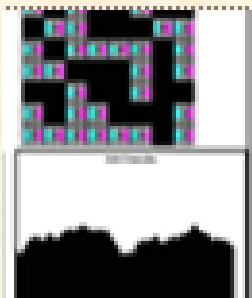
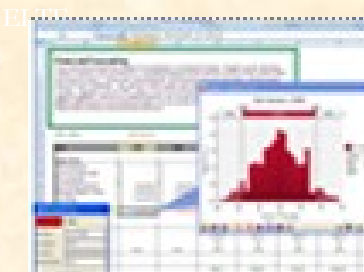
$(k, l) := \text{Véletlen\_szomszéd}(i, j)$

Reakció  $(i, j, k, l)$

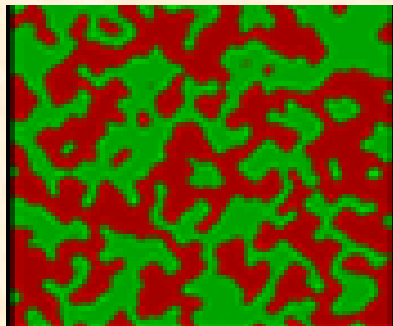
Mozgás  $(T(i, j), T(k, l))$

Eljárás vége.

A mozgás azonos a fizikai modellekben használt mozgással, nem fogalmazzuk meg újra.



# Kémiai modellek



## Izomerizáció: $A \leftrightarrow B$

Legyen  $P$  az  $A \rightarrow B$ ,  $Q$  pedig a  $B \rightarrow A$  reakciósebességi állandója!

Reakció  $(i, j)$  :

Ha  $T(i, j) = "A"$  akkor  $A \rightarrow B$  reakció

különben ha  $T(i, j) = "B"$  akkor  $B \rightarrow A$  reakció

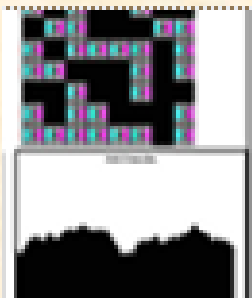
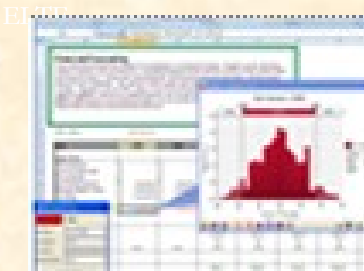
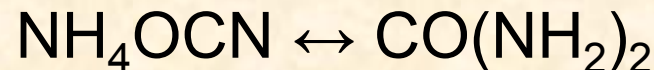
Eljárás vége.

$A \rightarrow B$  reakció:

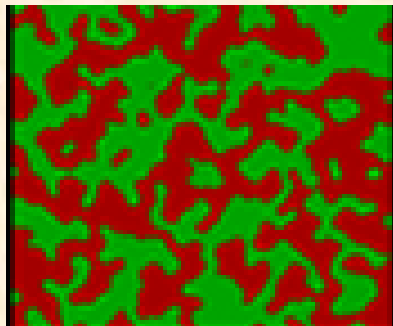
Ha véletlenszám  $< P$  akkor  $T(i, j) := "B"$

Eljárás vége.

Példa: Ammónium-cianát ( $\text{NH}_4\text{OCN}$ ) átalakulása karbamiddá [ $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ ]:



# Kémiai modellek



**Egyesülés:  $A+B \rightarrow C$**

Legyen  $P$  az  $A+B \rightarrow C$  reakciósebességi állandója!

Reakció  $(i, j, k, l)$  :

Ha  $T(i, j) = "A"$  és  $T(k, l) = "B"$  vagy

$T(i, j) = "B"$  és  $T(k, l) = "A"$

akkor  $A+B \rightarrow C$  reakció

Eljárás vége.

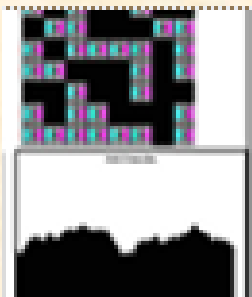
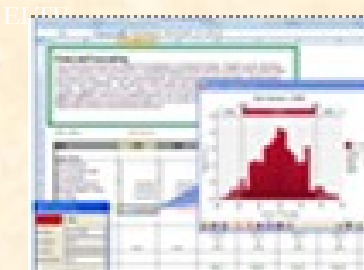
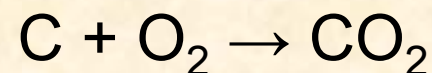
$A+B \rightarrow C$  reakció:

Ha véletlenszám  $< P$  akkor  $T(i, j) := "C"$

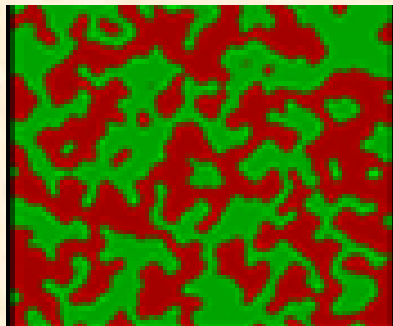
$T(k, l) := " "$

Eljárás vége.

**Példa: Szén (C) oxidációja:**



# Kémiai modellek



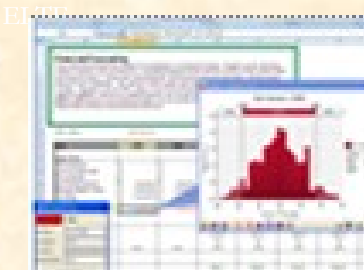
**Bomlás:  $C \rightarrow A+B$**

Legyen  $P$  az  $C \rightarrow A+B$  reakciósebességi állandója!

Reakció  $(i, j)$  :

Ha  $T(i, j) = "C"$  akkor  $C \rightarrow A+B$  reakció

Eljárás vége.

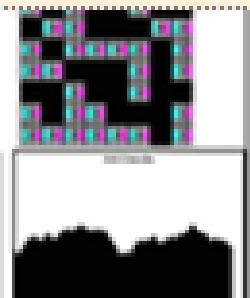


**A reakció megvalósításához üres hely kell!**

$C \rightarrow A+B$  reakció:

Ha véletlenszám  $< P$  és van szomszéd üres  
akkor  $T(i, j) := "A"; T(\text{szomszéd}) := "B"$

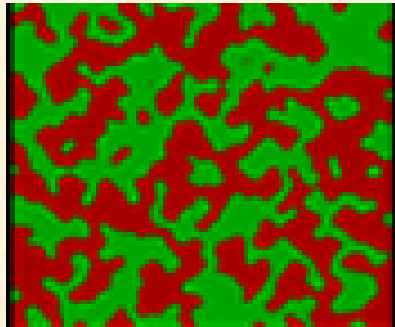
Eljárás vége.



**Példa: a mészkő bomlása kalcium-oxiddá (égetett mész) és szén-dioxiddá a mészégetéskor:**



# Kémiai modellek



## Disszociáció: $A+B \leftrightarrow C$

Legyen  $P$  az  $A+B \rightarrow C$ ,  $Q$  pedig a  $C \rightarrow A+B$  reakciósebességi állandója!

Reakció  $(i, j, k, l)$  :

Ha  $T(i, j) = "A"$  és  $T(k, l) = "B"$  vagy

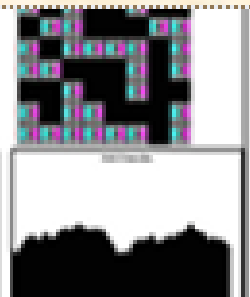
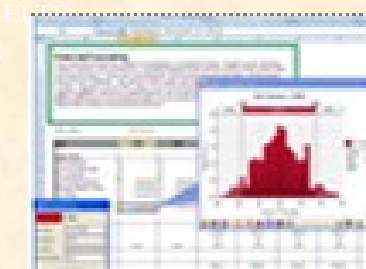
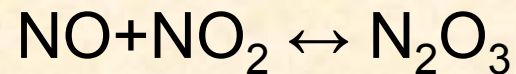
$T(i, j) = "B"$  és  $T(k, l) = "A"$

akkor  $A+B \rightarrow C$  reakció

különben ha  $T(i, j) = "C"$  akkor  $C \rightarrow A+B$  reakció

Eljárás vége.

Példa: dinitrogén trioxid ( $N_2O_3$ ) átalakulás nitrogénmonoxiddá ( $NO$ ) és nitrogéndioxiddá ( $NO_2$ ):



# Kémiai modellek

## Cserebomlás: $A+B \leftrightarrow C+D$

Legyen  $P$  az  $A+B \rightarrow C+D$ ,  $Q$  pedig a  $C+D \rightarrow A+B$  reakciósebességi állandója!

Reakció  $(i, j, k, l)$  :

Ha  $T(i, j) = "A"$  és  $T(k, l) = "B"$  vagy

$T(i, j) = "B"$  és  $T(k, l) = "A"$

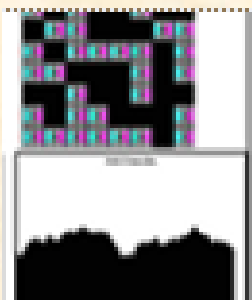
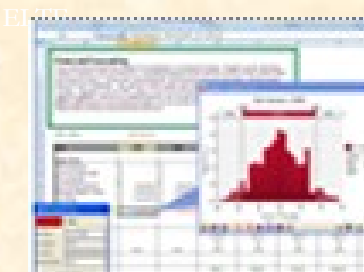
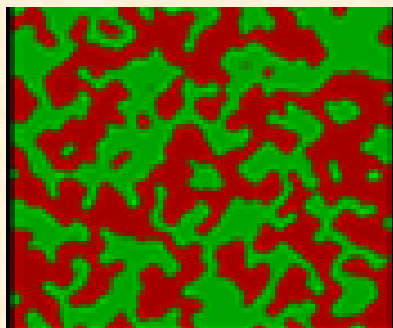
akkor  $A+B \rightarrow C+D$  reakció

különben ha  $T(i, j) = "C"$  és  $T(k, l) = "D"$  vagy

$T(i, j) = "D"$  és  $T(k, l) = "C"$

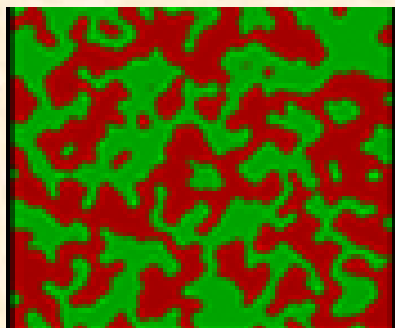
akkor  $C+D \rightarrow A+B$  reakció

Eljárás vége.





# Kémiai modellek



## Cserebomlás: $A+B \leftrightarrow C+D$

$A+B \rightarrow C+D$  reakció:

Ha véletlenszám  $< P$  akkor  $T(i, j) := "C"$   
 $T(k, l) := "D"$

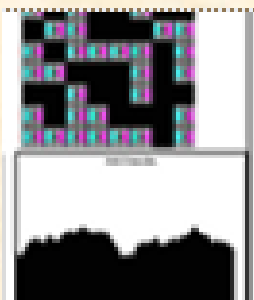
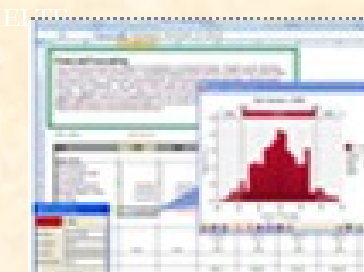
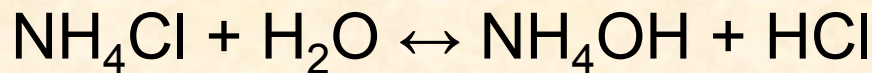
Eljárás vége.

$C+D \rightarrow A+B$  reakció:

Ha véletlenszám  $< Q$  akkor  $T(i, j) := "A"$   
 $T(k, l) := "B"$

Eljárás vége.

Példa: Ammóniumklorid ( $NH_4Cl$ ) és víz ( $H_2O$ )  
 átalakulása ammóniumhidroxiddá ( $NH_4OH$ ) és  
 sósavvá ( $HCl$ ):



# Kémiai modellek

## Sorozatos reakció: $A \rightarrow B \rightarrow C$

Legyen  $P$  az  $A \rightarrow B$ ,  $Q$  pedig a  $B \rightarrow C$  reakciósebességi állandója!

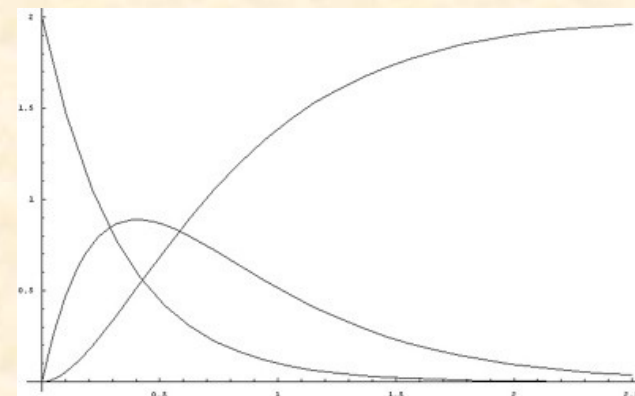
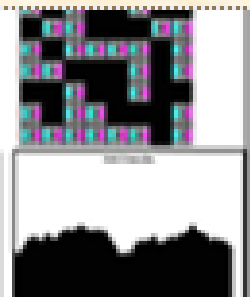
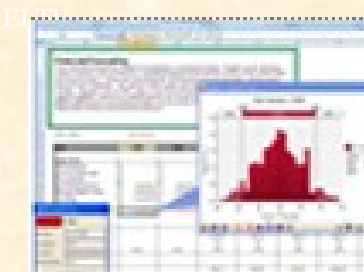
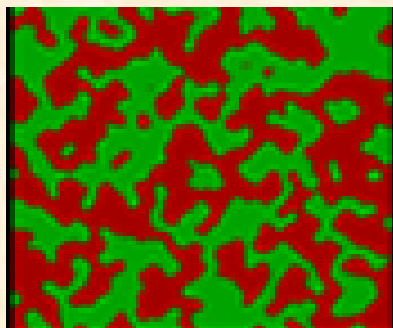
Reakció  $(i, j, k, l)$  :

Ha  $T(i, j) = "A"$  akkor  $A \rightarrow B$  reakció

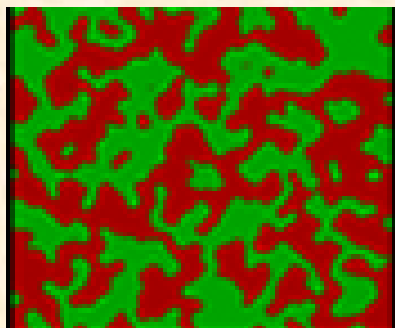
különben ha  $T(i, j) = "B"$  akkor  $B \rightarrow C$  reakció

Eljárás vége.

Itt az eredmény az újdonság, a modell szimulációs szempontból az eddigiekhez hasonló.



# Kémiai modellek



**Párhuzamos reakció:  $A \rightarrow B$ ,  $A \rightarrow C$**

Első eset:  $A+D \rightarrow B$ ,  $A+E \rightarrow C$

Reakció  $(i, j, k, l)$  :

Ha  $T(i, j) = "A"$  és  $T(k, l) = "D"$  vagy

$T(k, l) = "A"$  és  $T(i, j) = "D"$

akkor  $A+D \rightarrow B$  reakció

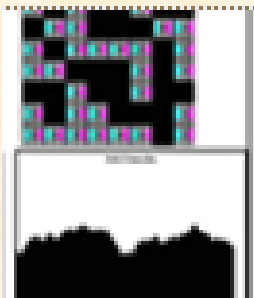
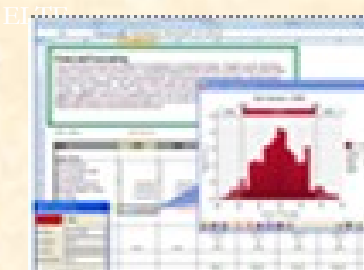
különben ha  $T(i, j) = "A"$  és  $T(k, l) = "E"$  vagy

$T(k, l) = "A"$  és  $T(i, j) = "E"$

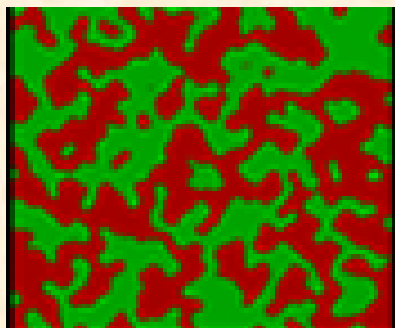
akkor  $A+E \rightarrow C$  reakció

Eljárás vége.

**Példa: a kloro-fluoro-karbonokból (CFC) UV-fény hatására képződő Cl atomok reakciója ózonnal vagy metánnal:**



# Kémiai modellek



**Párhuzamos reakció:  $A \rightarrow B$ ,  $A \rightarrow C$**

Második eset:  $A \rightarrow B+D$ ,  $A \rightarrow C+E$ .

Legyen  $P$  az  $A \rightarrow B+D$ ,  $Q$  pedig a  $A \rightarrow C+E$  reakciósebességi állandója!

Reakció  $(i, j, k, l)$  :

Ha  $T(i, j) = "A"$

akkor  $x := \text{véletlenszám}$

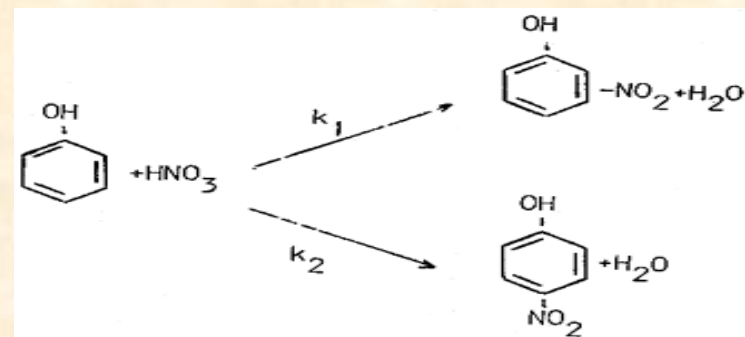
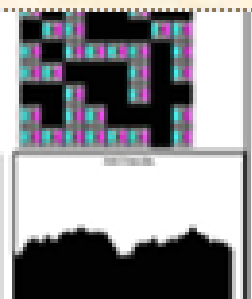
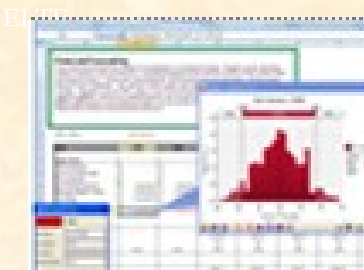
Ha  $x < P$  akkor  $A \rightarrow B+D$  reakció

különben ha  $x < P+Q$  akkor  $A \rightarrow C+E$  reakció

Eljárás vége.

**Példa:**

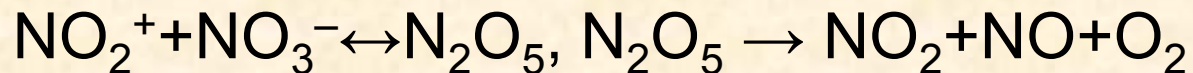
a fenol nitrálása



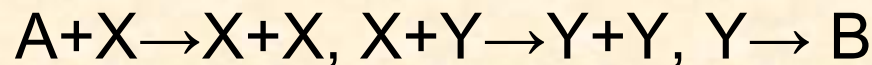
# Kémiai modellek

## További reakciórendszerek:

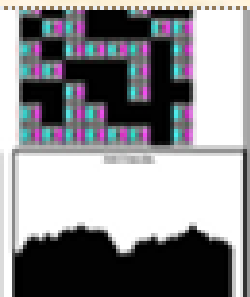
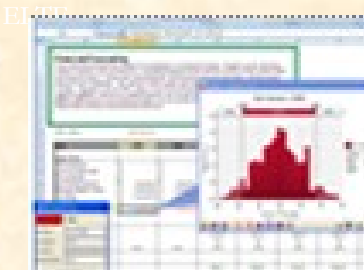
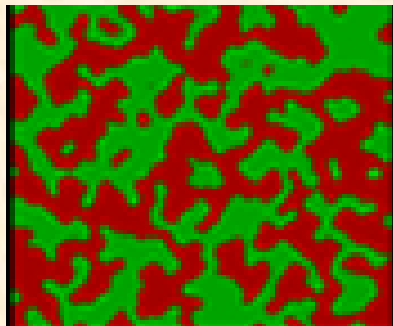
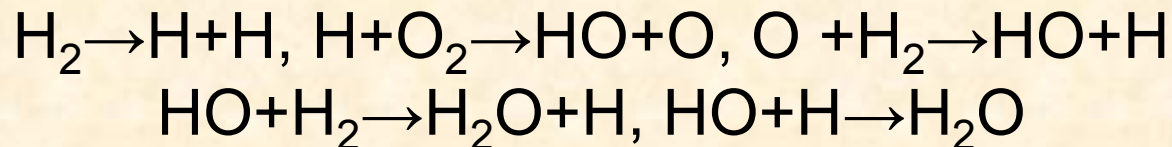
Kombinált reakció:



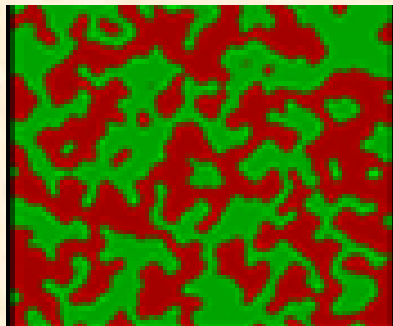
Oszcilláló reakció:



Láncreakció:



# Kémiai modellek



**Katalizátor:**  $A \rightarrow B$ ,  $A+X \rightarrow B+X$

Legyen  $P$  az  $A \rightarrow B$ ,  $Q$  pedig a  $A+X \rightarrow B+X$  reakciósebességi állandója!

Reakció  $(i, j, k, l)$  :

$x :=$  véletleszám

Ha  $T(i, j) = "A"$  és  $T(k, l) = "X"$

akkor Ha  $x < P$  akkor  $A \rightarrow B$  reakció

különben ha  $x < P+Q$  akkor  $A+X \rightarrow B+X$  reakció

különben ha  $T(i, j) = "A"$  és  $x < P$

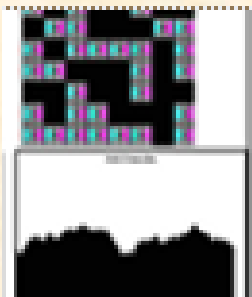
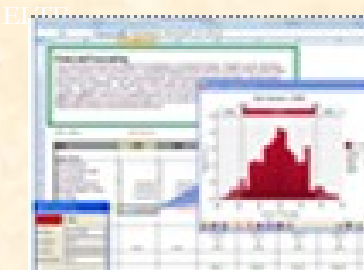
akkor  $A \rightarrow B$  reakció

különben ha  $T(i, j) = "X"$  és  $T(k, l) = "A"$  és  $x < Q$

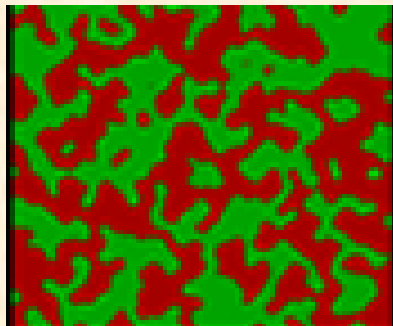
akkor  $A+X \rightarrow B+X$  reakció

Eljárás vége.

**Példa:** acetaldehid termikus bomlása.



# Kémiai modellek



**Autokatalizátor:  $A \rightarrow B$ ,  $A+X \rightarrow B+X+X$**

Legyen  $P$  az  $A \rightarrow B$ ,  $Q$  pedig a  $A+X \rightarrow B+X+X$  reakciósebességi állandója!

Reakció  $(i, j, k, l)$  :

$x :=$  véletleszám

Ha  $T(i, j) = "A"$  és  $T(k, l) = "X"$

akkor Ha  $x < P$  akkor  $A \rightarrow B$  reakció

különben ha  $x < P+Q$  akkor  $A+X \rightarrow B+X+X$  reakció

különben ha  $T(i, j) = "A"$  és  $x < P$

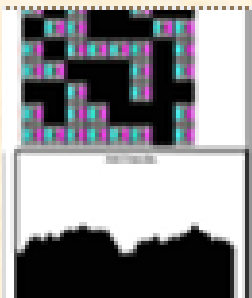
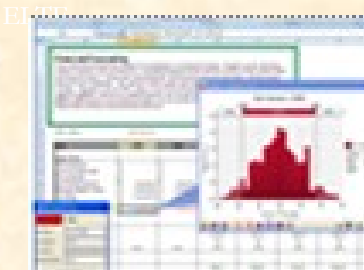
akkor  $A \rightarrow B$  reakció

különben ha  $T(i, j) = "X"$  és  $T(k, l) = "A"$  és  $x < Q$

akkor  $A+X \rightarrow B+X+X$  reakció

Eljárás vége.

**Példa: A kálium-permanganát oxidáló hatását a mangánionok katalizálják.**



A high-angle, wide shot of a modern building's atrium. The building's facade is a vibrant red, composed of a grid of square panels. Many of these panels are replaced by windows of various sizes, some with white frames and others with white grilles. The atrium is a large, open space with a light-colored floor. In the foreground, a curved, light-colored railing or walkway is visible. The overall atmosphere is bright and modern.

Vége