

Matematikai Reakciókinetika Kutatócsoport

Dr. Lente Gábor, egyetemi tanár

Dr. Póta György, egyetemi docens

A csoport munkájának célja a reakciókinetika matematikai módszereinek fejlesztése, illetve kémiai rendszerek matematikai modelljeinek kidolgozása és finomítása. Ezen belül a következő területek különösen is hangsúlyosak:

1. A sztochasztikus kinetika alkalmazásai. A sztochasztikus kinetika a hagyományos reakciókinetika folytonos koncentrációfogalmával szemben figyelembe veszi az anyag diszkrét természetét. Ez a módszer a koncentrációk időfüggésének megadása helyett azt írja le, mennyi a valószínűsége annak, hogy egy kiválasztott időpillanatban éppen adott számú molekula van jelen egy rendszerben. A sztochasztikus kinetikát sikerrel használták kísérleti tapasztalatok értelmezésére abszolút királis reakciókban, illetve igen kevés katalizátormolekulát tartalmazó, enzimkatalizált rendszerekben.

2. Reakció-diffúzió-egyenletek megoldása. A reakciókinetika gyors folyamatokat vizsgáló kísérleti módszereiben igen gyakori jelenség, hogy az oldat homogenitásáról idő hiányában nem lehet gondoskodni. Ilyen rendszerekben fontos a reakció-diffúzió-egyenletek használata a kísérleti tapasztalatok megfelelő értelmezéséhez. A csoport eddigi tapasztalatai villanófény-fotolízis és a stopped-flow technikák használatával kapcsolatosak.

3. Reakciókinetikai sémák differenciálegyenleteinek analitikus megoldása. A több lépést tartalmazó reakciókinetikai sémákban az analitikus megoldások megtalálása többnyire nagyban segíti annak megértését, hogy a koncentráció-idő görbék hogyan függenek a paraméterek (sebességi állandók illetve kezdeti koncentrációk) értékétől. A közelmúltban kétlépéses folyamatok viszonylag széles osztályára sikerült analitikai megoldásokat találni.

4. Az analitikusan nem jól kezelhető homogén és reakció-diffúzió modellek vizsgálata a differenciálegyenletek kvalitatív elméletének eszköztárával.