Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Izmán Regina

Differenciálegyenletek alkalmazásai a modellezésben

Szakdolgozat

Matematika BSc, matematikai elemző szakirány

Témavezető:

Valkó Éva

Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék

Budapest, 2020

NYILATKOZAT

Név: Izmán Regina

ELTE Természettudományi Kar, szak: matematika

NEPTUN azonosító: ISSQJA

Szakdolgozat címe:
Differenciálegyenletek alkalmazásai a modellezésben

A **szakdolgozat** szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló szellemi alkotásom, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest, 2020.05.29

Izmán Regina

a hallgató aláírása

Köszönetnyílvánítás

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Valkó Évának, hogy feltárta előttem a differenciálegyenletek világát, szakértelmével pedig végigsegítette a szakdolgozatom elkészítésének menetét. Köszönet a konzultációkért, a tanácsokért, és a sok munkáért, amit az elmúlt hónapokban kaptam.

Hálás vagyok még a családomnak, barátaimnak és a barátomnak a sok segítségért és támogatásért, amit tanulmányaim alatt kaptam tőlük.

Tartalomjegyzék

Bevezetés **6**

1. Matematikai bevezetés **8**

1.1. Differenciálegyenletek 8

1.2. Elsőrendű differenciálegyenletek nevezetes típusai 10

2. Összetett reakciók kinetikája **12**

2.1. Elemi reakciók kapcsolódása 12

2.2. Párhuzamos reakciók kinetikája 14

2.3. Sorozatos reakciók kinetikája 17

2.4. Reverzibilis reakciók kinetikája 20

2.5. Az elsőrendű reakciólépésekből álló reakciómechanizmusok megoldása 24

3. A radioaktív bomlás **27**

3.1. Bevezetés 27

3.2. A bomlási törvény 29

3.3. A bomlások típusai 30

3.4. Radioaktív izotópok és felhasználásaik 30

3.5. A bomlási törvény alkalmazása 31

4. Lambert-Beer törvény **33**

4.1. Története 33

4.2. A törvény 35

4.2.1. Lambert-Beer-törvény érvényességének előfeltételei 35

4.2.2. Esetleges hibák előfordulásának oka 35

4.2.3. A Lambert-Beer törvény levezetése 36

4.3. A Lambert-Beer törvény származtatása 36

4.4. A törvény alkalmazása atomabszorpciós kísérletek során 38

Összefoglalás **40**

Irodalomjegyzék **41**

Bevezetés

A differenciálegyenletek egy nagyon érdekes terület, azt hinné az ember, amikor először hall róla, hogy bonyolult matematikai feladatokhoz kapcsolódnak, illetve ezeknek a megoldásához használják, ami egy hétköznapi embert nem érint. Ez viszont nagy tévedés. Differenciálegyenlet nagyon sok helyen lelhető fel a magunk környezetében is. Ilyen például a víz lehülésének a folyamata, egy tárgy leejtésének szabadesése, az elektromos áramkörökben lévő áramerősség mérése, hővezetési jelenség, és még sorolhatnám.

A differenciálegyenleteket Sir Isaac Newton (1642-1727)-nak köszönhetjük. A felfedezést egy anagramma formájában is kiadta, melynek fordítása a következő: "A természet törvényeit differenciálegyenletek fejezik ki. Differenciálegyenleteket megoldani hasznos" (fordította: Vladimir Arnold).[1] A differenciálegyenletek legtöbbször úgy jönnek létre, hogy valamilyen fizikai, kémiai, műszaki, biológiai stb. probléma leírása vagy tanulmányozása során összefüggést találunk az ismeretlen függvények és ezek deriváltjai között.[2]

Az első fejezetben szerepelnek a differenciálegyenletek megértéséhez szükséges definíciók, tételek és az elsőrendű differenciálegyenletek nevezetes típusainak megoldási módszerei.

A második fejezetben az összetett reakciók kinetikájáról olvashatunk. Taglalni fogom a párhuzamos, a sorozatos és a reverzibilis reakciókfajtákat. Ismertetem az egyes reakciótípusokhoz tartozó differenciálegyenlet-rendszereket, valamint ezek megoldásait. Reakciókinetikai példákon keresztül bemutatom a reakciótípusokra jellemző megoldásgörbék viselkedését. A szükséges ábrákat és számításokat a Matlab program felhasználásával készítettem. Végezetül megemlítem az elsőrendű reakciólépésekből álló reakciómechanizmusok két lehetséges megoldási módszerét is.

A harmadik fejezet a radioaktív bomlásról szól. A bomlási folyamat, mint reakció, a reakciókinetikához sorolandó, de annyi érdekesség tartozik a radioaktivitáshoz, hogy külön fejezetet szenteltem ennek a jelenségnek a bemutatására. Ráadásul a természetes és mesterséges bomlási folyamatoknak élettani hatásai vannak, ezért igen fontos az ismeretük. A bomlási törvény levezetése mellett szó lesz a bomlások típusaról, és a radioaktív izotópok felhasználásairól is.

Az utolsó fejezet kicsit különbözik az előzőektől. A Lambert-Beer törvényt ismerteti, amely összefüggést tár fel a fény elnyelődés és azon közeg között, melyben a fény halad. A törvény mellett szerepelni fognak annak előfeltételei és származtatása, illetve két példa is a törvény alkalmazására.

1. fejezet

Matematikai bevezetés

A matematikai bevezetés fejezet kidolgozása Pfeil Tamás 2018-as differenciálegyenletek előadása [3] és Valkó Éva 2018-as differenciálegyenletek gyakorlata [4] alapján készült el, de forrásul szolgáltak még az [1] [2] [5] [6] [7] [8] és [9] differenciálegyenletek jegyzetek és tankönyv.

1.1. Differenciálegyenletek

1.1.1. Definíció. (Differenciálegyenlet) A differenciálegyenletek olyan egyenletek, ahol az ismeretlen függvény és annak deriváltjai között áll fenn összefüggés. Szerepelhetnek benne konstansok, egy vagy több független változó, ezek valamilyen függvénye vagy függvényei, és a legfontosabb, hogy szerepelnie kell e függvény vagy függvények független változó, vagy változók szerinti közönséges, illetve parciális deriváltjának vagy deriváltjainak.

1.1.2. Definíció. (Közönséges és parciális differenciálegyenlet) Ha a differenciálegyenletben egyetlen független változó van, akkor közönséges differenciálegyenletnek nevezzük, ha kettő vagy több független változó van, akkor pedig parciális differenciálegyenletnek. Abban az esetben, ha az ismeretlen függvények száma egynél több, akkor az ismeretlen függvények számával egyenlő számú differenciálegyenletből álló differenciálegyenlet-rendszerről van szó. Legyen az közönséges, vagy parciális.

1.1.3. Definíció. Legyen $D \in \mathbb{R}^2$ összefüggő nyílt halmaz, $f\colon D \to \mathbb{R}$ folytonos függvény. Az elsőrendű közönséges differenciálegyenlet alakja:

$$\dot{x}(t) = f(t, x(t)).$$

1.1.4. Definíció. (Differenciálegyenlet rendje) A differenciálegyenlet rendje a benne előforduló legmagasabb rendű derivált rendszámával egyenlő.

1.1.5. Definíció. (Az n-edrendű közönséges differenciálegyenlet) Legyen $n \in \mathbb{N}$ és $F : \mathbb{R}^{n+2} \to \mathbb{R}$ folytonos függvény. Ekkor n-edrendű közönséges differenciálegyenletnek nevezzük az

$$F(t, x(t), x'(t), ..., x^{(n)}(t)) = 0$$

alakú egyenletet.

1.1.6. Definíció. Az explicit n-edrendű közönséges differenciálegyenletek általános alakja

$$x^{(n)}(t) = f(t, x(t), x'(t), ..., x^{(n-1)}(t)),$$

ahol az egyenlet jobboldalának nevezett f függvény folytonos egy $\Omega \subset \mathbb{R}^{n+1}$ tartományon, a keresett x függvény pedig valamilyen $I \subset \mathbb{R}$ nyílt intervallumon értelmezett n-szer folytonosan differenciálható függvény.

1.1.7. Definíció. (Lineáris differenciálegyenlet) A közönséges difierenciálegyenletek közül azokat, amelyekben az ismeretlen függvény és ennek deriváltjai legfeljebb csak az első hatványon fordulnak elő és szorzatuk nem szerepel, lineáris differenciálegyenleteknek nevezik. Általános alakja

$$b(x) = a_n(t)x^{(n)} + a_{n-1}(t)x^{(n-1)} + ... + a_1(t)x' + a_0(t)x,$$

ahol $a_n \neq 0$.

1.1.8. Definíció. (Inhomogén és homogén differenciálegyenletek) Ha a közönséges differenciálegyenletben van olyan tag, amely állandó, vagy amelyben csak a független változó szerepel, akkor a differenciálegyenlet inhomogénnek, ha nincs, akkor homogénnek nevezzük.

1.1.9. Definíció. (Differenciálegyenlet megoldása) Differenciálegyenletet megoldani annyit jelent, mint meghatározni mindazokat a függvényeket, amelyek a deriváltjaikkal együtt azonosan kielégítik az adott differenciálegyenletet. Ezek a függvények a differenciálegyenlet megoldásai. Mivel a differenciálegyenleteket általában integrálással oldjuk meg, a megoldást szokás a differenciálegyenlet integráljának is nevezni és a megoldások megkeresését a differenciálegyenlet integrálásának.

1.1.10. Definíció. (Egyértelműség) A differenciálegyenlet megoldása globálisan egyértelmű, ha bármely ponton át legfeljebb egy megoldásgrafikon halad át, illetve lokálisan egyértelmű, ha minden pontnak van olyan környezete, ahol minden megoldás grafikonja egybeesik, amelyik átmegy az adott ponton.

1.1.11. Tétel. *(Peano-tétel) Ha $f\colon \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ folytonos függvény, akkor $\dot{x}(t) = f(t, x(t))$ differenciálegyenletnek bármely kezdeti feltétellel van megoldása. Ha a kezdeti feltétel $x(t_0) = p_0$, akkor a megoldás t_0 egy környezetében értelmezve van.*

1.1.12. Definíció. (Lipschitz-feltétel) A g függvény teljesíti a Lipschitz-feltételt, ha létezik olyan $L > 0$, hogy $|g(x) - g(y)| \leq L|x - y|$, ahol $x, y \in D(g)$.

1.1.13. Tétel. *Ha $f = f(t, x)$ a második változójában Lipschitz tulajdonságú akkor az $\dot{x} = f(t, x(t))$ differenciálegyenlet megoldása globálisan egyértelmű.*

1.1.14. Definíció. (Általános megoldás) Egy f függvényt az n-edrendű differenciálegyenlet általános megoldásának nevezünk, ha deriváltjaival együtt azonosan kielégíti a differenciálegyenletet és pontosan n db egymástól függetlenül megválasztható szabad paramétert tartalmaz.

1.1.15. Definíció. (Partikuláris megoldás) Egy f függvényt az n-edrendű differenciálegyenlet partikuláris megoldásának nevezünk, ha deriváltjaival együtt azonosan kielégíti a differenciálegyenletet és legfeljebb $n - 1$ db egymástól függetlenül megválasztható szabad paramétert tartalmaz. A szabad paraméterek helyébe egy-egy valós számot helyettesítve a differenciálegyenlet valamely megoldását kapjuk.

1.2. Elsőrendű differenciálegyenletek nevezetes típusai

1. Közvetlenül integrálható
   Ezeket a differenciálegyenletek a legegyszerűbb megoldani, ugyanis semmilyen megoldási mechanizmust nem igényelnek. Azonnal elvégezhető az integrálás. Általános alakja

   $$\dot{x}(t) = g(t),$$

   ilyen például az $\dot{x}(t) = e^t$ differenciálegyenlet is.

2. Szétválasztható differenciálegyenlet
   A szétválasztható, vagy másnéven szeparábilis differenciálegyenletek az

   $$\dot{x}(t) = g(t)h(x(t))$$

   alakban találhatóak meg. Megoldásánál külön oldalra rendezzük a t-től, illetve külön az x-től függő tényezőket. Ehhez le kell osztani $h(x(t)) \neq 0$-val.

   $$\frac{\dot{x}(t)}{h(x(t))} = g(t) \Longleftrightarrow H(x(t)) = G(t) + C \Longleftrightarrow x(t) = H^{-1}(G(t) + C),$$

   ahol $\dot{G} = g$, $\dot{H} = 1/h$ és $C \in \mathbb{R}$. A megoldáshoz szükséges még, hogy H injektív függvény legyen.

3. Elsőrendű lineáris differenciálegyenlet
   Legyenek $a, b : I \to \mathbb{R}$ adott folytonos függvények az I intervallumon, ekkor az

$$\dot{x}(t) = a(t)x(t) + b(t)$$

   alakú egyenletet elsőrendű lineáris differenciálegyenletnek nevezzük. A feladat megoldása előáll $x(t) = x_1(t) + x_2(t)$ alakban, ahol $x_1(t)$ a homogén feladat megoldása, $x_2(t)$ pedig az inhomogén feladat egy partikuláris megoldása. Először az $\dot{x}(t) = a(t)x(t)$ homogén feladat megoldását keressük meg $x_1(t) = K \cdot e^{A(t)}$ alakban, ahol $A' = a$ és $K \in \mathbb{R}$. Ebből az állandók variálásának módszerét alkalmazva az x_2 partikuláris megoldást $x_2(t) = K(t) \cdot e^{A(t)}$ alakban keressük. Ezután $x_2(t) = K(t) \cdot e^{A(t)}$ egyenletet behelyettesítem a kiindulási $\dot{x}(t) = a(t)x(t) + b(t)$ egyenletbe. Így megkapjuk $K(t)$-t és x_2-t.

4. Homogén közönséges differenciálegyenlet
   Az f függvény homogén, ha $f(\alpha t, \alpha x(t)) = f(t, x(t))$ összefüggés minden $\alpha \in \mathbb{R}$ esetén fennáll. Az

$$\dot{x}(t) = g\left(\frac{x(t)}{t}\right)$$

   egyenletet homogén differenciálegyenletnek nevezzük. Az $y(t) = \frac{x(t)}{t}$ helyettesítést elvégzve egy szeparábilis differenciálegyenletet kapunk, melynek már ismert a megoldási módszere.

5. Bernoulli-féle differenciálegyenlet
   Ha $a, b : I \to \mathbb{R}$ adott folytonos függvények az I intervallumon és $\alpha \in \mathbb{R}$ adott szám, akkor az

$$\dot{x}(t) = a(t)x(t) + b(t)x^{\alpha}(t)$$

   alakú egyenletet Bernoulli-féle differenciálegyenletnek nevezzük. Az $y(t) = x^{1-\alpha}(t)$ helyettesítéssel egy y-ra lineáris differenciálegyenletet kapunk.

6. Egzakt differenciálegyenlet
   Az egzakt egyenletekkel az

$$M(t, x(t)) + N(t, x(t))\dot{x}(t) = 0$$

   alakban találkozhatunk, ahol $M, N : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ adott differenciálható függvények és $\partial_2 M = \partial_1 N$. Legyen $F : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ differenciálható függvény, ha igaz, hogy $\partial_1 F = M$ és $\partial_2 F = N$, akkor F az egzakt differenciálegyenlet megoldásfüggvényét adja.

2. fejezet

Összetett reakciók kinetikája

A fejezet alapjául Keszei Ernő 2016-os A reakciókinetika alapjai [10] című egyetemi tankönyve, Turányi Tamás előadása [11], illetve, Dr.Karácsonyi Rezső Fizikai-kémiai példatára [12] szolgál.

Bevezetés

A körülöttünk zajló kémiai folyamatok termékeit általában több elemi reakció eredményezi, amelyek valamilyen módon kapcsolódnak egymáshoz. Az összekapcsolt elemi reakciókat együtt összetett reakciómechanizmusnak hívjuk. Ezen mechanizmust többféle módon lehet szemléltetni. A reakciókinetikában minden egyes elemi reakciót sztöchiometriai egyenlet alakjában külön-külön kell felírni, és szemléltetni kell a reakciók között lévő kapcsolódási módot is.

2.1. Elemi reakciók kapcsolódása

Elemi reakciók a következőféleképpen játszodhatnak le.

1. Párhuzamosan, ahol ugyanabból a reaktánsból kiindulva különböző termékek képződnek. Szokás még elágazó vagy versengő reakciónak is hívni. A versengő elnevezés arra utal,

hogy két vagy több reakcióút versenyzik egymással a kiindulási anyag átalakításáért.

$$\begin{tikzcd} & \mathrm{B} \\ \mathrm{A} \arrow[ur] \arrow[dr] & \\ & \mathrm{C} \end{tikzcd} \qquad \begin{tikzcd} & \mathrm{C+D} \\ \mathrm{A+B} \arrow[ur] \arrow[r] \arrow[dr] & \mathrm{E+F} \\ & \mathrm{G} \end{tikzcd}$$

A bal oldali ábrán egyazon reaktánsból két különböző termék keletkezésének kapcsolódási módja látható unimolekulás (a reakció során a sebességmeghatározó lépésben csak egyetlen molekula entitás játszik szerepet) folyamatokban. A jobb oldali ábrán egy bonyolultabb elágazást láthatunk, itt a lejátszódó folyamatok már nem feltétlenül unimolekulásak.

2. Sorozatosan, vagyis egymást követően.
   A sorozatos reakciókat szokás még soros, egymást követő, vagy kaszkádreakcióknak is hívni.

$$\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B} \longrightarrow \mathrm{C}$$

   Az ábrán két unimolekulás folyamat sorbakapcsolása látható. Ebben az összetett reakcióban az A reaktánsból egy B átmeneti termék vagy másnéven tranziens keletkezik, majd abból keletkezik a C végtermék. Nyilván a sorozatos reakciókat is lehet bonyolítani, ha nem csak unimolekulás lépések találhatók benne. Ekkor a reakcióban szereplő többi reaktánst a reakciót jelölő nyílra szokás feltüntetni. Ennek megfelelő a következő soros reakció.

$$\mathrm{A} \xrightarrow{+\mathrm{B}} \mathrm{C} \longrightarrow \mathrm{D}$$

3. Megfordíthatóan, vagy reverzibilisen, ahol ugyanaz a reakció mindkét irányban lejátszódhat.
   Ezen fajta reakciókat megfordítható, illetve egyensúlyi reakcióknak is nevezik. Amikor egy unimolekulás reakció reverzibilis az azt jelenti, hogy a reakció mindkét irányban lejátszódhat. A következő ábrán A és B anyagfajta között lévő megfordítható reakció látható.

$$\mathrm{A} \rightleftharpoons \mathrm{B}$$

A reverzibilis reakciók is lehetnek bonyolultabbak.

$$\mathrm{A} + \mathrm{B} \rightleftharpoons \mathrm{C} + \mathrm{D}$$

Végül fontos azt is tudni, hogy ezen reakciófajták együttesen is előfordulhatnak, ahol a különböző elemi reakciók tetszőleges módon kapcsolódhatnak egymáshoz.

2.2. Párhuzamos reakciók kinetikája

Első példaként tekintsük a legegyszerűbb esetet; amelyben egy kiindulási anyagból két unimolekulás reakcióban két különböző termék keletkezik:

$$\begin{tikzcd} & \mathrm{B} \\ \mathrm{A} \arrow[ur, "k_1"] \arrow[dr, "k_2"'] & \\ & \mathrm{C} \end{tikzcd}$$

Az összetett reakciók sebességi egyenlete egy közönséges differenciálegyenlet-rendszert alkot. Minden komponensre felírjuk annak időbeli megváltozását, és minden olyan reakció, amelyben az adott komponens szerepel, az adott differenciálegyenlet egy tagjaként szerepel. A koncentrációkat az anyagok nevének szögletes zárójelbe tevésével jelöljük. Ezáltal a következő három sebességi egyenletet lehet felírni.

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} &= -k_1[\mathrm{A}] - k_2[\mathrm{A}] \\ \frac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t} &= k_1[\mathrm{A}] \\ \frac{\mathrm{d}[\mathrm{C}]}{\mathrm{d}t} &= k_2[\mathrm{A}] \end{aligned}$$

ahol [A], [B], [C] $: [0, \infty] \to [0, \infty]$ függvények a jelenlévő anyagfajták koncentrációjának időbeli függését megadó függvények. Az első egyenlet azt írja le, hogy az A komponens a k_1 és k_2 sebességi együtthatóval jellemezhető reakciólépésben a saját koncentrációjával arányosan fogy. A B komponens a k_1-gyel jellemezhető lépésben az A reaktáns koncentrációjával arányosan keletkezik, míg a C komponens a k_2-vel jellemezhető lépésben ugyancsak az A reaktáns koncentrációjával arányosan keletkezik. A három egyenlet egymástól független, ezért megoldásuk a közönséges differenciálegyenlet-rendszer megoldása is egyben. Az első egyenletet a következő

módón lehet átalakítani, majd megoldani.

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = -(k_1 + k_2)[\mathrm{A}]$$
$$\int \frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{[\mathrm{A}]} = -\int (k_1 + k_2)\mathrm{d}t$$

Az integrálást elvégezve

$$\ln[\mathrm{A}] = -(k_1 + k_2)t + C \qquad (C \in \mathbb{R})$$
$$[\mathrm{A}] = e^{-(k_1+k_2)t} \cdot K \qquad (K \in \mathbb{R})$$

Ha feltesszük, hogy a $t = 0$ időpillanatban más termék nem volt a reakcióegyenletben, csak az A komponens $[\mathrm{A}]_0$ koncentrációban, ami azt jelenti, hogy $[\mathrm{B}]_0 = 0$ és $[\mathrm{C}]_0 = 0$, akkor a megoldás az A anyagfajta koncentrációjára a következő egyenlet lesz.

$$[\mathrm{A}] = [\mathrm{A}]_0 e^{-(k_1+k_2)t} \tag{2.1}$$

Ezzel egyszerűen megkapható a termékek koncentrációja is. Figyelembevéve, hogy az A reaktánsból mindig $k_1 : k_2$ arányban keletkezik a B és C termék, a következő megoldásfüggvényeket kapjuk.

$$[\mathrm{B}] = [\mathrm{A}]_0 \frac{k_1}{(k_1 + k_2)}(1 - e^{-(k_1+k_2)t}) \tag{2.2}$$
$$[\mathrm{C}] = [\mathrm{A}]_0 \frac{k_2}{(k_1 + k_2)}(1 - e^{-(k_1+k_2)t}) \tag{2.3}$$

Ezekben az egyenletekben a $\frac{k_1}{(k_0+k_2)}$ és $\frac{k_2}{(k_0+k_2)}$ hányadosokat elágazási aránynak nevezzük.

A megoldást könnyedén le lehet vezetni n darab elágazásra, ahol csak elsőrendű reakciók szerepelnek. A reaktánst jelölje A, a termékeket pedig P_1, P_2, ..., P_n. Ezek alapján a sebességi egyenletek

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = -(k_1 + k_2 + ... + k_n)[\mathrm{A}]$$
$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{P}_1]}{\mathrm{d}t} = k_1[\mathrm{A}]$$
$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{P}_2]}{\mathrm{d}t} = k_2[\mathrm{A}]$$
$$\vdots$$
$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{P}_n]}{\mathrm{d}t} = k_n[\mathrm{A}]$$

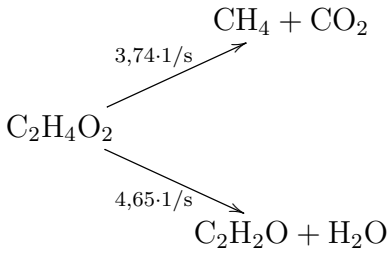
A sebességi egyenletek megoldásfüggvényei

$$
\begin{aligned}
[\mathrm{A}] &= [\mathrm{A}]_0\ e^{-(k_1+k_2+...+k_n)t} \\
[\mathrm{P}_1] &= [\mathrm{A}]_0\ \frac{k_1}{(k_1+k_2+...+k_n)}(1-e^{-(k_1+k_2+...+k_n)t}) \\
[\mathrm{P}_2] &= [\mathrm{A}]_0\ \frac{k_2}{(k_1+k_2+...+k_n)}(1-e^{-(k_1+k_2+...+k_n)t}) \\
&\vdots \\
[\mathrm{P}_n] &= [\mathrm{A}]_0\ \frac{k_n}{(k_1+k_2+...+k_n)}(1-e^{-(k_1+k_2+...+k_n)t})
\end{aligned}
$$

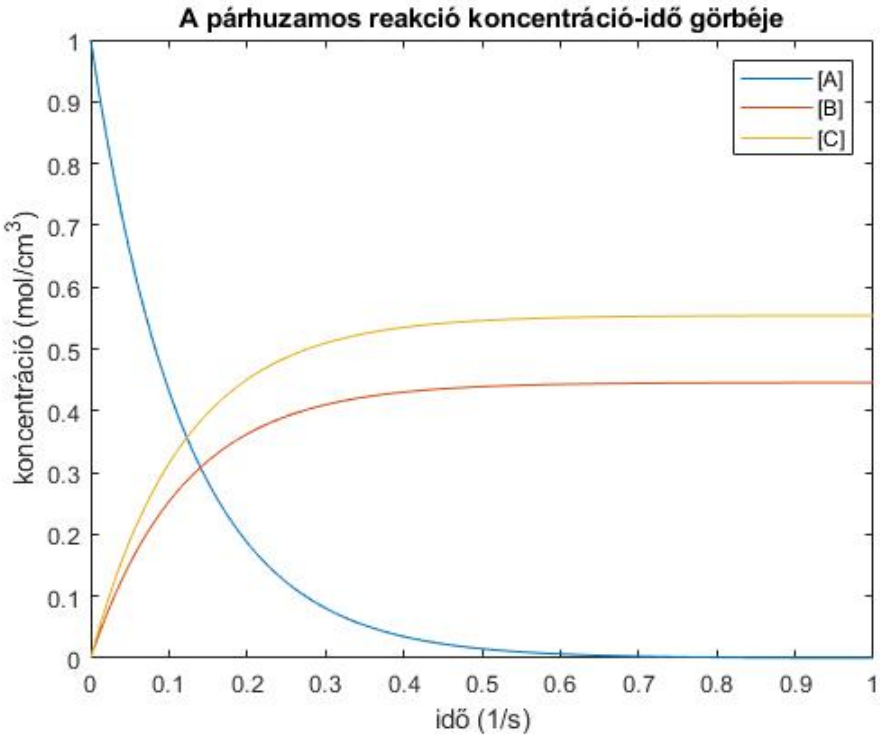
Az i-edik elégazási arányt tehát a $\frac{k_i}{(k_1+k_2+...+k_n)}$ hányados határozza meg.

Párhuzamos reakció bemutatása

Az ecetsav 916°C-on egyrészt széndioxidra és metánra, másrészt etenonra és vízre bomlik. Az egyes reakcióutakat jellemző sebességi együtthatók értéke $k_1 = 3,74 \cdot 1/\mathrm{s}$ és $k_2 = 4,65 \cdot 1/\mathrm{s}$. Ezt a következő ábrán lehet szemléltetni.



A sebességi együtthatókat felhasználva és feltéve, hogy $[\mathrm{A}]_0 = 1$ mol/cm^3, $[\mathrm{B}]_0 = [C]_0 = 0$ mol/cm^3 egységnyi a kiindulási anyagmennyiség, alkalmazni lehet a (2.1) és (2.2) megoldásfüggvényeket. A bomlási folyamatot során a koncentráció függvények alakulása leolvasható a következő ábráról.



2.3. Sorozatos reakciók kinetikája

Vizsgáljuk meg két egymást követő unimolekulás lépésből álló összetett reakció mechanizmusát.

$$\mathrm{A} \xrightarrow{k_1} \mathrm{B} \xrightarrow{k_2} \mathrm{C}$$

Felírva a sebességi egyenleteket az alábbi differenciálegyenlet-rendszerhez jutunk.

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d[A]}}{\mathrm{d}t} &= -k_1[\mathrm{A}] \\
\frac{\mathrm{d[B]}}{\mathrm{d}t} &= k_1[\mathrm{A}] - k_2[\mathrm{B}] \\
\frac{\mathrm{d[C]}}{\mathrm{d}t} &= k_2[\mathrm{B}]
\end{aligned}$$

Ha feltételezzük, hogy kezdetben csak az A anyagfajta volt jelen a rendszerben $[\mathrm{A}]_0$ koncentrációval, azaz $[\mathrm{B}]_0$=0 és $[\mathrm{C}]_0$=0, akkor az A anyagfajta koncentrációjának időbeli függését leíró függvény

$$[\mathrm{A}] = [\mathrm{A}_0]\ e^{-k_1 t}. \tag{2.4}$$

A második egyenlet megoldásához fel kell használnunk az első eredményét.

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t} = k_1[\mathrm{A}]_0 e^{-k_1 t} - k_2[\mathrm{B}] \tag{2.5}$$

Ezzel a behelyetesítéssel kaptunk egy elsőrendű inhomogén differenciálegyenletet. Az elsőrendű inhomogén egyenlet megoldásához először a homogén egyenlet részletet oldjuk meg, majd az állandók variálásának módszerével megkapjuk a partikuláris megoldást. A homogén feladat megoldásának és a partikuláris megoldás összege előállítja az inhomogén egyenlet megoldását. A homogén differenciálegyenlet tehát

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t} = -k_2[\mathrm{B}],$$

melynek megoldása

$$[\mathrm{B}]_{\mathrm{Hom}} = I e^{-k_2 t} \qquad (I \in \mathbb{R}). \tag{2.6}$$

Az inhomogén feladat megoldása során az állandók variálásának módszerét alapul véve a partikuláris megoldást

$$[\mathrm{B}]_{\mathrm{Par}} = I(t)\ e^{-k_2 t} \tag{2.7}$$

alakban keressük. Ehhez behelyettesítünk a (2.5) egyenletbe.

$$\frac{\mathrm{d}(I(t)\ e^{-k_2 t})}{\mathrm{d}t} = k_1[\mathrm{A}]_0 e^{-k_1 t} - k_2 I(t)\ e^{-k_2 t}$$

A bal oldalon elvégezzük a számlálóban lévő szorzat deriválását.

$$\frac{\mathrm{d}I(t)}{\mathrm{d}t} e^{-k_2 t} - I(t) k_2 e^{-k_2 t} = k_1[\mathrm{A}]_0 e^{-k_1 t} - k_2 I e^{-k_2 t}$$

Egyszerűsítés és átrendezés után.

$$\frac{\mathrm{d}I(t)}{\mathrm{d}t} = k_1[\mathrm{A}]_0 e^{-(k_1 - k_2)t}$$

Az integrálást elvégezve.

$$I(t) = \frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{-(k_1 - k_2)} e^{-(k_1 - k_2)t} + C \qquad (C \in \mathbb{R})$$

Visszahelyettesítve a (2.7) egyenletbe megkapjuk a partikuláris megoldást.

$$[\mathrm{B}]_{\mathrm{Par}} = \frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{-(k_1 - k_2)} e^{-(k_1 - k_2)t} e^{-k_2 t} = \frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{(k_2 - k_1)} e^{-k_1}$$

Ezen megoldáshoz hozzáadva a homogén egyenlet megoldását kapjuk meg az inhomogén differenciálegyenlet megoldását.

$$[\mathrm{B}] = \frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{(k_2 - k_1)} e^{-k_1} + \overline{I} e^{-k_2 t} \qquad (\overline{I} \in \mathbb{R}) \tag{2.8}$$

Így megkaptuk a megoldásfüggvényt, ahol a kezdeti feltételnek megfelelően

$$\overline{I} = -\frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{(k_2 - k_1)}. \tag{2.9}$$

A (2.9) kifejezést beillesztve a (2.8)-ba megkapjuk az inhomogén differenciálegyenlet végső megoldását.

$$[\mathrm{B}] = \frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{(k_2 - k_1)} e^{-k_1} - \frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{(k_2 - k_1)} e^{-k_2 t} = \frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{(k_2 - k_1)} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) \tag{2.10}$$

A C anyagfajta koncentrációja az anyagmennyiség megmaradása alapján kifejezhető az $[\mathrm{A}]+[\mathrm{B}]+[\mathrm{C}]=[\mathrm{A}]_0$ egyenletből.

$$[\mathrm{C}] = [\mathrm{A}]_0 - [\mathrm{A}_0]\ e^{-k_1 t} - \left(\frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{(k_2 - k_1)} e^{-k_1} - \frac{k_1[\mathrm{A}]_0}{(k_2 - k_1)} e^{-k_2 t} \right)$$

Kompaktabb alakra hozva, a C anyagfajta koncentrációjának időbeli függését leíró függvény

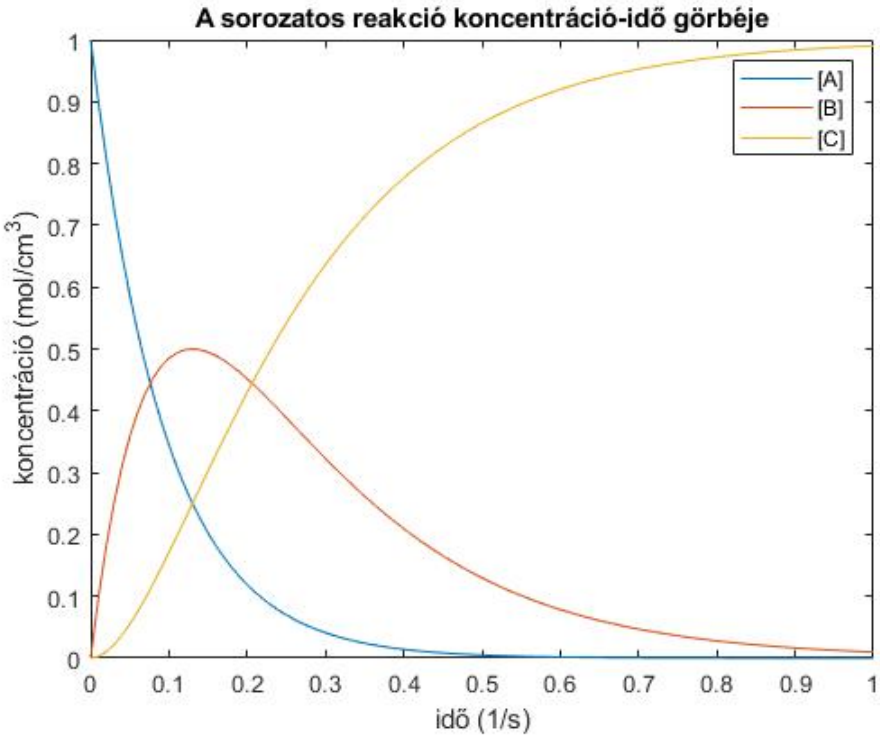
$$[\mathrm{C}] = [\mathrm{A}]_0 \left(1 - \frac{k_2}{(k_2 - k_1)} e^{-k_1 t} + \frac{k_1}{(k_2 - k_1)} e^{-k_2 t} \right). \tag{2.11}$$

Sorozatos reakció bemutatása

A glikol-diacetát képződésére felírható sorozatos reakció szemléltetése következik.

$$\mathrm{C_2H_6O_2} \xrightarrow[k_1]{\mathrm{C_2H_4O_2}} \mathrm{C_4H_8O_3} \xrightarrow[k_2]{\mathrm{C_2H_4O_2}} \mathrm{C_6H_{10}O_4}$$

Az egyes reakciólépéseket jellemző sebességi együtthatók értéke $k_1 = 10,656 \cdot 1/\mathrm{s}$ és $k_2 = 5,328 \cdot 1/\mathrm{s}$. Feltéve, hogy kezdetben az A anyagfajta volt csak jelen a rendszerben $[\mathrm{A}]_0$ mennyiségben, az egyes anyagfajták koncentrációfüggvényének felírásához alkalmazhatjuk a (2.4),(2.10) és (2.11) megoldásfüggvényeket.



2.4. Reverzibilis reakciók kinetikája

A reverzibilis vagy megfordítható reakciók mechanizmusát ugyanúgy elsőrendű példán mutatom be.

$$\mathrm{A} \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \mathrm{B}$$

Ismét felírhatóak a sebességi egyenletek a komponensekre.

$$\frac{\mathrm{d[A]}}{\mathrm{d}t} = -k_1[\mathrm{A}] + k_{-1}[\mathrm{B}] \tag{2.12}$$

$$\frac{\mathrm{d[B]}}{\mathrm{d}t} = k_1[\mathrm{A}] - k_{-1}[\mathrm{B}] \tag{2.13}$$

A megoldás során a sebességi egyenletnél vegyük figyelembe a kezdeti feltételeket, miszerint $t = 0$ időpillanatban $[\mathrm{A}]=[\mathrm{A}]_0$ és $[\mathrm{B}]_0=0$. Vegyük észre, hogy bármilyen $t > 0$ időpillanatban igaz, hogy $[\mathrm{B}]=[\mathrm{A}]_0-[\mathrm{A}]$, mivel a kezdetben található $[\mathrm{A}]_0$ anyagmennyiség vagy A anyagként marad meg, vagy B anyaggá alakul át. Ezt felhasználva az (2.12) egyenletünkben a következőt kapjuk.

$$\frac{\mathrm{d[A]}}{\mathrm{d}t} = -k_1[\mathrm{A}] + k_{-1}([\mathrm{A}]_0 - [\mathrm{A}])$$

Ezzel a helyettesítéssel kaptunk egy elsőrendű inhomogén differenciálegyenletet. A megoldás előtt rendezzük át a differenciálegyenletet.

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = -(k_1 + k_{-1})[\mathrm{A}] + k_{-1}[\mathrm{A}]_0$$

Ezután az egyenlet jobb oldalán található $(k_{-1}[\mathrm{A}]_0)$ tagot bővítjük $(k_1 + k_{-1})$ taggal. Így már kiemelhető $-(k_1 + k_{-1})$ és alkalmazhatjuk a szeparábilis differenciálegyenletek megoldási módszerét.

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = -(k_1 + k_{-1})\left([\mathrm{A}] - \frac{k_{-1}}{k_1 + k_{-1}}[\mathrm{A}]_0\right)$$

$$\int \frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{[\mathrm{A}] - \frac{k_{-1}}{k_1+k_{-1}}[\mathrm{A}]_0} = -\int (k_1 + k_{-1})\mathrm{d}t$$

A bal oldalon egy $\int \frac{f'}{f}$ alakú integrál szerepel, a jobb oldalon pedig a változó szempontjából egy konstans található.

$$\ln\left([\mathrm{A}] - \frac{k_{-1}}{k_1 + k_{-1}}[\mathrm{A}]_0\right) = -(k_1 + k_{-1})t + I \qquad (I \in \mathbb{R}) \tag{2.14}$$

Fejezzük ki [A]-t.

$$[\mathrm{A}] = e^{-(k_1+k_{-1})t} \cdot \overline{I} + \frac{k_{-1}}{k_1 + k_{-1}}[\mathrm{A}]_0 \tag{2.15}$$

Az I integrációs állandót kifejezhetjük a (2.14) egyenletből a kezdeti feltételek felhasználásával ([A](0)=$[\mathrm{A}]_0$ és [B](0)=0).

$$I = \ln\left([\mathrm{A}]_0 - \frac{k_{-1}}{k_1 + k_{-1}}[\mathrm{A}]_0\right)$$

Amelyből $\overline{I}$ az I exponenciálisát véve megkapható.

$$\overline{I} = [\mathrm{A}]_0 - \frac{k_{-1}}{k_1 + k_{-1}}[\mathrm{A}]_0$$

Az $\overline{I}$ állandót behelyettesítve a(2.15) egyenletbe megkapjuk a partikuláris megoldást.

$$[\mathrm{A}] = e^{-(k_1+k_{-1})t}\left([\mathrm{A}]_0 - \frac{k_{-1}}{k_1 + k_{-1}}[\mathrm{A}]_0\right) + [\mathrm{A}]_0\frac{k_{-1}}{k_1 + k_{-1}}$$

Látszik, hogy a jobb oldalon kiemelhető $[A]_0$.

$$[\mathrm{A}] = [\mathrm{A}]_0 e^{-(k_1+k_{-1})t}\left(1 - \frac{k_{-1}}{k_1 + k_{-1}}\right) + [\mathrm{A}]_0\frac{k_{-1}}{k_1 + k_{-1}}$$

Az $\left(1 - \frac{k_{-1}}{k_1+k_{-1}}\right)$ tagot közös nevezőre hozom és átírom az egyenletben.

$$[\mathrm{A}] = [\mathrm{A}]_0 e^{-(k_1+k_{-1})t} \frac{k_1}{k_1+k_{-1}} + [\mathrm{A}]_0 \frac{k_{-1}}{k_1+k_{-1}} \tag{2.16}$$

Megint kiemelve, a megoldás egy másik alakjára jutunk.

$$[\mathrm{A}] = \frac{[\mathrm{A}]_0}{k_1+k_{-1}} (k_1 e^{-(k_1+k_{-1})t} + k_{-1}) \tag{2.17}$$

A B anyagfajta koncentrációjának meghatározásához felhasználjuk a már bevezetett $[\mathrm{B}]=[\mathrm{A}]_0-[\mathrm{A}]$ összefüggést.

$$[\mathrm{B}] = [\mathrm{A}]_0 - \frac{[\mathrm{A}]_0}{k_1+k_{-1}} (k_1 e^{-(k_1+k_{-1})t} + k_{-1}) = [\mathrm{A}]_0 \left(1 - \frac{k_1}{k_1+k_{-1}} e^{-(k_1+k_{-1})t} - \frac{k_{-1}}{k_1+k_{-1}}\right)$$

Közös nevezőre hozás és kiemelés után.

$$[\mathrm{B}] = [\mathrm{A}]_0 \frac{k_1}{k_1+k_{-1}} \left(1 - e^{-(k_1+k_{-1})t}\right) \tag{2.18}$$

Ezt is hozhatjuk a (2.16)-hoz hasonló formára, amelyen látszik, hogy amennyivel növekszik az A komponens koncentrációja, ugyanannyival csökken a B komponensé, és fordítva.

$$[\mathrm{B}] = [\mathrm{A}]_0 \frac{k_1}{k_1+k_{-1}} - [\mathrm{A}]_0 \frac{k_1}{k_1+k_{-1}} e^{-(k_1+k_{-1})t}$$

Ezt a levezetést olyan feltétel mellett végeztük el, hogy a reakció elején csak az A komponens van jelen a reakcióelegyben. Ez azonban nem túl életszerű. Tekintsük a korábban vizsgált differenciálegyenlet-rendszert olyan kezdeti feltételek mellett, hogy $[\mathrm{A}](0) = [\mathrm{A}]_0 > 0$ és $[\mathrm{B}](0) = [\mathrm{B}]_0 > 0$. A sztöchiometria értelmében fennáll az $[\mathrm{A}] + [\mathrm{B}] = [\mathrm{A}]_0 + [\mathrm{B}]_0$ egyenlőség. Ebből kiejezhető, hogy a B komponens koncentrációja $[\mathrm{B}] = [\mathrm{A}]_0 + [\mathrm{B}]_0 - [\mathrm{A}]$. Ezt felhasználva írjuk át a sebességi egyenletben $[\mathrm{A}]_0$ helyére $[\mathrm{A}]_0 + [\mathrm{B}]_0$ kifejezést.

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = -k_1[\mathrm{A}] + k_{-1}([\mathrm{A}]_0 + [\mathrm{B}]_0 - [\mathrm{A}])$$

A feladat partikuláris megoldásához ugyanazt a mechanizmust kell alkalmazni, mint a $[\mathrm{B}]_0=0$ kezdeti feltételű egyenlet megoldása során. Az $[\mathrm{A}]_0 = [\mathrm{A}]_0 + [\mathrm{B}]_0$ és $[\mathrm{A}]=[\mathrm{A}]_0$ helyettesítéssel az integrálást elvégezve

$$\ln\left([\mathrm{A}] - \frac{k_{-1}}{k_1+k_{-1}}([\mathrm{A}]_0 + [\mathrm{B}]_0)\right) = -(k_1+k_{-1})t + I$$

egyenletet kapjuk, ahol az állandó értéke a kezdeti feltételek alapján

$$I = \ln\left([\mathrm{A}]_0 - \frac{k_{-1}}{k_1+k_{-1}}([\mathrm{A}]_0 + [\mathrm{B}]_0)\right).$$

Ugyanazon átalakításokat elvégezve a következő partikuláris megoldáshoz jutunk.

$$[\mathrm{A}] = e^{-(k_1+k_{-1})t}[\mathrm{A}]_0 - \frac{k_{-1}}{k_1+k_{-1}}([\mathrm{A}]_0+[\mathrm{B}]_0)e^{-(k_1+k_{-1})t} + \frac{k_{-1}}{k_1+k_{-1}}([\mathrm{A}]_0+[\mathrm{B}]_0)$$

Az eredmény kompaktabb alakra hozva.

$$[\mathrm{A}] = \frac{k_{-1}}{k_1+k_{-1}}([\mathrm{A}]_0+[\mathrm{B}]_0) + \frac{k_1[\mathrm{A}]_0 - k_{-1}[\mathrm{B}]_0}{k_1+k_{-1}}e^{-(k_1+k_{-1})t}$$

Tudjuk, hogy $[\mathrm{A}] + [\mathrm{B}] = [\mathrm{A}]_0 + [\mathrm{B}]_0$. Ebből [B]-t kifejezve $[\mathrm{B}] = [\mathrm{A}]_0 + [\mathrm{B}]_0 - [\mathrm{A}]$. Ezt az összefüggést felhasználva B anyagfajta koncentrációja könnyedén megállapítható.

$$[\mathrm{B}] = \frac{k_1}{k_1+k_{-1}}([\mathrm{A}]_0+[\mathrm{B}]_0) + \frac{k_1[\mathrm{A}]_0 - k_{-1}[\mathrm{B}]_0}{k_1+k_{-1}}e^{-(k_1+k_{-1})t}$$

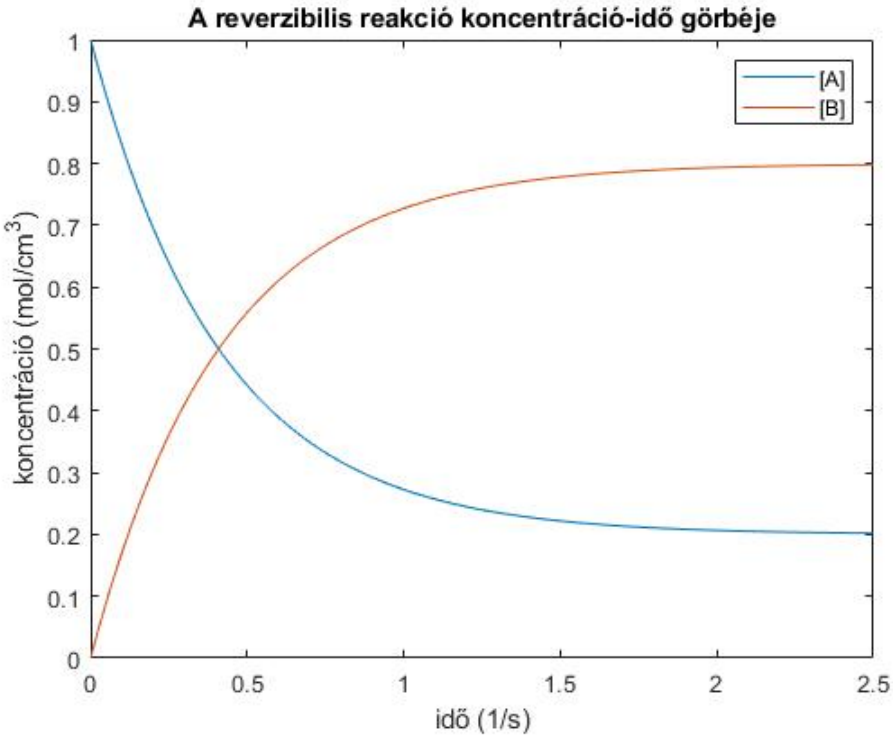
Reverzibilis reakció bemutatása

Tekintsük a következő egyensúlyra vezető reakciót.

$$\mathrm{C_2H_4O_2} + \mathrm{C_2H_6O} \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \mathrm{C_4H_8O_2} + \mathrm{H_2O}$$

Az egyes reakciólépések sebességi együtthatója $k_1 = 1,92 \cdot 1/\mathrm{s}$ és $k_{-1} = 0,48 \cdot 1/\mathrm{s}$. Jelölje [A](t) a $\mathrm{C_2H_4O_2} + \mathrm{C_2H_6O}$ anyagfajták koncentrációjának összegét és [B](t) a $\mathrm{C_4H_8O_2} + \mathrm{H_2O}$ anyagfajták koncentrációjának összegét a reakció kezdetétől számított t-edik időpontban. Az [A](0)=1 mol/cm^3, [B](0)=0 mol/cm^3 kiindulási feltételeket felhasználva a (2.17) és (2.18) megoldásfüggvények segítségével megkapjuk a egyes anyagfajták koncentrációját.

A folyamatot ábrázoló idő-koncentráció függvényeken látszik, ahogy az idő előrehaladtával a rendszer beáll az egyensúlyi állapotra.



2.5. Az elsőrendű reakciólépésekből álló reakciómechanizmusok megoldása

Tegyük fel, hogy egy mechanizmusban csak elsőrendű elemi lépések szerepelnek, ekkor a mechanizmusnak mindig létezik zárt alakú megoldása. Ez a megoldás felírható exponenciális függvények lineáris kombinációjaként. Az analitikus megoldás előállításához kétféle módszert ismertetünk.

1. Operátor számítás.

   A Laplace-transzformáció segítségével az állandó együtthatós lineáris differenciálegyenletet át lehet alakítani egy lineáris algebrai egyenletté. A Laplace-transzformáció az időfüggő $c(t)$ függvényből állít elő egy $C(s)$ s-től függő függvényt a következő módon.

   $$C(s) = \int_0^\infty c(t)e^{-st}dt$$

   A mechanizmusban szereplő összes differenciálegyenletre alkalmazva ezt a transzformációt megkapjuk a lineáris algebrai egyenletrendszert. Mivel a lineáris algebrai egyenletek Laplace-transzformációkat tartalmaznak, ezért a megoldását az $F(t)$ függvények fogják

meghatározni. Ebben az esetben úgynevezett inverz Laplace-transzformációt kell végrehajtani. Ez egy eléggé összetett művelet, ezért ehhez szimbolikus számításokat elvégző programcsomagokat használnak, mint például a Maple programcsomag.

2. Mátrix és vektor tulajdonságok kihasználása

   Ebben az esetben is lineáris algebrai egyenletrendszer adja a megoldást, amely ugyancsak exponenciális függvények lineáris kombinációjaként áll elő. Nézzük meg ezt a sorozatos reakció példáján, ahol két elsőrendű lépés szerepel.

$$\mathrm{A} \xrightarrow{k_1} \mathrm{B} \xrightarrow{k_2} \mathrm{C}$$

   Az ehhez tartozó sebességi egyenleteket

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} &= -k_1[\mathrm{A}] \\
\frac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t} &= k_1[\mathrm{A}] - k_2[\mathrm{B}] \\
\frac{\mathrm{d}[\mathrm{C}]}{\mathrm{d}t} &= k_2[\mathrm{B}]
\end{aligned}$$

   Az egyenletrendszert az alábbi mátrix műveletekkel írhatjuk le.

$$\left(\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t}, \frac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t}, \frac{\mathrm{d}[\mathrm{C}]}{\mathrm{d}t}\right) = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & 0 \\ 0 & -k_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [\mathrm{A}] \\ [\mathrm{B}] \\ [\mathrm{C}] \end{pmatrix}$$

   Ezzel az átalakítással a bal oldalon kaptunk egy sorvektort, melyben a koncentrációk időszerinti deriváltjai szerepelnek, a jobb oldalon pedig egy kinetikai mátrix és egy oszlopvektor szorzata található. A kinetikai mátrix a differenciálegyenlet-rendszer együtthatóit tartalmazza, az oszlopvektorban pedig a koncentrációkat találjuk meg. Ezt felírva általánosítva

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\underline{c} = \mathbf{K}\ \underline{c},$$

   ahol a bal oldalon az n elemű kocentrációvektor deriváltja található, a jobb oldalon pedig egy $n \times n$-es $\mathbf{K}$ mátrix és a $\underline{c}$ koncentrációvektor szorzata található. Ha megoldjuk a

$$(\mathbf{K} - \lambda\mathbf{I})\underline{r} = 0$$

   egyenletet, megkapjuk a $\mathbf{K}$ mátrix sajátvektorait és sajátértékeit. Tehát a differenciálegyenlet általános megoldásai

$$\underline{x_i} = \underline{r_i} e^{\lambda_i t}$$

alakban keresendőek. Akkor kaptuk meg a differenciálegyenlet-rendszer partikuláris megoldását, ha az egyenlet kielégíti a $c(t = 0)$ kezdeti feltételt is. Ezen megoldási mód is bonyolult számításokhoz vezet, melyet ugyancsak szimbolikus programcsomagokkal lehet könnyedén kiszámolni.

Mindkét módszer nagyon hatékony, de vannak olyan bonyolultabb reakciómechanizmusok, melyeknél a szimbolikus programcsomagok sem vezetnek egyértelmű eredményre. Ha nem csak elsőrendű lépéseket tartalmaz a mechanizmus, akkor előfordulhat, hogy nem létezik analitikus megoldása. Ebben az esetben közelítő megoldást lehet keresni numerikus módszerek segítségével.

3. fejezet

A radioaktív bomlás

A radioaktív bomlás című fejezet kidolgozása során sok irodalom, jegyzet és előadás volt a segítségemre. A törvényhez és definíciókhoz leginkább a [13] [14] és [15] számú irodalom szolgált forrásul, de sok információt és érdekességet használtam fel a [16] [17] és [18] szám alatt található irodalomjegyzékekből is. A radioaktív bomlási törvény alkalmazására bemutatott példa a [19] számmal ellátott példatárban is megtalálható.

3.1. Bevezetés

3.1.1. Definíció. (Radioakivitás) Olyan magfizikai folyamatot, amely során nagy tömegszámú atommagok más atommagokká válnak, bomlásnak nevezzük. A bomlás során tehát egy nagy tömegű atommag más atommagokká "alakul át". A folyamatot radioaktív sugárzás kíséri.

3.1.2. Definíció. (Izotóp) Izotópoknak nevezzük azokat a kémiai elemeket, amelyek atommagjai azonos számú protonból, de eltérő számú neutronból épülnek fel, ezáltal a tömegszámban eltérő a kiindulási anyagtól.

3.1.3. Definíció. (Felezési idő) A bomlások "sebességét", vagy gyorsaságát felezési idővel mérjük. A felezési idő adja meg azt az időtartamot, ami alatt az atommagok fele elbomlik. Jele: $T_{\frac{1}{2}}$

3.1.4. Definíció. (Atommagok száma) A radioaktív bomlásnál a kezdeti atommagok számát N_0-nal, és a t idő eltelte után még bomlatlan atommagok számát N-nel jelöljük. Dimenziómentes mennyiség.

3.1.5. Definíció. (Bomlási aktivitás) A radioaktív atommagok időegység alatt bekövetkező bomlásának száma. Definíció alapján a dimenziója 1/s, amely megegyezik 1Bq-rel. Az aktivitás jele A.

3.1.6. Definíció. (Arányossági tényező) Bomlási folyamatokra bevezetett bomlási állandó, melyet λ-val jelölünk. Arányosságot ír le a bomlási sebesség és a radioaktív részecskék száma között.

A radioaktivitást 1896-ban Henri Becquerel francia tudós fedezte fel az uránnal való kísérletezés közben. Kimutatta, hogy a sugárzás intenzitása arányos a koncentrációval, így arra következtetett, hogy ez a sugárzás az uránatom tulajdonsága. Azonban Pierre és Marie Curie új, sugárzó elemek után kutatva fedezték fel, hogy a tórium is sugároz. Az uránércből kivontak még két erősebben sugárzó elemet, a polóniumot és a rádiumot. A több mint 3000 izotóp között csak 265 stabil izotóp van, az összes többi radioaktív. A Curie házaspár és Ernest Rutherford kísérletei a radioaktív sugárzásnak két összetevőjét mutatta ki. A nagyon rövid hatótávolságú alfa-sugárzást és a béta-sugárzást. 1900-ban fedezte fel Paul Ulrich Villard a gamma-sugárzást. Később bebizonyították, hogy a gamma-sugárzás valójában nagyenergiájú elektromágneses sugárzás.
A radioaktivitás instabil atommagok bomlásának folyamatát jelenti. A bomlási folyamatra felírható egy differenciálegyenlet, amely megadja a t-edik időpontban az aktuális atommagok számát. A radioaktív bomlás az atomok nukleáris átalakulása, melyet elektromágneses sugárzás, vagy részecske kibocsátás kísér. A radioaktív instabil izotópok bomlásának leírására alkalmazhatjuk a következő modellt.

$$A = -\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}$$

Tehát arányosság lelhető fel a bomlási sebesség és a radioaktív részecskék száma között. Ezt az arányosságot λ arányossági tényezővel lehet kifejezni.

$$-\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = \lambda N$$

3.2. A bomlási törvény

Az időegységenként széteső atomok számára a következő differenciálegyenletet írhatjuk fel λ bomlási állandó segítségével.

$$-\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = \lambda N \Rightarrow \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} + \lambda N = 0$$

Ezáltal átrendezéssel kaptunk egy szeparábilis differenciálegyenletet

$$\frac{\mathrm{d}N}{N} = -\lambda \mathrm{d}t,$$

melyet közvetlen lehet integrálni.

$$\int \frac{1}{N}\mathrm{d}N = \int -\lambda \mathrm{d}t$$

Elvégezve az integrálást a következő eredményt kapjuk

$$\ln N = -\lambda t + C \qquad (C \in \mathbb{R})$$

Az egyenlet exponenciálisát véve

$$N = e^{-\lambda t} \cdot K \qquad (K \in \mathrm{R})$$

A kezdeti feltételt felhasználva, miszerint $N(0) = N_0$ megkapható, hogy a K intgrációs konstans értéke $K = N_0$. Ezáltal megkapjuk a bomlási törvényt, amely megadja, hogy adott mennyiségű kiindulási anyagból t idő elteltével mennyi marad bomlatlan.

$$N = N_0\ e^{-\lambda t}$$

A felezési időt behelyettesítjük a bomlási törvénybe ($t = T_{\frac{1}{2}}$). A felezési idő elteltével az anyag fele elbomlik, tehát a másik fele megmarad. Így a megmaradt atommagok száma $N = \frac{N_0}{2}$. Ezt kihasználva

$$\frac{N_0}{2} = N_0\ e^{-\lambda T_{\frac{1}{2}}}.$$

A felezési időre az alábbi összefüggést kaptuk.

$$T_{\frac{1}{2}} = -\frac{\ln \frac{1}{2}}{\lambda} = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

A λ bomlási állandó minden anyagra nézve egyedi, a felezési idő az elem minőségétől függ.

3.3. A bomlások típusai

1. Az alfa-bomlás
   Nagy tömegszámú atommagoknál következik be. A folyamat során az atommagból a hélium leggyakorobbik izotópjának a ^{4}He-nak atommagja lép ki, ezt hívják alfa részecskének. Tömegük és energiájuk miatt az alfa-részecskék csak maximum néhány centimétert tesznek meg levegőben.

2. A béta-bomlás
   Három fajta béta-bomlás létezik. A negatív béta-bomlásnál az atommagban egy neutron protonná alakul át és az eközben keletkező elektron kilép az atommagból, elektronsugárzást előidézve. A pozitív béta-bomlás során az atommagban egy proton neutronná alakul át és ennek hatására pozitron és neutrínó keletkezik. Ezt a folyamatot is elektronsugárzás kíséri. Végül az elektron-befogás, amely során egy proton az elektronburokból befog egy elektront, és így neutronná alakul át. A folyamat következtében az elektron benn marad az atommagban és egy neutrínó keletkezik. Ez a töltés nélküli részecske viszi el a maradék energiát.

3. A gamma-sugárzás
   Egy nagy áthatolóképességű és energiájú elektromágneses sugárzás. Az alfa- és/vagy béta-bomlások kísérőjelensége. Gamma-sugárzás során a gerjesztett állapotú atommag visszajut az alapállapotba gamma-fotonok sugárzásával. Sebessége a fénysebességgel megegyezik, azaz megközelítőleg 300 000 km/s a levegőben. A γ -sugár töltéssel nem rendelkezik, ezért áthatolóképessége a legnagyobb. Képes áthatolni betonfalon és több száz méter levegőn is.

3.4. Radioaktív izotópok és felhasználásaik

Létezik természetes és mesterséges eredetű sugárzás is. Az ionizáció kiváltására képes sugárzó anyagok jelen vannak a környezetünkben, az élettelen anyagokban és az élőlényekben, ezáltal az emberekben is.
A természetes eredetű sugárzás két forrása az űr és a földkéreg. A kozmikus, amely a Napból és a távoli űrből jön, illetve a földkérgi sugárzások, melyek az élet kialakulása előtt is hatottak. A természetes radioaktív anyagok kiszűrhetetlenül és állandóan jelen vannak a környezetünkben, például a talajban, az építőanyagokban, a levegőben, az élelmiszerekben, az ivóvízben és a szervezetünkben. Hihetetlennek tűnik, de minden másodpercben átlagosan 75 000 sugárzó

részecske éri a testünket. A Föld népessége természetes forrásokból évente átlagosan 2,4 mSv sugárterhelést kap.[18]

A mesterséges eredetű sugárzás a múlt század óta létezik és az emberi tevékenységnek köszönhető. Mesterséges sugárzás például a röntgensugárzás, az atomrobbanásokból visszamaradt sugárzás vagy nukleáris ipar által létrehozott sugárzás. A mesterséges forrásokból származó összes sugárterhelésünk, melynek legjelentősebb összetevője a sugárforrások orvosi alkalmazása, évente átlagosan 0,4 mSv. Érdekesség, hogy a katonai tevékenységek és a nukleáris ipar által kibocsátott radioaktív sugárzás elenyésző a természetes és az orvosi sugárzás mellett.
A természetes és mesterséges radioaktív sugárzás felhasználásai.

1. Földtörténeti és történeti korok meghatározása
   A legelterjedtebb a szénizotópos kormeghatározás, amely ^{14}C izotópot használja a széntartalmú anyagok korának meghatározására körülbelül 60 000 évre visszamenően.

2. Orvostudomány
   A legelterjedtebb a röntgensugárzás, de használatos diagnosztikai módszerként, melyben emberi szervezetbe juttatnak radioaktív anyagokat és ahogyan nyomon követik a szervezetben, fontos információkhoz jutnak az orvosok.

3. Energiatermelés
   Ez a legnagyobb alkalmazási terület. Alapja hogy az atomreaktorban a maghasadás által termelt gőz működésbe hozza a turbinákat és meghajtják a generátorokat, mellyel elektromos áram keletkezik. Legtöbbször a felhasznált anyag az urán, mellyel egységnyi anyagra számítva lényegesen nagyobb energia állítható elő, mint a hagyományos erőművekben.

4. Egyéb földtudományi alkalmazások
   Az óceánok keveredési folyamatának vizsgálata. Az atmoszférában, a hidroszférában és a litoszférában lejátszódó környezeti folyamatokat megfigyelése, mellyel a légtömegek eredetét, mozgásirányát és a felhőcseppek keletkezését tudják vizsgálni.

3.5. A bomlási törvény alkalmazása

Egy kinetikailag elsőrendű példát nézünk a kormeghatározásra. A ^{14}C izotóp segítségével kell megállapítani egy minta korát, melynek izotóp tartalma 72%-os. A ^{14}C izotóp β bomlásának felezési ideje 5720 év.

A törvény alkalmazása előtt számítsuk ki a λ arányossági tényezőt.

$$T_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{\lambda} \longrightarrow \lambda = \frac{\ln 2}{T_{\frac{1}{2}}} = \frac{\ln 2}{5730} = 1,20968 \cdot 10^{-4} \text{ év}$$

Ennek ismeretében már alkalmazható a bomlási törvény

$$N = N_0 e^{-\lambda t}$$

N és N_0 értéke nem ismert, csak a közöttük fennálló $\frac{N}{N_0}$ arány, ezért a következő alakra hozzuk

$$\frac{N}{N_0} = e^{-\lambda t} \Longrightarrow 0,72 = e^{-1,20968 \cdot 10^{-4} \cdot t}$$

Természetes alapú logaritmusát vesszük mindkét oldalnak

$$0,3285 = 1,20968 \cdot 10^{-4} \cdot t$$
$$t = 2715,6$$

Megállapítottuk tehát, hogy a minta 2715,6 éves.

4. fejezet

Lambert-Beer törvény

A Lambert-Beer törvényt, előfeltételeit és származtatását leginkább Gudrun Scholz és Fritz Scholz cikke [15], illetve Dr. Német Béla cikke [20] és a [21] [22] számú forrás alapján dolgoztam fel. A törvény alkalmazására bemutatott példák Jim Clark [23] példái közül kerültek ki.

4.1. Története

A törvényt Pierre Bouguer fedezte fel 1729-ben. Egy optikai tapasztalati összefüggést talált a közeg tulajdonságai és a fény elnyelődése között. A törvény bemutatása előtt a következő fogalmakat és mennyiségeket fogom bevezetni.

Neve	Jele	Mértékegysége
Abszorbancia	A	Dimenziómentes
Transzmittancia	T	Dimenziómentes
Abszorpciós együttható	α	1/cm
Moláris abszorpciós együttható	ε	cm^2/mol
Koncentráció	c	mol/cm^3
Részecskesűrűség	N	$1/cm^3$
Abszorpciós keresztmetszet	σ	cm^2
Úthossz	l	cm

4.1.1. Definíció. (Abszorbancia) Elektromágneses sugárzás elnyelődése anyagi közegben (gázokban, folyadékokban, vagy szilárd anyagokban). A fény hullám- vagy részecsketermészetétől függően lehet értelmezni részecskefolyamatként, vagy hullámtani modellben is. Definíció sze-

rint

$$A = -\log_k \frac{I}{I_0},$$

ahol I_0 a beeső fény intenzitása, vagy az energiája és I a már áthaladt fényé. A logaritmus alapja $k = 10$, ha a törvényt folyadékokra használjuk és $k = e$, ha gázokra.

4.1.2. Definíció. (Transzmittancia) Vagyis áteresztőképesség, amely azt mutatja meg, hogy a minta a beeső fény hanyadrészét engedi át. Értéke az 1, ha nincs fényelnyelés és a 0, ha minden fény elnyelődik. Mivel az értéke 0 és 1 között mozog, így szokás az áteresztőképességet százalékos értékben is megadni. A definíció szerint

$$T = \frac{I}{I_0}$$

Az abszorbancia és a transzmittancia közötti összefüggés

$$-\log_k T = A,$$

vagyis a transzmittancia reciprokának logaritmusa megadja az abszorbancia mértékét.

4.1.3. Definíció. (Abszorpciós együttható) Az abszorpciós együttható egy anyagi állandó, amelynek nagysága az adott atom szerkezetétől függ. Ennek nagyságát befolyásolni nem lehet.

4.1.4. Definíció. (Moláris abszorpciós együttható) A moláris abszorpciós együttható az abszorbeáló anyagon áthaladó fény, vagy elektromágneses sugárzás abszorpcióját jellemző mennyiség. Dimenziója 1/(koncentráció · hosszúság).

4.1.5. Definíció. (Koncentráció) A koncentráció egy összetételi arány egy komponens és az egész rendszer között. Jelen esetben a térfogatra eső részecskék száma.

4.1.6. Definíció. (Részecskesűrűség) Az egységnyi térfogatra jutó részecskék számát adja meg.

4.1.7. Definíció. (Abszorpciós keresztmetszet) A keresztmetszet az ütközésre merőleges kiterjedési síkon elfoglalt területet jelenti, tehát az a felület, ahol az ütközés bekövetkezik.

4.1.8. Definíció. (Úthossz) Egy távolságot jellemző mennyiség, mely a fénysugár által a közegben megtett út hosszát jelöli.

Az abszorpciós együtthatót kétféleképpen is kifejezhetjük. Felírható a moláris abszorpciós együttható és koncentráció szorzataként, valamint az abszorpciós keresztmetszet és a részecskesűrűség szorzataként is.

$$\alpha = \varepsilon \cdot c = \sigma \cdot N$$

4.2. A törvény

4.2.1. Lambert-Beer-törvény érvényességének előfeltételei

A Lambert-Beer törvény alkalmazhatóságához a következő feltételek teljesülése szükséges. Amennyiben nem az összes feltétel teljesül, hamis eredményeket kaphatunk.

1. Az abszorbeáló részecskéknek egymástól függetleneknek kell lenniük.
2. Az abszorbeáló közeg eloszlásának egyenletesnek kell lennie a vizsgált térfogatban, és nem szórhatja a fényt.
3. A beeső fénynek párhuzamos sugarakból kell állnia, és minden sugárnak ugyanakkora utat kell megtennie az elnyelő közegben.
4. A beeső fénynek lehetőleg monokromatikusnak, vagy legalábbis sokkal kisebb sávszélességűnek kell lennie, mint amekkora az abszorpciós átmenet sávszélessége.
5. A beeső fényáram nem hathat az atomokra vagy molekulákra, a vizsgálandó részecskének csak a változást nem okozó kimutatására lehet képes. A fény különösen nem okozhat optikai telítést vagy pumpálást, mivel ezek a hatások csökkentik az alacsonyabb energiaszintű állapot betöltöttségét és indukált emissziót eredményezhetnek.

4.2.2. Esetleges hibák előfordulásának oka

- Az abszorbancia és az abszorpciós együttható értéke más a folyadékokra, mint a gázokra. Ez az eltérés abból adódik, hogy az abszorbanciának két definíciója van. A folyadékokra a 10-es alapú logaritmust és a gázokra pedig az e alapú logaritmust használjuk. Ezáltal a gázok és folyadékok között $\log_e 10$-szeres eltérés van.
- Nagyon nagy koncentrációk esetén a törvény már nem pontos, különösen akkor, ha az anyag erősen szórja a fényt.
- Rendkívül intenzív fény alkalmazásakor a nemlineáris optikai folyamatok is okozhatnak eltéréseket.

4.2.3. A Lambert-Beer törvény levezetése

Tegyük fel, hogy teljesülnek a korábban leírt fizikai és kémiai feltételek. Ekkor a Lambert-Beer törvény folyadékokra

$$T = \frac{I}{I_0} = 10^{-\alpha l} = 10^{-\varepsilon c l},$$

valamint gázokra

$$T = \frac{I}{I_0} = e^{-\alpha' l} = e^{-\sigma N l}.$$

Az abszorbancia és a transzmittancia közötti kapcsolatot felhasználva folyadékokra (A) és gázokra (A')

$$A = -log_{10}\left(\frac{I}{I_0}\right) = -log_{10}T,$$

$$A' = -\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = -\ln T$$

Tehát észrevehetjük, hogy az abszorbancia és a koncentráció között egyenes arányosság van:

$$A = \varepsilon c l = \alpha l$$

$$A' = \sigma N l = \alpha' l$$

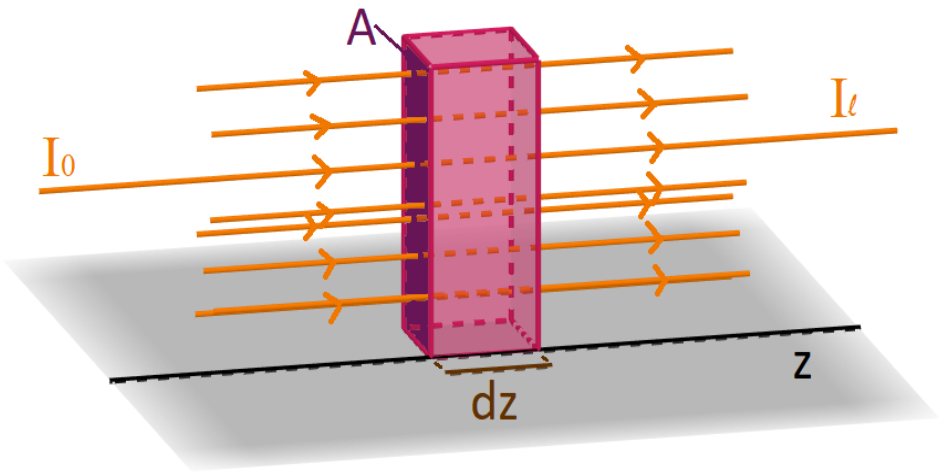
Koncentráció meghatározása
A első egyenletet átrendezve látható, hogy ha ismert az úthossz és a moláris abszorbancia, és mérjük az abszorbanciát, akkor az anyag koncentrációja meghatározható a következő módon:

$$c = \frac{A}{\varepsilon l}$$

Az abszorbanciát az abszorpciós spektroszkópia segítségével lehet mérni. A mérés során a vizsgált közeg a fényforrás és a spektroszkóp között helyezkedik el. A fényforrás hullámhosszát folyamatos hangolás során figyelve az áthaladó fény gyengülését megállapítható az abszorbancia mértéke.

4.3. A Lambert-Beer törvény származtatása

Legyen z a fény fotonjainak haladási irányával párhuzamos tengely, A a felület, amelyen a fény belép a közegbe és dz az a közeg vastagsága, amelyen a fény áthalad. Feltesszük, hogy a



4.1. ábra. A fénysugarak áthaladása a dz vastagságú közegen

részecskék leírhatók a közegen áthaladó fény útjára merőleges σ abszorpciós keresztmetszettel, melyben a foton elnyelődik, ha nekimegy a részecskének, és továbbhalad, ha nem találja el. A részecskék számát pedig jelölje N. Ebből következik, hogy az ebben a térrészben elnyelődő fotonok aránya megegyezik az itt található részecskék $\sigma \cdot A \cdot N \cdot dz$ felületének és a térrész A felületének hányadosával, leegyszerüsítve $\sigma \cdot N \cdot dz$-vel.

Az elnyelt fotonok számát dI_z-vel, a térrészbe eső összes foton mennyiségét Iz-vel jelölve, az elnyelt fotonok arányára felírható, hogy:

$$\frac{dI_z}{I_z} = -\sigma N dz.$$

Így tehát kaptunk egy differenciálegyenletet, amelyet mindkét oldalon integrálunk és megkapjuk z függvényében I_z-t:

$$\ln(I_z) = -\sigma N z + C.$$

A fényintenzitás különbsége valós l vastagságú réteg esetén $z = 0$-nál $I_0, z = l$-nél I_l. A fenti egyenletbe behelyettesítve az intenzitások különbsége:

$$\ln(I_0) - \ln(I_l) = (-\sigma 0 N + C) - (-\sigma l N + C) = \sigma l N,$$

melyet átrendezve és a logaritmus tulajdonságait felhasználva

$$T = \frac{I_l}{I_0} = e^{-\sigma l N} = e^{-\alpha l}.$$

Így a következő összefüggéseket kapjuk:

$$A' = -\ln\left(\frac{I_l}{I_0}\right) = \alpha' l = \sigma l N$$

$$A = -\log_{10}\left(\frac{I_l}{I_0}\right) = \frac{\alpha' l}{\ln 10} = \alpha l = \varepsilon l c$$

Ez azonban csak akkor érvényes, ha minden abszorbeáló részecske egymástól függetlenül lép kölcsönhatásba a fénnyel. Ez abban az esetben nem fog teljesülni, ha a részecskék hatnak egymásra, mert ugyanazon fényútban helyezkednek el, így némelyik részecske más részecskék árnyékában található.

Híg oldaltok esetében megfelelő a pontosság, de a koncentráció növelésével egyre nagyobb lesz az eltérés. Az abszorbancia és a fényelnyelő anyag oldatbeli koncentrációja között jó közelítéssel lineáris kapcsolat van. Nagyobb abszorbanciáknál a koncentrációt alulbecsüljük. Ez kiküszöbölhető, ha az abszorbancia és a koncentráció között nem lineáris összefüggést használunk.

4.4. A törvény alkalmazása atomabszorpciós kísérletek során

1. Koncentráció meghatározása.

   Egy nukleinsavnak, a guanozinnak, abszorpciója során ismertek a következő adatok, ahol az abszorpció mértéke spektrofotométerrel lett megállapítva.

Neve	Jele	Értéke	Mértékegysége
Abszorpció	A	0,70	Dimenziómentes
Moláris abszorpciós együttható	ε	8400	$\mathrm{cm}^2/\mathrm{mol}$
Úthossz	l	1	cm

   A koncentráció megállapításához az

$$A = \varepsilon c l \Longrightarrow c = \frac{A}{\varepsilon l}$$

   képletet használjuk. Behelyettesítve az értékeket

$$0,70 = 8400\ \mathrm{cm}^2/\mathrm{mol}\ \cdot c \cdot 1\ \mathrm{cm} \Longrightarrow c = \frac{0,70}{8400\ \mathrm{cm}^2/\mathrm{mol} \cdot 1\ \mathrm{cm}} = 8,33 \cdot 10^{-5}\ \mathrm{mol/cm}^3$$

   Tehát ismerve a moláris abszorpciós együtthatót, az optikai úthosszt és mérve az abszorbanciát megkaphatjuk a koncentrációt.

2. A moláris abszorpciós együttható meghatározása

   Tudjuk, hogy a 2 cm vastagságú közegben 4 mol/cm^3 koncentrációjú az oldat. A spektrofotométer szerint a kimenő fénysugár csak 50% -a a bemenő fénysugaraknak, melyből könnyedén megállapítható a transzmittancia.

$$T = \frac{I}{I_0} \longrightarrow T = \frac{0,50}{1} = 0,5$$

   A Lambert-Beer törvényt alkalmazva folyadékokra, kiszámíthatjuk a moláris abszorpciós együttható értékét.

$$A = -\log_{10}(T) = \varepsilon l c \longrightarrow A = -\log_{10}(0,5) = \varepsilon \cdot 2 \text{ cm} \cdot 4 \text{ mol/cm}^3$$

$$\varepsilon = \frac{-\log_{10}(0,5)}{2 \text{ cm} \cdot 4 \text{ mol/cm}^3} = 0,0376 \text{ cm}^2/\text{mol}$$

Összefoglalás

Szakdolgozatomban valós fizikai és kémiai problémák megoldására írtam fel differenciálegyenleteket. A dolgozat első fejezetében bemutatom az ezen egyenletek megoldásához szükséges legfontosabb fogalmakat, tételeket és módszereket.
A második fejezetben reakciókinetikai reakciók három lehetséges kapcsolódási típusát mutatom be. Ismertetem az egyes kapcsolódási típusokhoz tartozó differenciálegyenlet-rendszereket, valamint ezek megoldásait is. Mindhárom típus esetén eredményeimet valós példákon szemléltettem, a szükséges ábrák elkészítését a Matlab program segítségével végeztem.
Dolgozatom harmadik fejezetében a radioaktív bomlás jelenségét mutattam be. A szükséges fizikai alapfogalmak ismertetése után tárgyaltam a radioaktív bomlást leíró differenciál egyenlet megoldását, illetve a radioaktív izotópok felhasználásainak lehetőségét, melyre példát is adtam.
A negyedik fejezet a Lambert-Beer törvény bemutatásáról, levezetéséről, valamint alkalmazhatóságának feltételeiről szól. A témakört két valós, atomabszorpciós kísérlet eredményinek bemutatásával, elemzésével zártam.

Irodalomjegyzék

[1] Besenyei Ádám
A differenciálegyenletek csodálatos világa, előadás (2015)
https://abesenyei.web.elte.hu/publications/csodalatos.pdf

[2] Scharnitzky Viktor
Differenciálegyenletek, Műszaki Könyvkiaó (2001)
http://hegegy.web.elte.hu/matek/bolyai/2001%20-%20Differencialegyenletek.pdf

[3] Pfeil Tamás
ELTE Differenciálegyenletek előadás (2018)

[4] Valkó Éva
ELTE Differenciálegyenletek gyakorlat (2018)

[5] Kurics Tamás
Differenciálegyenletek, jegyzet (2011)
http://web.cs.elte.hu/~kuricst/bboard/notes/foldtuddiff_ea.pdf

[6] Szaszkó-Bogár Viktor
Közönséges Differenciálegyenletek, jegyzet (2013)
http://www.staff.u-szeged.hu/~vszaszko/ODE%2020130902.pdf

[7] Hartung Ferenc
Differenciálegyenletek, jegyzet (2006)
https://math.uni-pannon.hu/~hartung/okt/ma1222i/de1.pdf

[8] Vajda István
Differenciálegyenletek, jegyzet
http://uni-obuda.hu/users/vajda/diffegyenlet.pdf

[9] Simon L. Péter és Tóth János
Differenciálegyenletek-Bevezetés az elméletbe és az alkalmazásokba (2005)
Typotex kiadó

[10] Keszei Enikő
A reakciókinetika alapjai, egyetemi tankönyv (2016)
http://keszei.chem.elte.hu/fizkem2/KinetikaJegyzetToredek.pdf

[11] Turányi Tamás
Reakciókinetika, előadás
http://garfield.chem.elte.hu/Turanyi/oktatas/fizkem_csomag/TT9_reakciokinetika.pdf

[12] Dr. Karácsonyi Rezső
Fizikai-kémiai példatár (1977)

[13] ELTE Atomfizikai Tanszék
Az alfa- béta- és gammasugárzás, előadás (2011)
http://atomfizika.elte.hu/magfiz/mrf/vgmrf7_alfagamma.pdf

[14] Dr. Rácz Ervin
Radioaktivitás, jegyzet
http://uni-obuda.hu/users/racz.ervin/Radioaktivitas_Fuzio_Reszecskefizika.pdf

[15] Scholz G., Scholz F.
First-order differential equations in chemistry. ChemTexts 1,1 (2014)
https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/s40828-014-0001-x.pdf

[16] M. Nagy Noémi és Kónya József
Környezeti radioaktivitás (2019). MAGYAR KÉMIAI FOLYÓIRAT - KÉMIAI KÖZLEMÉNYEK (1997-), 125(2). pp. 75-82.
http://real.mtak.hu/93110/1/MKF_2019_2_75.pdf

[17] MVM Paksi Atomerőmű Zrt.
A természetes radioaktív sugárzás
http://www.atomeromu.hu/hu/Rolunk/Technika/Atomtortenelem/Documents/Termeszetes_reaktorok.pdf

[18] MVM Paksi Atomerőmű Zrt.
Sugáregészségügyi ismeretek
http://www.atomeromu.hu/hu/Documents/Sugaregeszsegugyi_ismeretek.pdf

[19] Fizikai kémia II. példatár-Reakciókinetika I.
http://web.unideb.hu/uh9v32/peldatar/p2_f86-f114.pdf

[20] Dr. Német Béla
A szabad atomok fényelnyelése. Lambert-Beer törvény (2010)
http://www.physics.ttk.pte.hu/pages/munkatarsak/nemetb/Spektr-Lab-Elm-4-Beer-Lambert-torveny.pdf

[21] Abszorpciós koefficiens
http://www.vilaglex.hu/Fizika/Html/AbszKoef.htm

[22] Dr. Posta József
Digitális Tankönyvtár - Atomabszorpciós spektrometria
https://regi.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tkt/atomabszorpcios/ch03s02.html

[23] Jim Clark
The Beer-Lambert Law, jegyzet
https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Spectroscopy/Electronic_Spectroscopy/Electronic_Spectroscopy_Basics/The_Beer-Lambert_Law