

2.7. Megjegyzés. A definíció más szavakkal azt jelenti, hogy minden kémiai komponens pontosan egy komplexben szerepel, és minden komplex tartója legfeljebb egyelemű, azaz legfeljebb egy kémiai komponenst tartalmaz. Egy általánosított rekeszrendszerben tehát az alábbi típusú elemi reakciók fordulnak elő:

$$(2.12) \quad \eta^m \mathcal{X}(m) \longrightarrow \eta^p \mathcal{X}(p),$$

$$(2.13) \quad \eta^m \mathcal{X}(m) \longrightarrow \mathcal{O}$$

$$(2.14) \quad \mathcal{O} \longrightarrow \eta^m \mathcal{X}(m),$$

ahol $\eta^p, \eta^m \in \mathbb{N}$.

2.8. Megjegyzések. (i) Egy rekeszrendszer egyúttal általánosított rekeszrendszer is, és ha zárt, akkor mindkét értelemben is zárt, ezért sok szempontból elegendő csak általánosított rekeszrendszerekkel foglalkoznunk, bár az alkalmazásokból elsődlegesen a rekeszrendszer fogalma származik, lásd a [9] dolgozatban szereplő hivatkozásokat. (ii) Egy zárt általánosított rekeszrendszerben nyilván csak (2.12) típusú elemi reakciók fordulhatnak elő.

Most a rekeszrendszer fogalmának egy másik általánosítását definiáljuk.

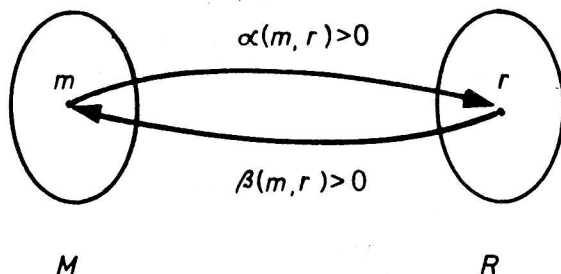
2.8. Definíció. A (2.1)-beli r -edik elemi reakció rendje a reaktáns komplex $\ell(\alpha(\cdot, r))$ hossza, egy (összetett kémiai) mechanizmus rendje pedig az elemi reakciók rendjének maximuma.

Ennek megfelelően egy összetett kémiai mechanizmust *elsőrendű mechanizmus*-nak hívunk, ha a benne szereplő összes elemi reakció rendje legfeljebb 1.

Az elsőrendű mechanizmusok és a rekeszrendszerek viszonyával kapcsolatban megemlítjük, hogy minden rekeszrendszer elsőrendű mechanizmus, de fordítva ez nem áll, amint ezt például az $\mathcal{X} \longrightarrow 2\mathcal{Y}$ mechanizmus példája mutatja. Ennek ellenére elterjedt az a szokás, hogy elsőrendű mechanizmust mondanak, és rekeszrendszerre gondolnak.

2.4. A Volpert-gráf

Mechanizmusok vizsgálatánál több gráf is igen hasznosnak bizonyult. Ezek egyikével kapcsolatos fogalmakat definiálunk most.



2. ábra. A Volpert gráf