

Az SZTE Kutatóegyetemi Kiválósági Központ tudásbázisának
kiszélesítése és hosszú távú szakmai fenntarthatóságának megalapozása
a kiváló tudományos utánpótlás biztosításával”



Eötvös Loránd Kollégium Kémia Műhely

2013. március 12.

NEMLINEÁRIS KÉMIAI DINAMIKA ALAPJAI: OSZCILLÁCIÓ, KÁOSZ, MINTÁZATOK

Tóth Ágota
Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék



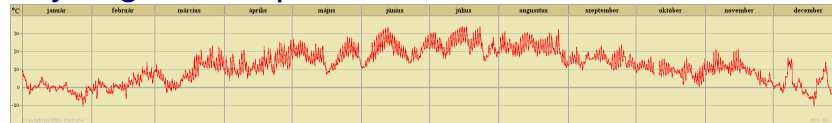
TÁMOP-4.2.2/B-10/1-2010-0012
projekt



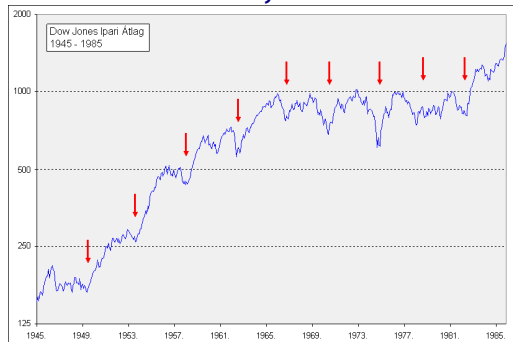
OSZCILLÁCIÓ

Oszcilláció egy mennyiség időben periodikus változása.

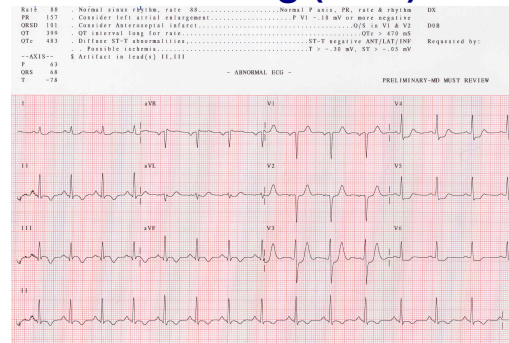
Hőmérséklet



Tőzsdeindex, termékárak



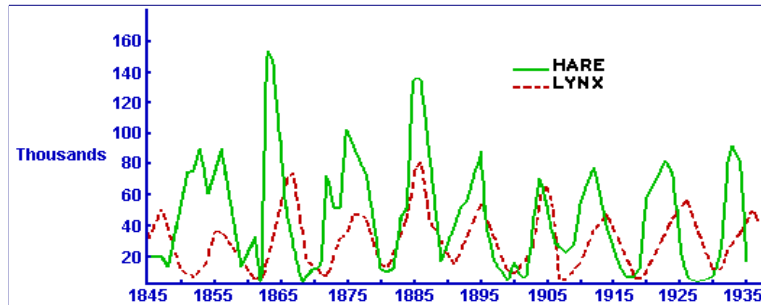
Feszültség (EKG)



Populáció

Ragadozó + zsákmány (predator-prey) modell (Lotka-Volterra modell):

fű + nyuszi $\longrightarrow$ 2 nyuszi
 nyuszi + hiúz $\longrightarrow$ 2 hiúz
 hiúz $\longrightarrow$ halott hiúz



I.R. Epstein, J.A. Pojman, Introduction to nonlinear chemical dynamics, Oxford (1998)



Kémiai összetétel: Szerves szubsztrátum bromátos oxidációja savas közegben fémion katalizátor jelenlétében.

A Belouszov-Zsabotyinszkij (BZ) reakció



B. P. Belouszov (1893-1970) A. M. Zsabotyinszkij (1938-2008)

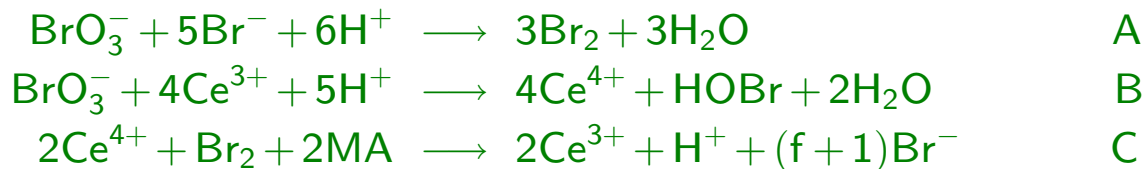
szubsztrátum citromsav, malonsav, (1,4-ciklohexándion)

katalizátor cérium[III], ferroin

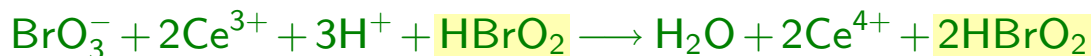
Oscillál: $[\text{Br}^-]$, $[\text{Ce}^{3+/4+}]$, $[\text{HBrO}_2]$



Mechanizmus: Field-Kőrös-Noyes (FKN) mechanizmus (1972)



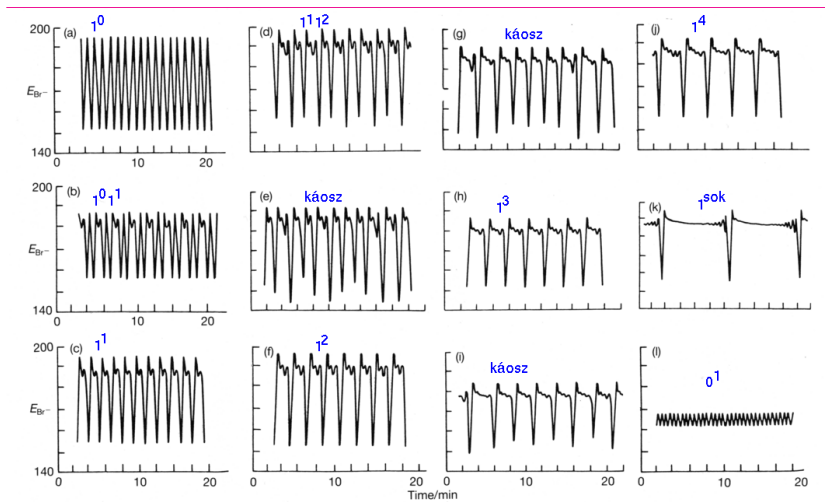
B lépés: Autokatalitikus lépés, ahol HBrO_2 az autokatalizátor, mert



Autokatalizátor: reakciótermék, mely növeli a képződésének a sebességét.

Biokémiai oszcillációk: Dr. Szalai István (ELTE) előadása március 19-én

KÁOSZ

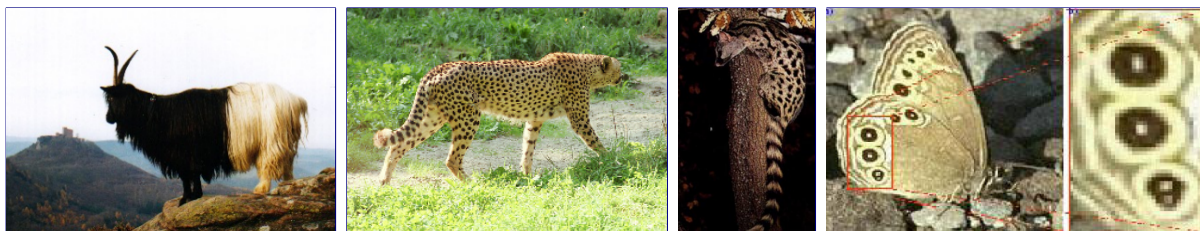


Káosz és szabályozása: Dr. Gáspár Vilmos (DE) előadása április 16-án

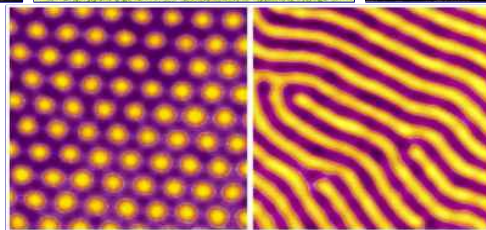
MINTÁZATOK

Koncentráció vagy annak valamilyen függvényének olyan térbeli eloszlása, amely geometria alakzatokra (mintára) hasonlít.

Időben állandó mintázatok

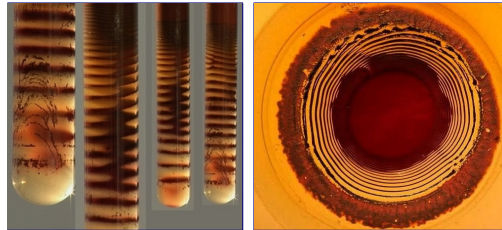


Turing mintázat

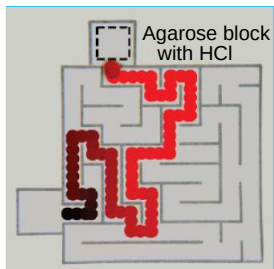
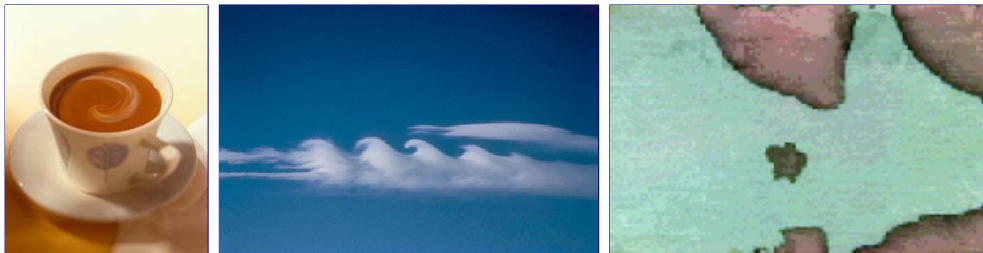


Turing mintázatok: Dr. Horváth Dezső (SZTE) előadása április 23-án

Liesegang mintázat



Időben haladó mintázatok: frontok, hullámok

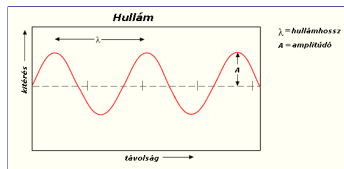


Nemlineáris dinamika és kémiai robotika:

Dr. Lagzi István László (BME) előadása április 9-én

HULLÁMOK

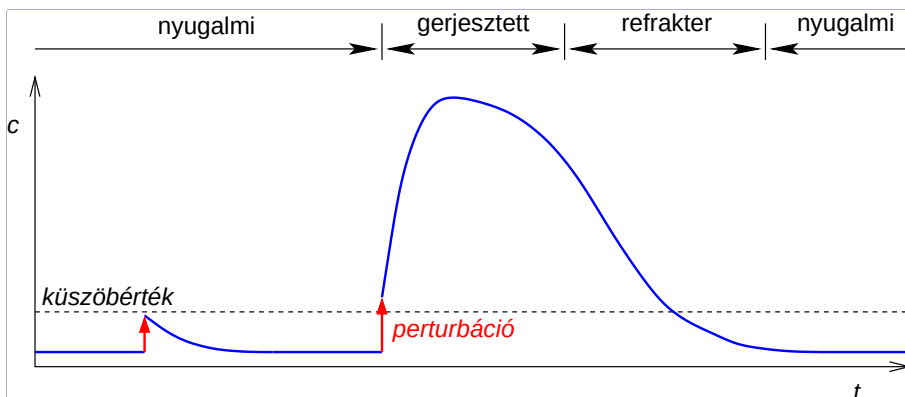
A hullám egy rendszer olyan állapotváltozása, amely időben és/vagy térben szabályosan ismétlődik. (Wikipedia)



Hullám	Térben terjedő állapotváltozó
Elektromágneses hullám	elektromos és mágneses térerő
Hanghullám	nyomás
Vízhullám	vízoszlop magassága
Kémiai hullám	összetétel

Kémiai hullám létrehozása: gerjeszthető kémiai reakció térbeli lejátszatása

Gerjeszthető rendszer: a stabil állapotból egy küszöbérték feletti perturbáció hatására kimozduló, majd oda lassan visszatérő rendszer.

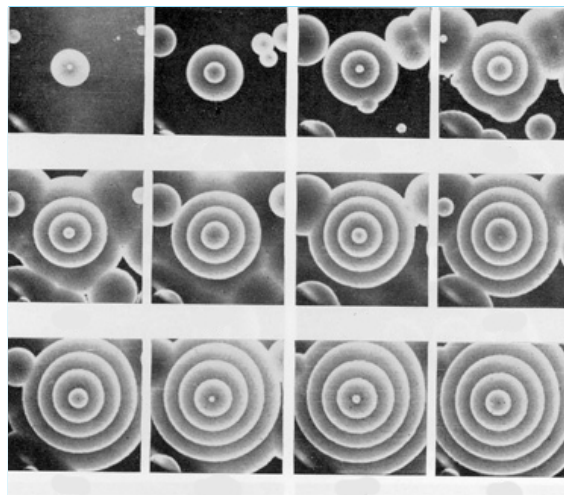


Hajtóerő: autokatalitikus reakció

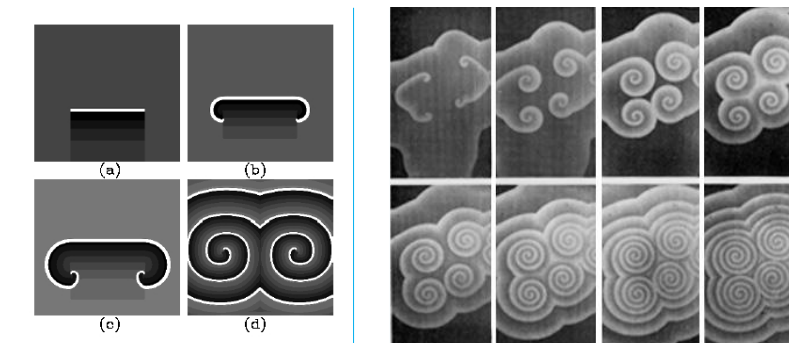
Kémiai hullám a Belouszov-Zsabotyinszkij reakcióban

Céltáblamintázat: egy pontból történő ismételt perturbáció

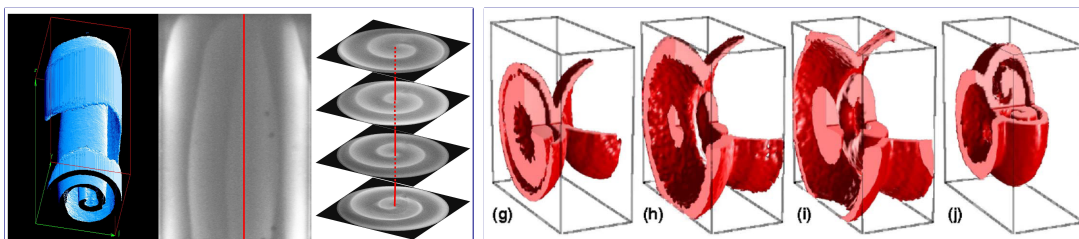
(A.N. Zaikin, A.M. Zhabotinsky, Nature 225, 535 (1970), Anatol M. Zhabotinsky (2007), Scholarpedia, 2(9):1435, video: I.R. Epstein)



Spirál és duplaspirál: megszakadt hullámszakasz feltekeredése

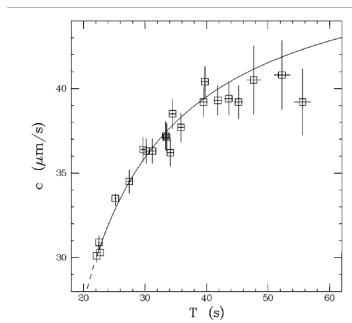


Tekercshullám: megszakadt hullámfelület feltekeredése 3D-s közegben



Kémiai hullámok jellemzői

- Állandó sebesség (tipikus értéke: 2,4 mm/min), mely függ a kémiai összetételtől: $v \propto \sqrt{[H^+][BrO_3^-]D_{HBrO_2}}$
- Periódus idő és minimális periódusidő, melynél sűrűbben nem lehet hullámokat gerjeszteni a refrakter szakasz miatt

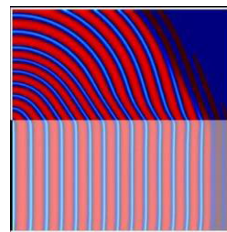
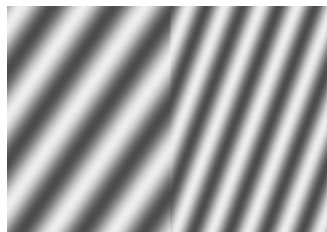


A. Belmonte, J-M. Flesselles, Phys. Rev. Lett. 77, 1174 (1996)

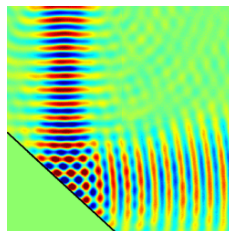
- Kritikus méret a gerjesztési küszöb miatt ($r_{kr} = D/v \rightarrow r_{kr} \sim 50\mu m$)

Klasszikus hullám Kémiai/biológiai hullám

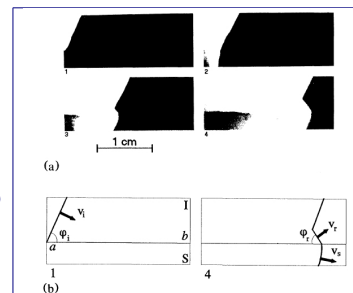
Törés



Visszaverődés



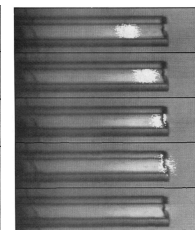
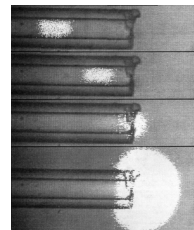
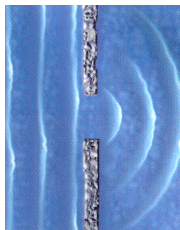
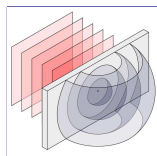
?



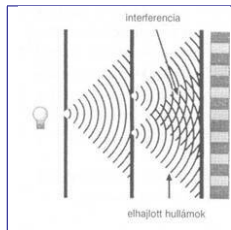
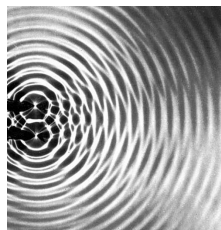
Klasszikus hullám

Kémiai/biológiai hullám

Elhajlás



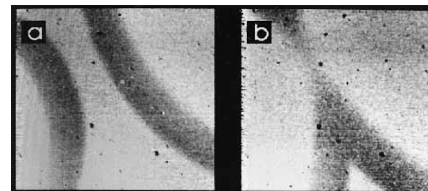
Interferencia



nincs

Annihiláció

nincs



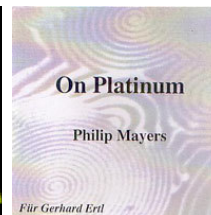
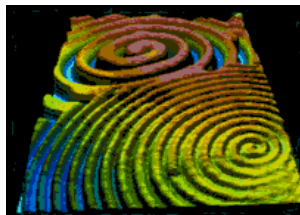
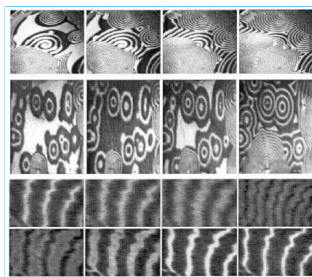
Kémiai/biológiai hullámok

Hullám heterogén katalízis során:

CO katalitikus oxidációja Pt kristályon: $\text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$

(I.G. Kevrekidis, H-H. Rotermund, G. Ertl és mtsai, Science, **264**, 80 (1994))

sötét rész: O_2 -ben gazdag felület, világos rész: CO-ban gazdag felület



Gerhard Ertl Nobel-díj 2007, tiszteletére: "On platinum" (zeneszerző: P. Mayers),

<http://www.fhi-berlin.mpg.de/surfigmag/arts.htm>

- sebesség: $2 \mu\text{m/s}$

Erdőtűz, bozótűz: hőmérséklet autokatalitikus hatása



- sebesség: 1-5 km/h
- periódusidő: 1-10 év

Mexikói hullám (La Ola):

csoportos emberi viselkedés (1986-os foci VB)

(Farkas I., Vicsek T., D. Helbing, Nature, 419, 131 (2002); Fizikai Szemle, 2003/7)

50 ezres stadionokban tapasztalt hullámok tulajdonságai:

- sebesség: 12 m/s (20 ülés/s)
- szélesség: 6-12 m (20 ülésnyi),
- kritikus méret: néhány tucat ember



Biológiai hullámok:

- **Ragályos betegségek terjedése:** rókák által terjesztett veszettség (1972 Shenandoah völgye), sebesség ~ 50 km/év
- **Ca^{2+} -hullámok:**
agy (hippocampus), megtermékenyített petesejtek
sebesség: $10\text{-}30 \mu\text{m/s}$ kritikus méret: $\sim 9 \mu\text{m}$
- **NAD(P)H és pH hullámok élő sejtben a glikolízis során**
Reakció: $\text{NAD(P)H} \longrightarrow \text{NAD(P)}^+ + 2\text{e}^- + \text{H}^+$
[NAD(P)H] és színezékekkel jelölt sejtekben a $[\text{H}^+]$ mérése fluoreszcenciával
időköz 10 ms, sejthossz $20 \mu\text{m}$, hullámsebesség: $\sim 10 \mu\text{m/s}$

"The scientist does not study nature because it is useful; he studies it because he delights in it, and he delights in it because it is beautiful.

If nature were not beautiful, it would not be worth knowing, and if nature were not worth knowing, life would not be worth living."

Henri Poincaré

"A tudós nem azért tanulmányozza a természetet, mert ez a tevékenység hasznos, hanem azért, mert örömet leli abban, hogy a természet szép. Ha nem lenne szép, nem lenne érdemes megismerni, és ha a természetet nem lenne érdemes megismerni, akkor pedig az életnek sem lenne értelme."

fordította: *Gáspár Vilmos*

Köszönöm a figyelmet!

