

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



Modeli kemijskih reakcij

5. naloga pri Modelski Analizi 1

Avtor: Marko Urbanč (28232019)
Predavatelj: prof. dr. Simon Širca
Asistent: doc. dr. Miha Mihovilovič

8.11.2023

Kazalo

1	Uvod	2
1.1	Binarna reakcija	2
1.2	Sinteza vodikovega bromida	3
2	Naloga	3
3	Opis reševanja	3
4	Rezultati	3
5	Komentarji in izboljšave	3
	Literatura	4

1 Uvod

Čeprav smo fiziki in smo na študiju fizike, ne moremo zanikati, da je tudi kemija pomembna veda. A izkaže se, da ni vedno najbolj ugodno narediti prav vsak eksperiment v živo. Zato se je razvil računalniški pristop, ki nam omogoča, da lahko simuliramo različne kemijske reakcije. Pravzaprav je pristop praktično analogen prejšnji nalogi o populacijskih modelih. No vsaj ko naredimo ustrezne približke. V resnici, če bi hoteli brez kompromisa modelirati kemijske procese, bi nas to drago stalo. To mislim dobesedno, ker če bi reševali t.i. **Chemical master equation** bi dobili sistem ODE s toliko komponent, kolikor je možnih stanj sistema. To pa je, če želimo simulirati nek makroskopski proces, zelo veliko. Zato se bomo v tej nalogi omejili na reševanje **Reaction rate** enačb, ki so približek prej omenjenih enačb. V tej nalogi bomo spoznali modeliranje kemijskih procesov na podlagi treh primerov.

1.1 Binarna reakcija

Za prvi primer si pogledjmo primer binarne reakcije. Kemijske procese lahko opišemo kot:



Rate enačbe v brezdimenzijski obliki za proces dobimo tako, da vse koncentracije normiramo z začetno koncentracijo snovi A $[A](0)$. S tem bomo lahko uvedli še nove parametre. Takole:

$$\dot{a} = \frac{1}{2}kaa^* - a^2 + \frac{1}{2}a^2 , \quad (3)$$

$$\dot{a}^* = \frac{1}{2}a^2 - \frac{1}{2}kaa^* - ska^* , \quad (4)$$

$$\dot{b} = \frac{1}{2}ska^* , \quad (5)$$

$$\dot{c} = \frac{1}{2}ska^* . \quad (6)$$

kjer je $k = \frac{p}{q}$ in $s = \frac{r}{q[A](0)}$. Odvod pa je zdaj po $d\tau = p[A](0) dt$. Lahko predpostavimo, da v ravnovesnem stanju velja $\dot{a}^* = 0$, kar nam omogoči, da izrazimo a^* in s tem dobimo nov set enačb:

$$\dot{a} = \frac{a^3}{4k(s + a/2)} - a^2 , \quad (7)$$

$$\dot{a}^* = 0 , \quad (8)$$

$$\dot{b} = \frac{sa^2}{4(s + a/2)} , \quad (9)$$

$$\dot{c} = \frac{sa^2}{4(s + a/2)} . \quad (10)$$

1.2 Sinteza vodikovega bromida

Za drugi primer pogledamo primer sinteze vodikovega bromida. Sinteza je sestavljena iz več stopnj. Te lahko zapišemo kot:



2 Naloga

3 Opis reševanja

4 Rezultati

5 Komentarji in izboljšave

Literatura