

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
2	Naloga	2
3	Opis reševanja	2
4	Rezultati	2
5	Komentarji in izboljšave	2
	Literatura	3

1 Uvod

Čeprav smo fiziki na študiju fizike, ne moremo zanikati, da je 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 populaciji. 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 unfortunately, še nismo tako daleč v razvoju, da bi bili strežniški dostopni vse, pa tudi v smislu figurativnega pomena, ker bi brez ustreznih približkov dobivali čisto napačne prepodatke.

V tej nalogi bomo spoznali modeliranje kemijskih procesov na podlagi treh primerov. V prvem primeru bomo modelirali Binarno kemijsko reakcijo, v drugi uri bomo počasi ž

2 Naloga

3 Opis reševanja

4 Rezultati

5 Komentarji in izboljšave

Literatura