



T.C. BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ

III. FİZİKSEL KİMYA GÜNLERİ KONGRE BİLDİRİLER KİTABI

20. yıl
Balıkesir Üniversitesi
1992



<http://fizikselkimya.balikesir.edu.tr>
fizikselkimya2012@balikesir.edu.tr

12-15 Temmuz 2012, Burhaniye/BALIKESİR

İki Boyutta Monte Carlo Metodu İle Karışım Simülasyonu

B22

Taner Tanrısever¹, Ayşe Bulut²¹Balıkesir Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü, aysebltt@gmail.com²Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Bölümü, taner@balikesir.edu.tr

Monte Carlo Metodu (MCM) kullanılarak geliştirilen bir program yardımı ile iki boyutlu ortamda iki türün karışım süreci simüle edilmiştir.

MCM kullanılarak istatistiksel termodinamikteki $S = k \ln W$ eşitliğine göre entropi hesabı yapılırken her bir molekülün komşu sekiz molekülü ile yer değiştirebildiği varsayılmıştır.

Simülasyon ortamı FreeBSD7.0 işletim sistemi yüklü 512 MB memory, Intel Celeron 2.26 GHz sunucu olup simülasyon dili olarak PHP 5.2.6 programlama dili kullanılmıştır.

Geliştirilen yazılım küçük matris boyutlarında ön testlerden geçirildikten sonra simülasyonlar, 40x40 boyutlarındaki matrislerde, A ve B türlerinin 3 farklı oranı (1/1), (3/1), (7/1) kullanılarak gerçekleştirilmiştir (Şekil 1).

Anahtar Kelimeler: Monte Carlo simülasyonu, karışım, entropi hesabı

