



Pamukkale Üniversitesi
Fen- Edebiyat Fakültesi
Kimya Bölümü
1994

IV. Fiziksel Kimya Kongresi
Pamukkale Üniversitesi
Denizli
2014



IV. FİZİKSEL KİMYA KONGRESİ

05-08 HAZİRAN 2014

BİLDİRİ ÖZETLERİ

Onursal Başkan

Prof.Dr. Hüseyin BAĞCI

Kongre Başkanları

Prof.Dr. Halil CETİŞLİ

Doç.Dr. Metin AK

<http://fizikselkimya4.pau.edu.tr/>

fizikselkimya@pau.edu.tr



Richmondpamukkale
thermal



Homojen Reaksiyon Sistemlerinde Monte Carlo Simülasyonu

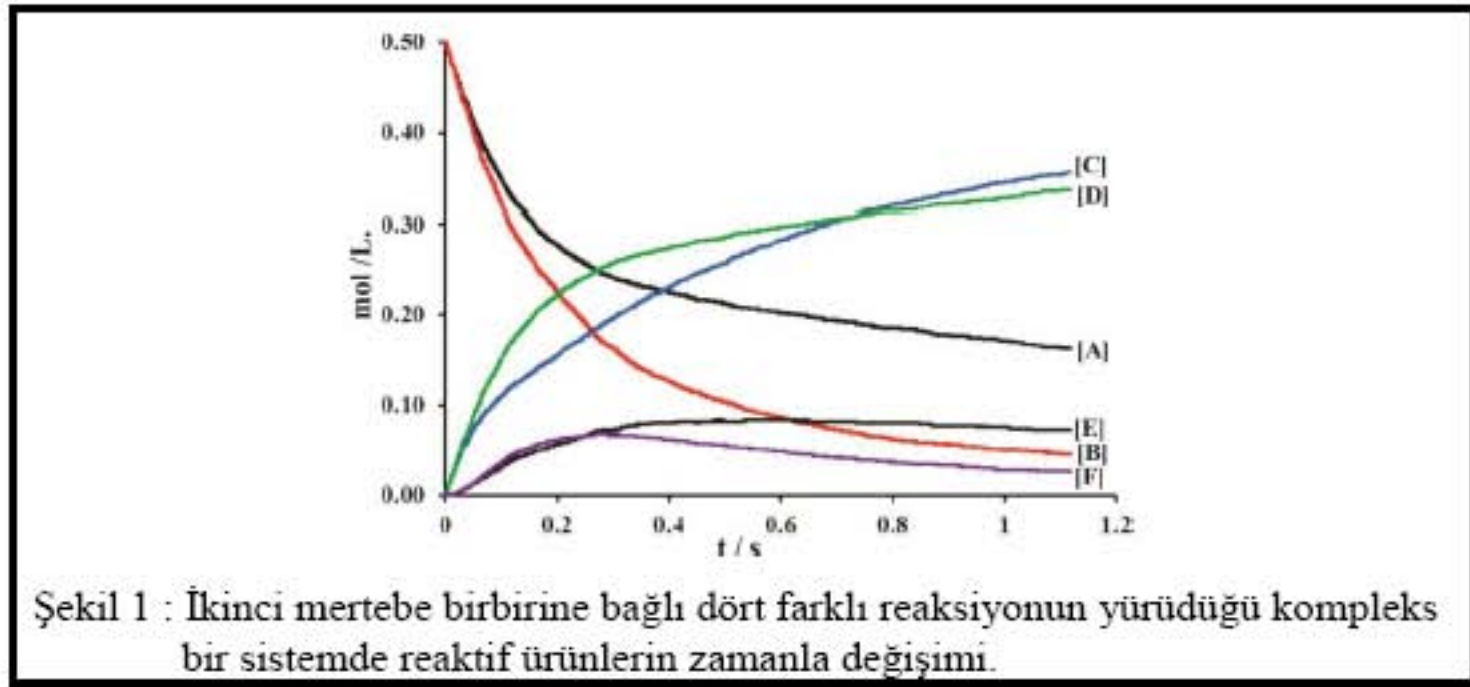
Taner TANRISEVER

B24

*Balıkesir Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Çağış Kampüsü, BALIKESİR
taner@balikesir.edu.tr

Monte Carlo Yöntemi kullanılarak birinci ve ikinci mertebeye reaksiyonları simüle etmek için bir algoritma geliştirilmiş, bilgisayar zamanını veya iterasyon değerini gerçek zamana dönüştürmek için bir yöntem önerilmiştir. Geliştirilen yöntemin hassasiyeti; hız sabitlerinin oranları, örnek büyüklüğü, konsantrasyon faktörleri ve reaksiyon sayısı değiştirilerek incelenmiştir. Molekül sayısının 10^4 - 10^5 olduğu sistemlerde simülasyonda kullanılan matris boyutlarının etkileri incelenmiştir. Referans reaksiyonun hız sabitine göre reaksiyonların beklenen hız sabitlerinden hangi oranda uzaklaştıkları hesaplanmıştır. Ayrıca referans molekül sayısı yaklaşık 250 - 70000 aralığında değiştirilerek beklenen hız sabitlerinden sapmalar hesaplanmıştır. Şekil 1 de hız sabitleri 5, 10, 15, 20 mol L⁻¹ s⁻¹ olan A + B → C + D, C + B → E + F, E + A → B + D, F + D → A + C kompleks hayali reaksiyonlarının yürüdüğü ortamda türlerin zamanla değişimleri görülmektedir. Bu simülasyonun başında yalnızca A ve B türlerinin konsantrasyonu 0.5 M olduğu durum için simülasyon başlatılmıştır. Ayrıca programın geliştirilmesinde web'e uygun bir programlama dili kullanıldığından, geliştirilen program web üzerinden kimyasal kinetik eğitimlerinde kullanılabilir özelliktedir.

Anahtar Kelimeler: Monte Carlo Simülasyonu, kimyasal kinetik, tek fazda çoklu tepkimeler
Grafiksel Özet



Kaynaklar

- [1] Arthur F. Voter, Introduction to the Kinetic Monte Carlo Method, Radiation Effects in Solids NATO Science Series Volume 235, 1-23, 2007.
- [2] Shannon D. Piersall and James B. Anderson, Direct Monte Carlo simulation of chemical reaction system: Simple bimolecular reactions, J. Chem. Phys. 95(2), 971-978, 1991.