



# Symulacja i analiza kinetyki reakcji chemicznych

Autorzy: Emilia Sarna, Maja Osica

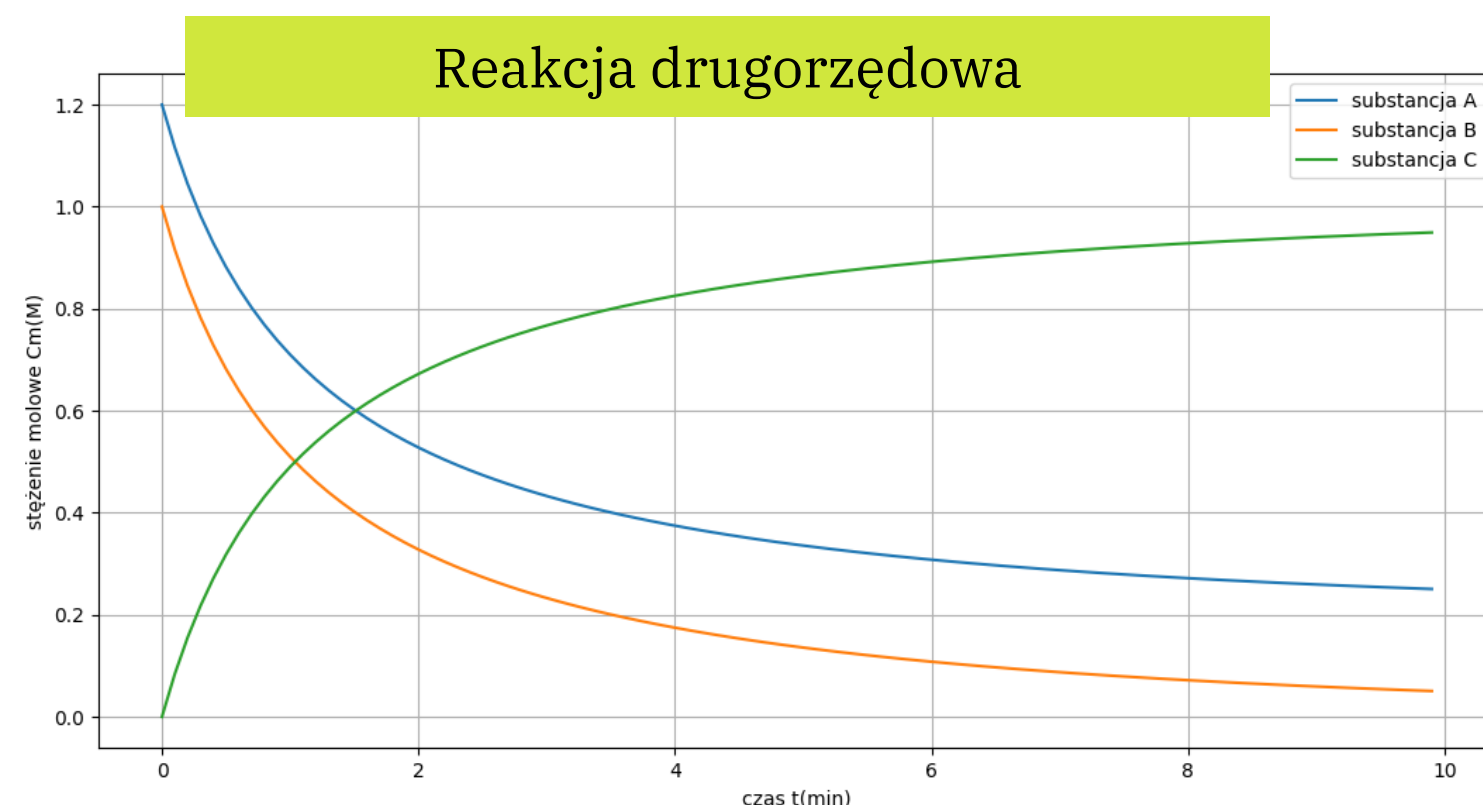
Koordynator: Mikołaj Bartoszewski

## Wprowadzenie

Coraz częściej podczas analizy reakcji chemicznych wykorzystywane są symulacje komputerowe. Znacznie usprawnia to proces zbierania i analizy danych oraz skraca czas przeprowadzenia obliczeń. Umożliwia to również dokładną obserwację zmian w stężeniach substancji, nawet w reakcjach niemożliwych do zobaczenia bez specjalistycznych narzędzi.

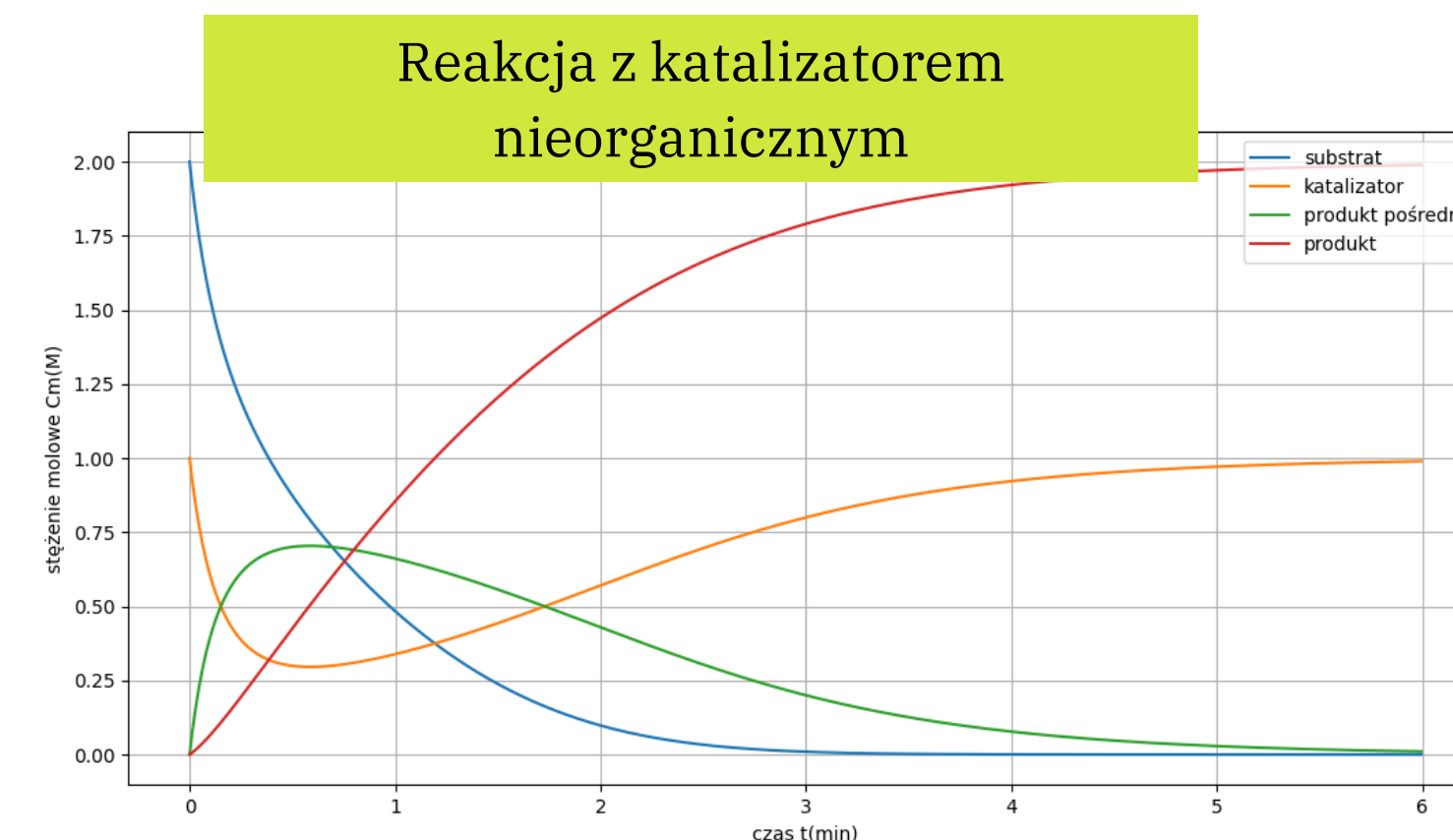
## Metody

Symulacje w tym projekcie zostały zaprogramowane w języku Python, przy użyciu bibliotek Matplotlib i PyLab. Z równań reakcji chemicznych można wyprowadzić równania kinetyczne tych reakcji, a następnie pochodne dla konkretnych substancji. Później za pomocą programu, korzystającego z otwartej metody Eulera, można obliczyć stężenia reagentów dla każdego momentu symulacji i przedstawić je na wykresie.

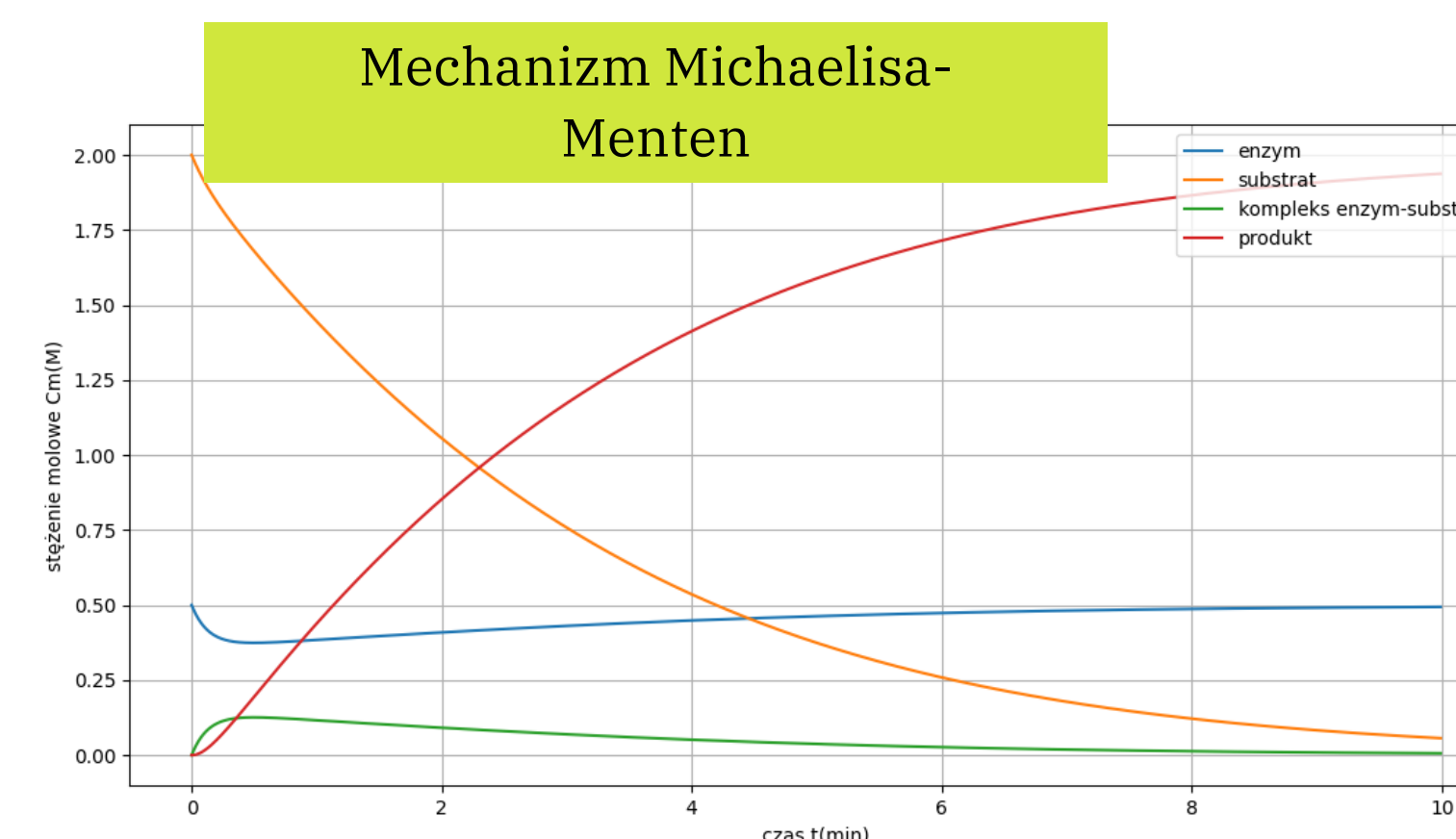


## Katalizator kontra enzym

Korzystając z autorskiego programu można zasymulować wiele reakcji chemicznych i dokonać ich analizy. Postanowiliśmy porównać reakcję katalityczną i enzymatyczną. Reakcje te dają niezwykle podobne rezultaty, jednak różnią się przebiegiem, oraz mają zupełnie inne znaczenie dla organizmów żywych.

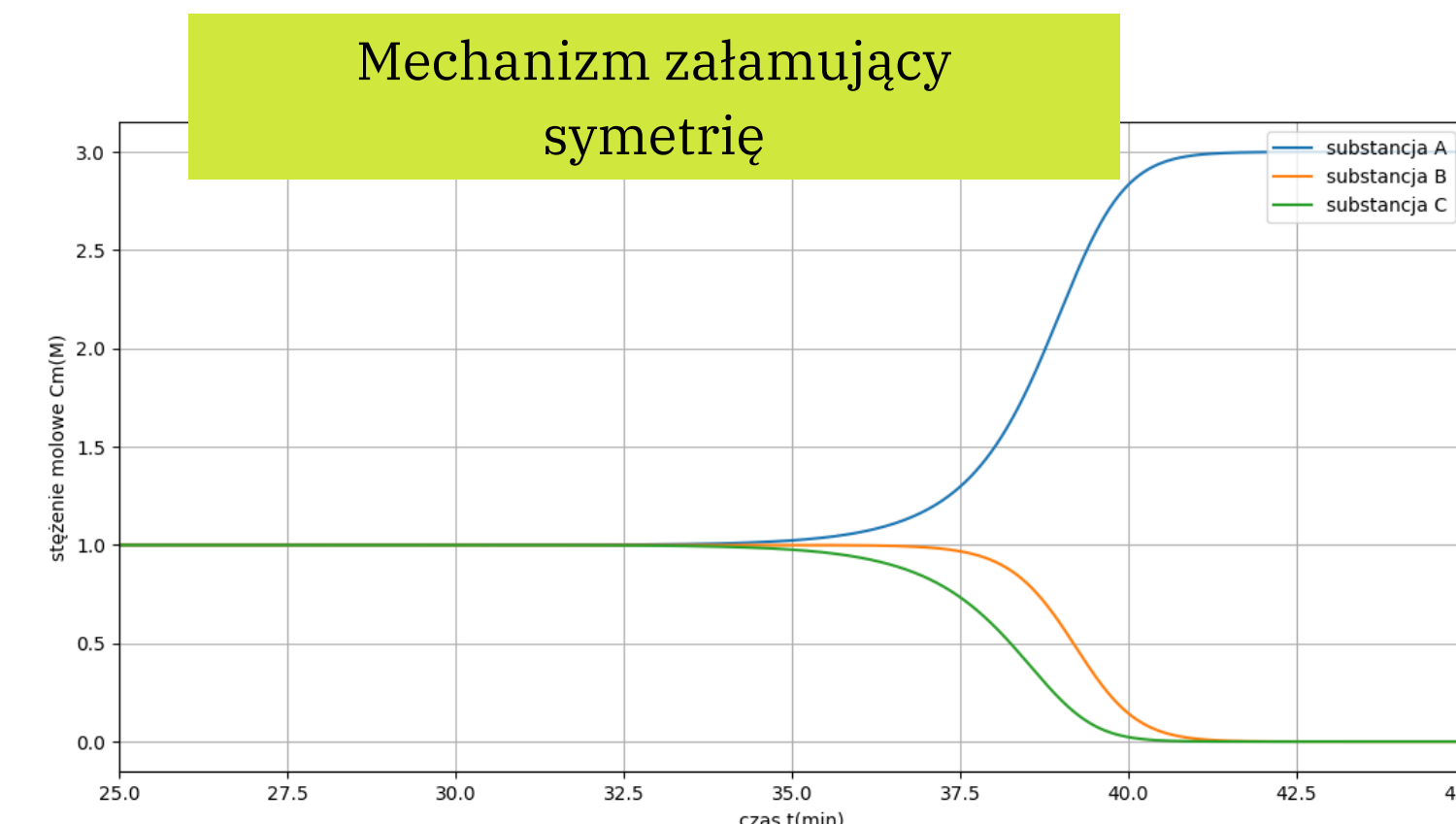


W reakcji z katalizatorem im więcej jest go w reaktorze, tym bardziej wydajna jest reakcja. Natomiast w przypadku enzymów nawet małe ich stężenie ma znaczący wpływ na szybkość.



Katalizatory organiczne okazują się jednak o wiele wydajniejsze i są w stanie przyspieszyć całe reakcje o nawet kilkanaście rzędów szybkości.

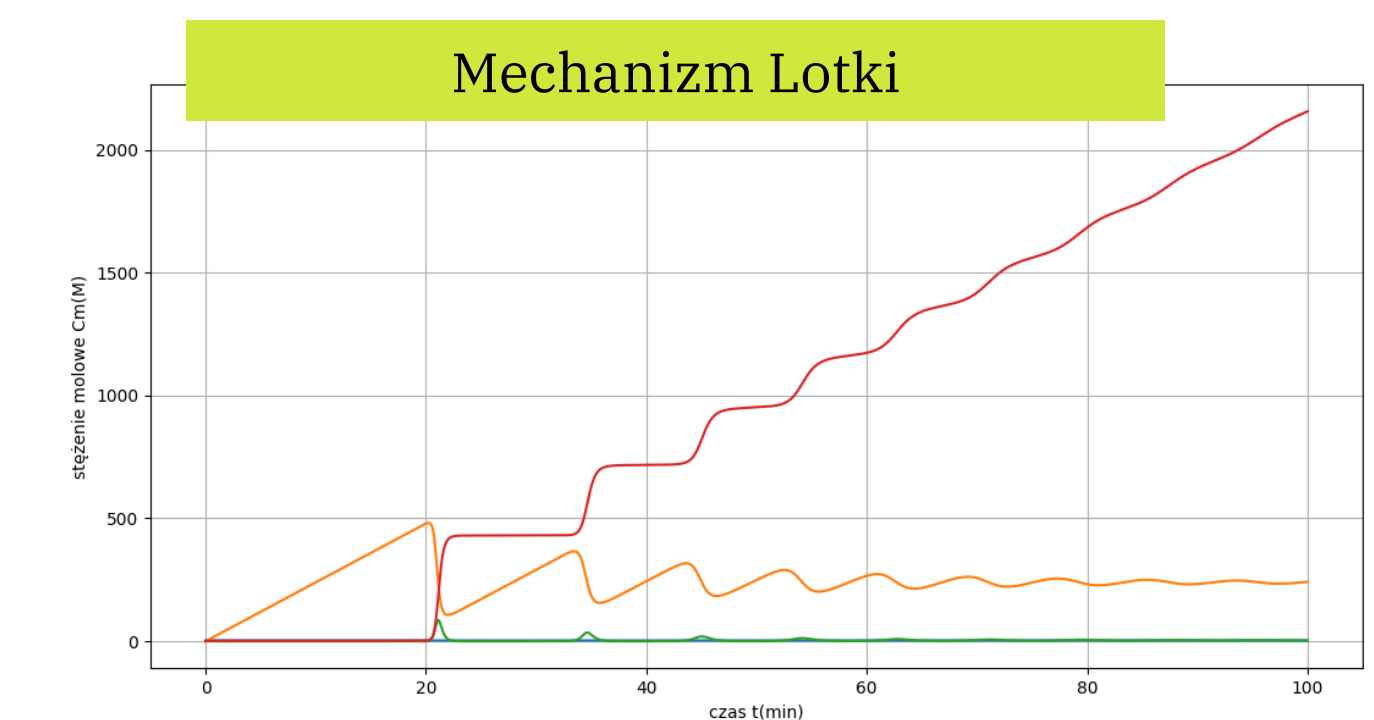
## Mechanizm załamujący symetrię



Jeden z najciekawszych wykresów, jaki udało nam się uzyskać to zobrazowanie tezy F.C. Francka na temat mechanizmów tworzenia się tak zwanej czystości chiralnej. Jest to jedna z propozycji tłumaczących obecność jedynie L-aminokwasów i D-węglowodanów u organizmów żywych. Tym samym jest to jedna z teorii opisujących powstawanie życia na Ziemi.

## Wnioski

Symulacje komputerowe w chemii można prowadzić nie tylko w zakresie biologii, ale także symulować bardzo skomplikowane układy fizyko-chemiczne, jak na przykład reakcje prowadzące do reakcji oscylacyjnych (np. mechanizm Lotki, poniżej). Ponadto można zasymulować procesy, które są zbyt niebezpieczne do bezpośredniej obserwacji przez człowieka oraz te zachodzące zbyt szybko lub zbyt wolno, żeby je zaobserwować. Ich przykładem mogą być różne szeregi promieniotwórcze albo nagłe wybuchy.



## Literatura

"Podstawy chemii fizycznej" - Peter William Atkins  
"Introduction to the dynamic self-organization of chemical systems" - prof. Marek Orlik, wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, str. 16-21

