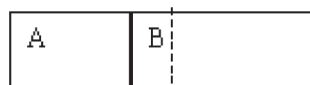


SIMULAÇÃO DO EQUILÍBRIO: O MÉTODO DE MONTE CARLO

Alejandro López-Castillo* e José Cândido de Souza Filho

Departamento de Química, Centro Universitário FIEO (UNIFIEO), Av. Franz Voegeli, 300, 06020-190 Osasco - SP, Brasil



Posição de equilíbrio

Figura 1S. Cilindro com êmbolo móvel com dois tipos de gases

n=0	A	B	C	n=1	A	B	C	n=2	A	B	C	n=3	A	B	C
1	X			1	X			1	X			1	X		
2	X			2		X		2		X		2			X
3	X			3	X			3	X			3	X		
4	X			4	X			4	X			4	X		
5	X			5	X			5	X			5		X	
6	X			6	X			6	X			6	X		
7	X			7	X			7	X			7	X		
8	X			8	X			8		X		8		X	
9	X			9	X			9	X			9	X		
10	X			10	X			10	X			10	X		

n=10	A	B	C	n=50	A	B	C	n=100	A	B	C	n=130	A	B	C
1	X			1		X		1			X	1			X
2			X	2			X	2			X	2			X
3	X			3		X		3			X	3			X
4		X		4		X		4	X			4	X		
5			X	5			X	5			X	5			X
6	X			6			X	6			X	6			X
7	X			7	X			7	X			7		X	
8	X			8		X		8			X	8			X
9		X		9			X	9			X	9			X
10		X		10			X	10			X	10			X

Figura 2S. Modelo da urna de Ehrenfest para o caso da reação $A \rightleftharpoons B \rightarrow C$, após 1, 2, 3, 5, 10, 50, 100 e 130 sorteios

*e-mail: al.castil@yahoo.com.br

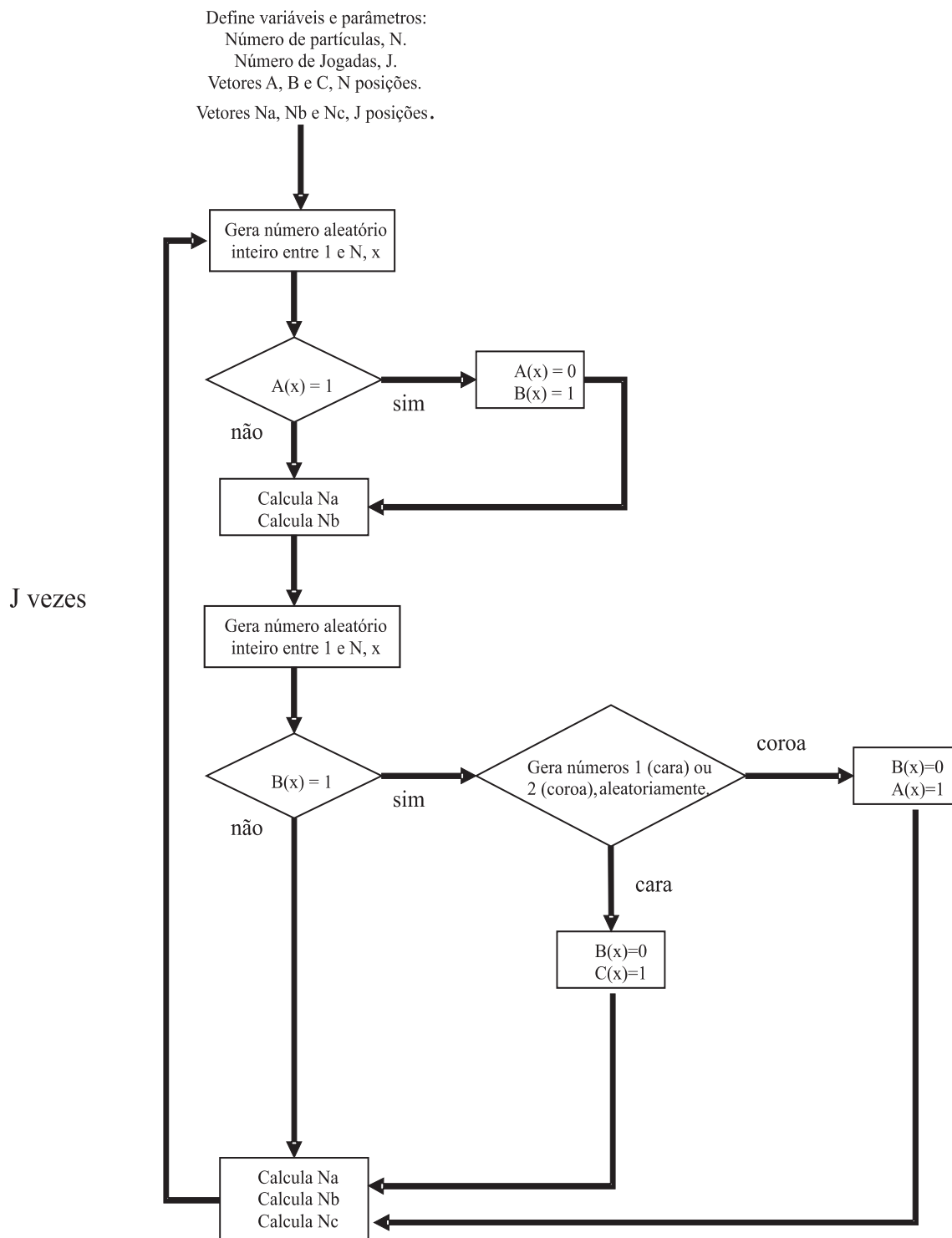


Figura 3S. Fluxograma para implementação de um programa que efetue os sorteios automaticamente para um sistema do tipo $A \rightleftharpoons B \rightarrow C$

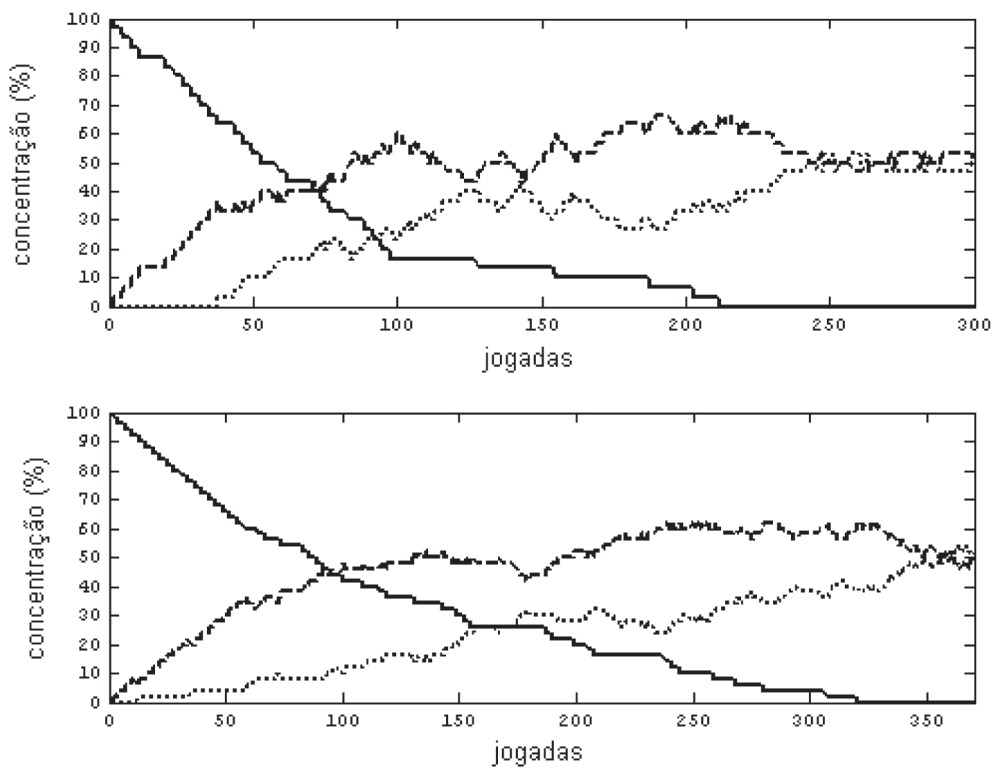


Figura 4S. Porcentagem relativa de partículas (concentração) em função da jogada (tempo) para a reação $A \rightarrow B \rightleftharpoons C$ com $N=30$ (acima) e $N=50$ (abaixo)

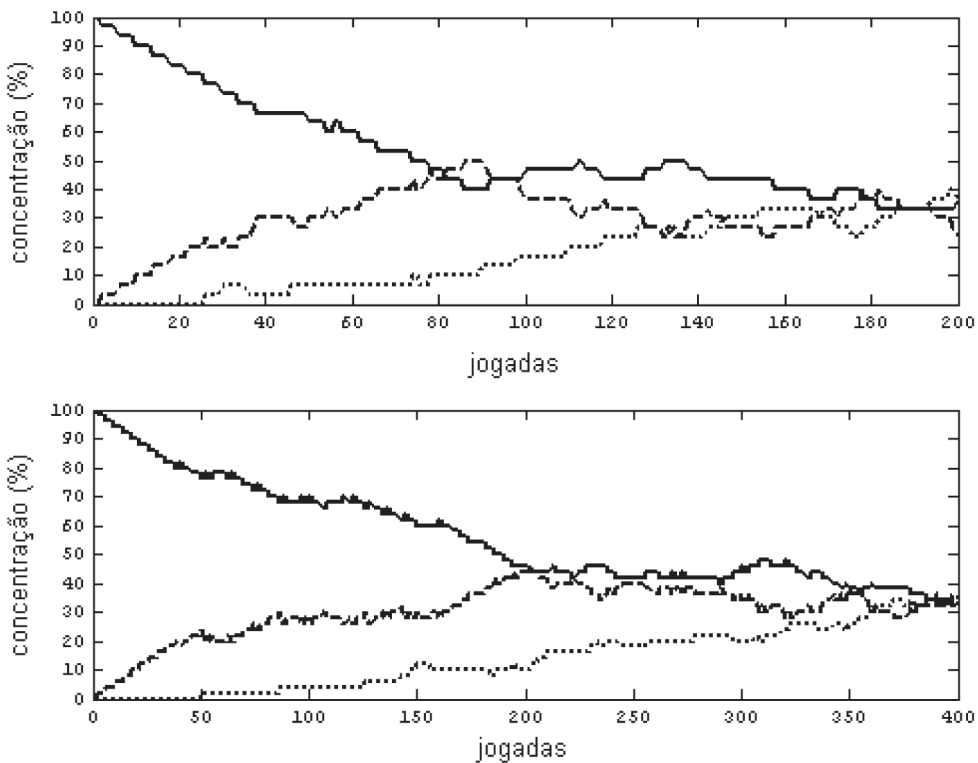


Figura 5S. Mesmo da Figura 4S para a reação $A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons C$ com $N=30$ (acima) e $N=50$ (abaixo)

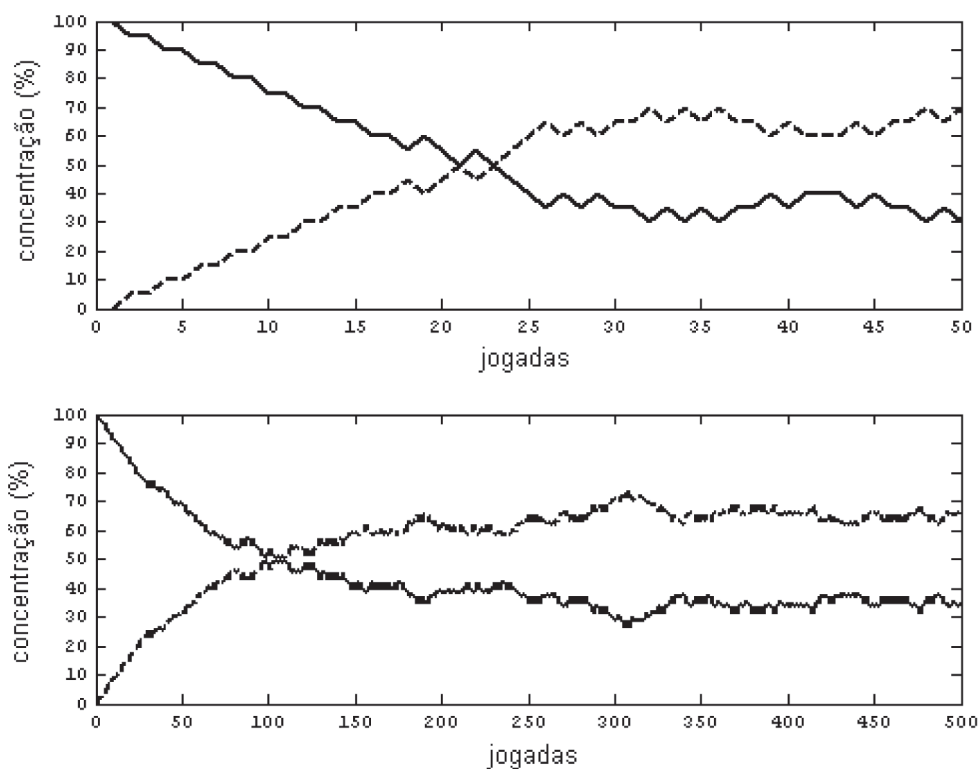


Figura 6S. Mesmo da Figura 4S para a reação $A_{viz} \rightleftharpoons B$ com $N=20$ (acima) e $N=60$ (abaixo)

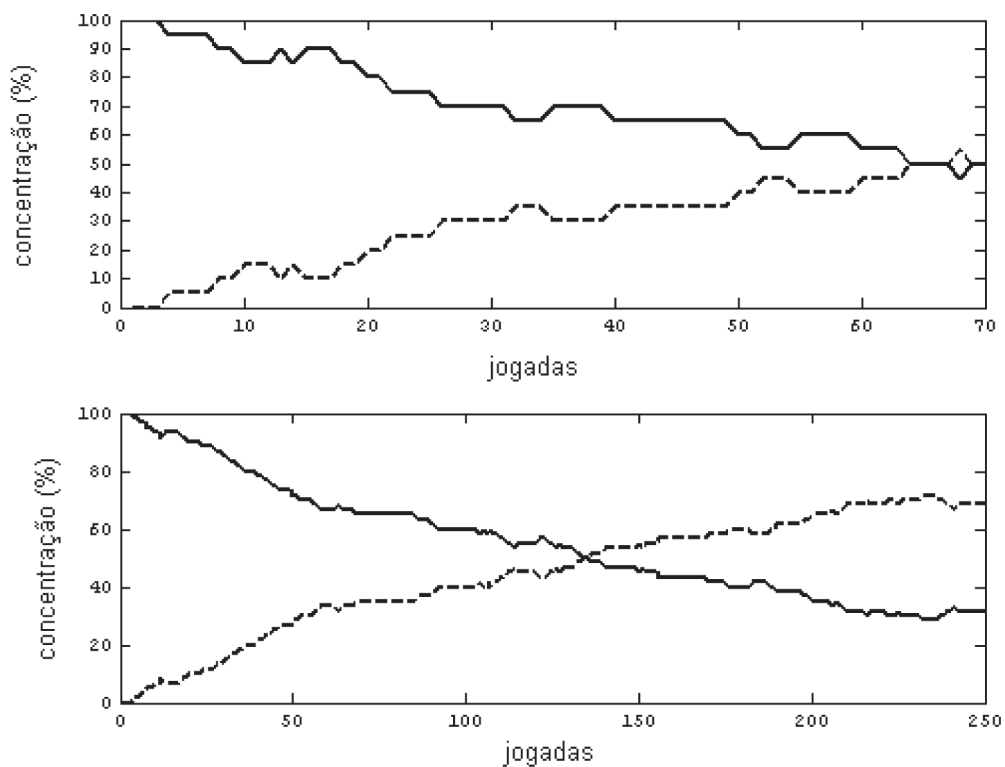


Figura 7S. Mesmo da Figura 4S para a reação $A \rightleftharpoons E_r \rightleftharpoons B$ com $N=20$ (acima) e $N=60$ (abaixo). Para $N=20$ ($1/2X1/2$) e $N=60$ ($1/3X2/3$)