

ESTUDO DE REAÇÕES QUÍMICAS HOMOGÊNEAS VIA MÉTODO DE MONTE CARLO

Ravir Rodrigues Farias, Luiz Augusto Martins Cardoso*, Nemesio Matos Oliveira-Neto e Baraquizio Braga Nascimento Junior

Departamento de Química e Exatas, Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Campus de Jequié, Rua José Moreira Sobrinho, s/n, 45206-190 Jequié – Bahia, Brasil

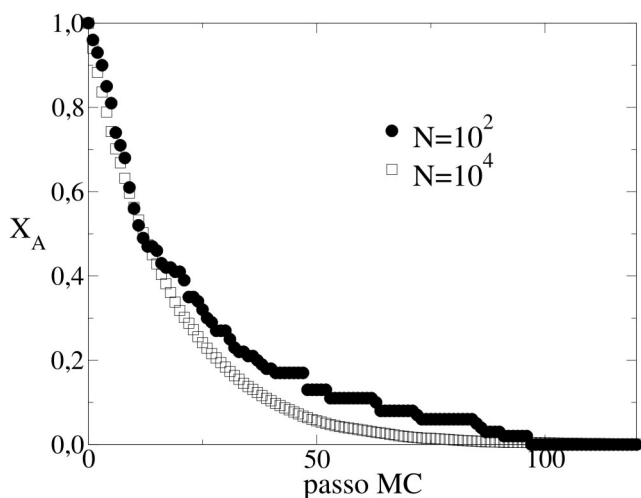


Figura 1S. Evolução temporal de X_A para uma amostragem e $N = 10^2$ e 10^4

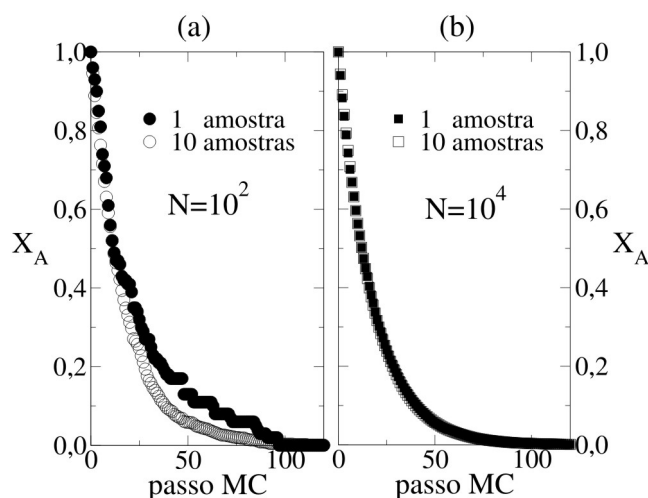


Figura 2S. Comparação da evolução temporal de X_A para duas amostragens diferentes, 1 e 10, e para (a) $N = 10^2$ e (b) $N = 10^4$

Tabela 1S. Efeito do número de moléculas N nos parâmetros obtidos nos ajustes estatísticos

N	X_{0A}	k	Erro padrão em k
10^2	0,93102	0,0276	0,0001
10^3	1,1267	0,0310	0,0001
10^4	0,99388	0,02803	0,00004
10^5	0,98617	0,02780	0,00001
10^6	0,99923	0,028102	0,000003

Tabela 2S. Efeito do número de amostragem nos parâmetros obtidos nos ajustes estatísticos

Amostragem	X_{0A}	k	Erro padrão em k
1	0,99388	0,02803	0,00004
10	0,99609	0,028048	0,000008
10^2	0,99799	0,028113	0,000004
10^3	1,0009	0,0281195	0,0000009