



UNIVERSIDADE ESTADUAL DO SUDOESTE DA BAHIA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA E EXATAS
COLEGIADO DOS CURSOS DE GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

**UMA INTRODUÇÃO AO ESTUDO DE REAÇÕES
QUÍMICAS MONOMOLECULARES E
ELEMENTARES VIA MÉTODO MONTE CARLO**

FRANCIS PEREIRA NASCIMENTO

Orientador : Dr. Nemésio Matos de Oliveira Neto

Jequié-2013

FRANCIS PEREIRA NASCIMENTO

**UMA INTRODUÇÃO AO ESTUDO DE REAÇÕES
QUÍMICAS MONOMOLECULARES E
ELEMENTARES VIA MÉTODO MONTE CARLO**

Relatório apresentado como requisito
parcial para obtenção do grau de
Bacharel em Química pela Universidade
Estadual do Sudoeste da Bahia

Jequié-2013

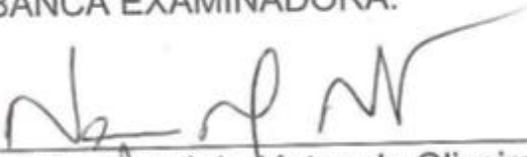
FRANCIS PEREIRA NASCIMENTO

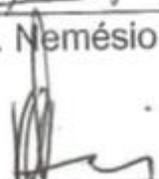
**UMA INTRODUÇÃO AO ESTUDO DE REAÇÕES
QUÍMICAS MONOMOLECULARES E
ELEMENTARES VIA MÉTODO MONTE CARLO**

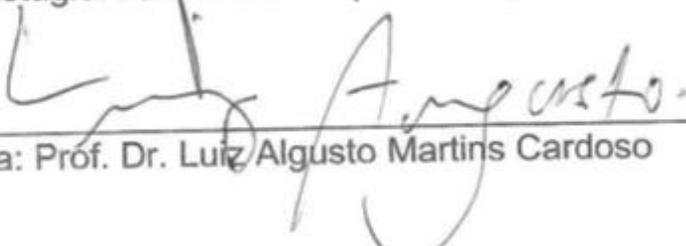
Relatório apresentado como requisito
parcial para obtenção do grau de
Bacharel em Química pela Universidade
Estadual do Sudoeste da Bahia

APROVADO EM 25,03,13

BANCA EXAMINADORA:


Orientador: Prof. Dr. Nemésio Matos de Oliveira Neto


Prof.-disciplina Estágio: Prof. Dr. Baraquizio Braga do N. Junior


Parecerista: Prof. Dr. Luiz Augusto Martins Cardoso

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a minha Família, meus pais Aercio e Margarete, a minha irmã Carla, aos meus primos Helder, Vinicius e Marco que por tantas vezes me ajudaram com palavras ou ensinamentos. Também aos demais parentes que de tantas formas me ajudaram a me tornar o que hoje sou.

Agradeço ao meu orientador Dr. Nemésio Matos pela ajuda e dedicação na produção deste trabalho, com seus ensinamentos, explicações e com suas rápidas correções que favoreceram a realização desta produção.

Um agradecimento especial ao colega e amigo Ravir Farias que sem sua ajuda certamente seria quase impossível a realização desta obra, obrigado pelas explicações e recomendações.

Igualmente aos professores: Renê, Marlúcia, Suzimone, Baraquizio e mais outros que contribuíram fortemente para minha formação profissional.

Por fim agradeço aos meus colegas da republica, Os Naufragos: Welton, Diego, Daniel, Gilberto e Mailson, que de alguma forma me ajudaram bem como tantos outros como: Caio, Alex, Luzia, Carol, Washington e tantos mais que tornaria este projeto pequeno para tantas contribuições.

Sumário

Lista de Abreviaturas e Siglas	3
Lista de Figuras.....	4
Resumo	6
1. Introdução	7
2. Objetivos	10
3. Atividades realizadas	11
4. Resultados e Discussões.....	13
4.1. Reações do tipo $A \rightarrow B$:.....	15
4.2. Reações do tipo $A \leftrightarrow B$	18
5. Considerações Finais.....	21
6. Bibliografia	22
7. Anexo.....	23

Lista de Abreviaturas e Siglas

MMC	Método Monte Carlo
MC	Monte Carlo
θ	Valor referente à temperatura
BG	Boltzmann-Gibbs
E_c	Energia cinética
E_a	Energia de ativação da reação direta
E_b	Energia de ativação da reação inversa
k_e	Constante de equilíbrio
k	Constante de velocidade
T	Temperatura absoluta
k_B	Constante de Boltzmann
V	Velocidade da reação química
X_A	Fração molar das substâncias
R	Constante universal dos gases ideais
A	Fator pre exponencial

Lista de Figuras

- Figura 1:** Diagrama para ilustrar a importância da simulação computacional para estudos teóricos e práticos. Extraído do livro de resumos da VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Artigo “Método Monte Carlo Aplicado a Simulação de Líquidos”.
.....8
- Figura 2:** Fração em mols em função do tempo de MC para 6 (seis) valores de N (números de moléculas) distintos. Este é um estudo comparativo para verificar qual deve ser o valor de N para obtermos resultados satisfatórios.....13
- Figura 3:** Estudo comparativo entre valores de N. Destaque para valor de $N=10^4$ com linha cheia e demais valores, $N=10^3$, $N=10^5$, $N=10^6$, com linhas tracejadas.....14
- Figura 4:** Fração em mols em função do tempo de MC para valores de $\theta=1,0$ (círculo preto), $\theta=1,3$ (quadrado vermelho), $\theta=1,6$ (losangolo azul).....15
- Figura 5:** Fração molar X_A em escala logarítmica em função do Passo de Monte Carlo para valores de $\theta=1,0$ (círculo preto), $\theta=1,3$ (quadrado vermelho), $\theta=1,6$ (losangolo azul).....16
- Figura 6:** Estudo comparativo entre valores de p (fator estérico). com a fração molar de A em função do tempo de Monte Carlo para valores de $p=1,0$ (círculo), $p=0,75$ (quadrado), $p=0,50$ (losangolo) $p=0,25$ (triangulo).....17
- Figura 7:** Estudo comparativo entre diferentes valores de E_{ba} com a fração molar de A e B em função do tempo de Monte Carlo para reação do tipo $A \rightleftharpoons B$ com $N=10^4$ e uma média sobre 10^3 amostras. $E_{ba}=0,5$ (linha tracejada laranja), $E_{ba}=1,0$ (linha cheia preta), $E_{ba}=2,0$ (linha tracejada azul).....18

Figura 8: Gráfico de $E_{ba}=0,5$ tendo a fração molar de A e B em função do passo de Monte Carlo com variação de θ entre os valores $\theta=1,0$ (círculo preto com linha cheia), $\theta=1,3$ (quadrado vermelho com linha tracejada) e $\theta=1,6$ (losangolo azul com linha pontilhada).....19

Figura 9: Gráfico de $E_{ba}=1,0$ tendo a fração molar de A e B em função do passo de Monte Carlo com variação de θ entre os valores $\theta=1,0$ (círculo preto com linha cheia), $\theta=1,3$ (quadrado vermelho com linha tracejada) e $\theta=1,6$ (losangolo azul com linha pontilhada).....19

Figura 10: Gráfico de $E_{ba}=2,0$ tendo a fração molar de A e B em função do passo de Monte Carlo com variação de θ entre os valores $\theta=1,0$ (círculo preto com linha cheia), $\theta=1,3$ (quadrado vermelho com linha tracejada) e $\theta=1,6$ (losangolo azul com linha pontilhada).....20

Resumo

Através deste estudo utilizando o método Monte Carlo aplicada á reações químicas monomoleculares e elementares. O método Monte Carlo consiste na probabilidade da ocorrência das reações direta e inversa. Tais probabilidades de transição são baseadas na energia de ativação da reação direta (E_a), energia de ativação da reação inversa (E_b) bem como da energia térmica média das moléculas ($k_B T$). Além disso, incluímos um fator estérico (ρ) nestas probabilidades a fim de imitar fatores geométricos. A linguagem de programação utilizada foi o FORTRAN. Estes resultados gerados estão de acordo com resultados teóricos encontrados em livros e periódicos científicos.

Palavras-chave: Química teórica, Simulação computacional, Método de Monte Carlo, Reações químicas, Equilíbrio.

1. Introdução

Normalmente, os estudos de reações químicas são realizados em laboratórios de química e os resultados experimentais são, em geral e quando possível, confrontados com a teoria ou vice-versa. Porém, para realização deste trabalho, utilizaremos simulação computacional para estudar reações de primeira ordem homogêneas, via o Método de Monte Carlo (MMC).

A química é por sua própria natureza, preocupada com a mudança. As reações químicas convertem substâncias com propriedades bem definidas em outros materiais com propriedades diferentes. Muito de nosso estudo sobre reações químicas diz respeito à formação de novas substâncias a partir de um determinado conjunto de reagentes. Entretanto, é igualmente importante entender com que rapidez as reações ocorrem. As velocidades de reações estendem-se sobre uma faixa enorme, a partir das que se completam em frações de segundos, como as explosões, aquelas que levam milhares ou milhões de anos, como a formação dos diamantes e outros minerais na crosta terrestre.^[1]

A velocidade de uma reação química aumenta com o aumento da temperatura. Isso ilustra que a constante de velocidade k varia com a temperatura. Esta relação foi descoberta em 1887 por van't Hoff e em 1889 por Arrhenius de forma independente. Arrhenius aprofundou os estudos sobre muitas reações e estabeleceu uma relação, conhecida como equação de Arrhenius: $k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$, onde k é a constante de velocidade, A é o fator pre exponencial, E_a a energia de ativação por mol, R a constante universal dos gases ideais e T é a temperatura absoluta.^[2]

Cada reação tem sua própria lei de velocidade e constante de velocidade, k , característica. A constante de velocidade independe das concentrações dos reagentes, mas depende da temperatura.^[3]

A ordem de uma reação não pode ser em geral predita a partir da equação química: uma lei da velocidade é uma lei empírica. Isto é, a lei de velocidade é uma característica da reação determinada experimentalmente e não pode em geral ser escrita a partir da estequiometria da equação química.^[3]

Vários métodos são úteis na determinação das equações de velocidade. Um destes, o método da velocidade inicial, envolve a realização de uma série de

experiências, em separado, numa dada temperatura. Este método consiste na determinação da velocidade e concentração dos reagentes no início de cada experiência, com posterior análise matemática da relação entre a concentração inicial e a velocidade inicial.^[2]

Esses podem ser usados na simulação computacional fornecendo resultados exatos para modelos, a menos de um erro estatístico. Este erro é ocasionado pelas limitações computacionais (a memória que limita o tamanho do sistema ou o número de moléculas envolvidas na simulação, e a CPU que limita o tempo de observação ou o número de passos da simulação). Este erro pode ser controlado ao ponto de ter magnitude de erros experimentais.

A simulação computacional tem um papel importante na ciência contemporânea por ser o elo entre as previsões teóricas e os resultados experimentais. Por isto, muitos acreditam que a simulação, hoje, é uma via de abordagem tão importante quanto a experimental ou a teórica.^[4]

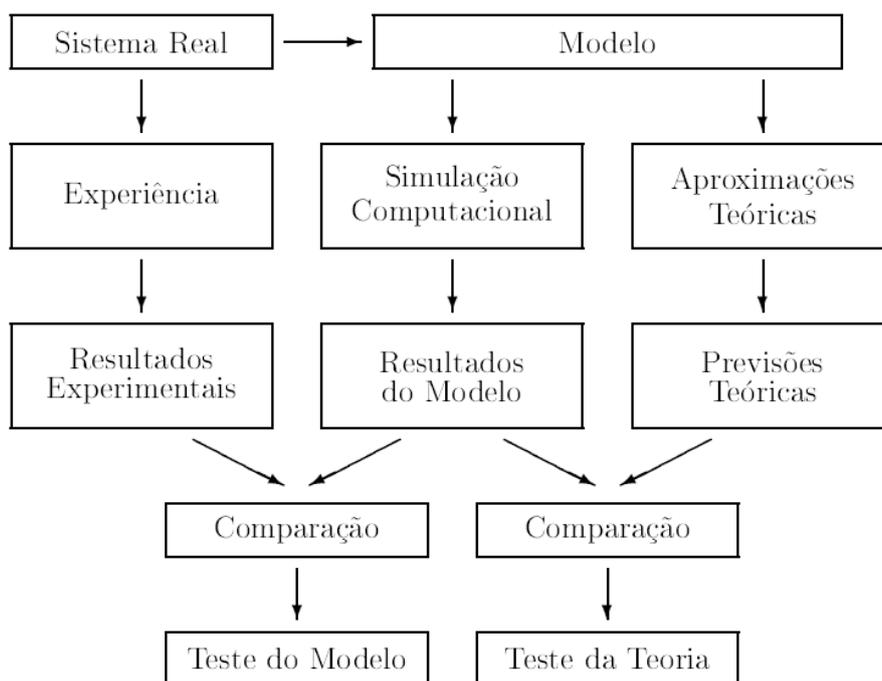


Figura 1: Diagrama para ilustrar a importância da simulação computacional para estudos teóricos e práticos. Extraído do livro de resumos da VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Artigo “Método Monte Carlo Aplicado a Simulação de Líquidos”.

Dentre tais métodos de simulação computacional o método de Monte Carlo é utilizado para descrever comportamentos de sistemas Físicos e Químicos, como também, em várias outras áreas do conhecimento, a fim de obter informações

qualitativas e quantitativas de grande relevância para a análise do sistema real. Tal método tem sido assim denominado em homenagem ao caráter aleatório proveniente dos jogos de roleta de Monte Carlo no Principado de Mônaco. Sendo que, esse utiliza processos estocásticos para gerar configurações por importância de forma aleatória até que novas configurações sejam geradas, satisfazendo a distribuição de probabilidade de Boltzmann-Gibbs (BG). Existem registros isolados de sua utilização na segunda metade do século XIX, quando foram realizadas experiências empregando informações casuísticas.^[5]

2. Objetivos

Aplicar o método Monte Carlo à reações químicas monomoleculares e elementares, bem como propor a introdução do fator estérico nas simulações.

Analisar algumas propriedades de equilíbrio e os fatores que podem afetar o estado de equilíbrio através do método Monte Carlo, tendo a temperatura como parâmetro de maior destaque nas simulações realizadas examinando a dependência dos resultados em relação ao número de moléculas (N) e o de amostragens.

3. Atividades realizadas

Foram utilizados nesse trabalho, softwares de código aberto, como o Sistema Operacional Linux Ubuntu 10.05, Intel® Fortran 90 para a compilação do código fonte, e o software GRACE para geração dos gráficos. As simulações foram realizadas em um computador Acer Aspire 5552-5664 com processador AMD Phenom™ II X3 N830 de três núcleos e 4GB de memória RAM. A pesquisa foi realizada no laboratório de Física da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia UESB, através da Iniciação Científica IC, nos períodos de outubro de 2012 a março de 2013.

No presente trabalho, usamos o método de Monte Carlo (MMC) com a dinâmica definida através da atualização Metropolis a qual considera probabilidades de transição dependente tanto da energia de ativação como da temperatura, bem como o fator estérico das moléculas. Assim, definimos a probabilidade de transição, para a reação direta, P_d , e para a reação inversa, P_i , como segue:^[6]

$$P_d = p_1 \cdot \exp(-\beta E_a) \quad (3.1)$$

$$P_i = p_2 \cdot \exp(-\beta E_b) \quad (3.2)$$

onde p é o fator de estérico, $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura absoluta, E_a e E_b são as energias de ativação das reações direta e inversa, respectivamente.

Por simplicidade definiremos $\Theta \equiv k_B T/E_a$ e $E_{ba} \equiv E_b/E_a$. O primeiro é um parâmetro adimensional que relaciona a temperatura T à energia de ativação E_a , enquanto que o segundo é E_b medida em relação à E_a . Logo, nossas análises serão baseadas em termos da energia térmica, $k_B T$, e energia de ativação da reação inversa, E_b , ambos medidos com relação à energia de ativação da reação direta, E_a . Por fim, analisaremos a influência do fator estérico p nos resultados.

Para obtenção dos resultados, foi definida a dinâmica do MMC, através de Metropolis, seguindo os seguintes passos: ^[7]

Passo 1: tentamos selecionar aleatoriamente uma molécula do tipo A ; se não conseguimos, vamos para o Passo 2. Se sim, um número aleatório uniforme z

$\in [0, 1]$ é gerado e comparado com P_d , Eq. (3.1); se $z \leq P_d$ a reação ocorre e A torna-se B , se não, a molécula A permanece em sua forma original;

Passo 2: Tentamos selecionar aleatoriamente uma molécula do tipo B . Se a tentativa falhar, o passo termina. Se não, um número uniforme aleatório $z \in [0, 1]$ é gerado e comparado com P_i Eq. (3.2); se $z \leq P_i$ a reação ocorre e B se transforma em A , se não, B continua na sua forma original.

Executando os passos 1 e 2 N vezes, definimos o passo de Monte Carlo. Em todas as simulações apresentadas aqui, todas as amostras tiveram a mesma condição inicial, neste caso, o sistema consistindo apenas de moléculas do tipo A , ou seja, a fração em mols do reagente $X_A = 1$, e trivialmente, $X_B = 0$. Para isso, foi definido que $X_A = \frac{N_A}{N}$ e $X_B = \frac{N_B}{N}$, onde N_A e N_B são os números de moléculas do tipo A e B , respectivamente, e N o número de moléculas, i.e. $N_A + N_B$.

Nas simulações do tipo $A \rightarrow B$ o passo 2 não é utilizado pois não haverá chance de B retornar a ser A .

Para os resultados mostrados aqui, utilizamos $N=10^4$ moléculas. Também foram executados 1×10^3 passos de Monte Carlo (MC) para atingir a configuração de equilíbrio para cada E_{ba} . A partir desta configuração, foi realizado 1×10^3 passos de MC para obter médias térmicas. Além disso, realizamos uma média sobre 10^3 amostras.

4. Resultados e Discussões

A seguir vamos apresentar os resultados obtidos com a simulação computacional utilizando a técnica de Monte Carlo.^[6]

Inicialmente foi simulado uma reação $A \rightarrow B$. Com esta reação foi realizado um estudo para que se pudesse ilustrar que a quantidade de moléculas (N), tem vital importância para uma elevada precisão dos valores propostos.

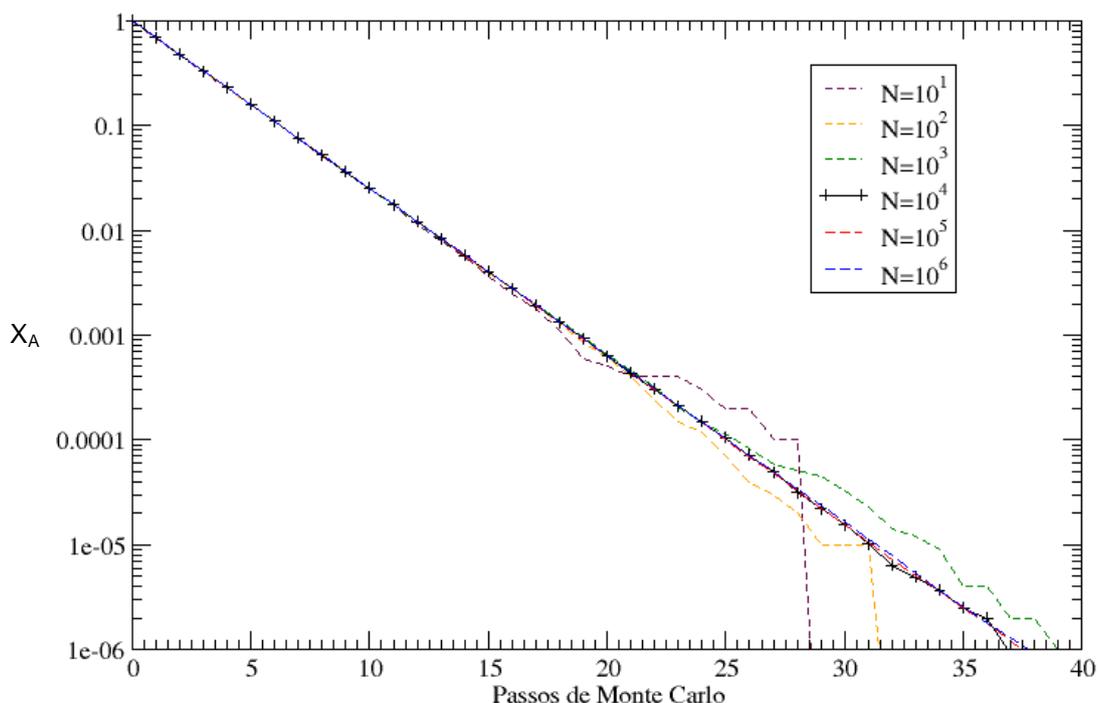


Figura 2: Fração em mols em função do tempo de MC para 6 (seis) valores de N (números de moléculas) distintos. Este é um estudo comparativo para verificar qual deve ser o valor de N para obtermos resultados satisfatórios.

Na Figura 2 é possível observar que valores de N menores que 10^4 tendem a sofrer grandes variações antes que X_A chegue a 10^{-5} . Com um estudo mais detalhado foi ampliada a área entre X_A 10^{-5} e 10^{-6} que é mostrado na Figura 3.

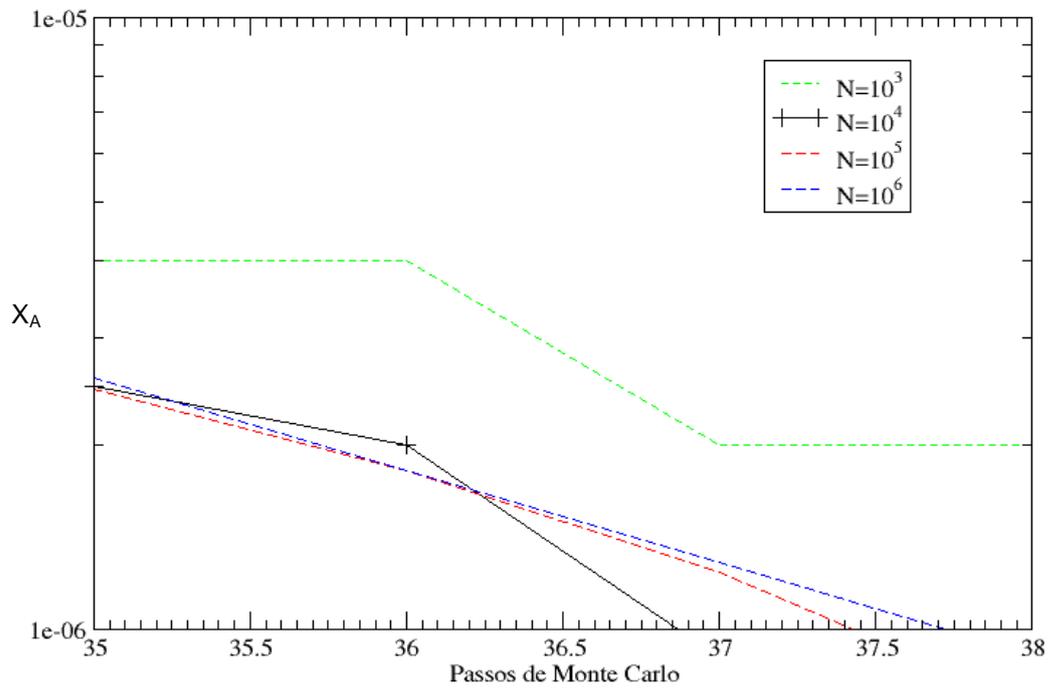


Figura 3: Estudo comparativo entre valores de N . Destaque para valor de $N=10^4$ com linha cheia e demais valores, $N=10^3$, $N=10^5$, $N=10^6$, com linhas tracejadas.

Com este resultado é possível ilustrar que o valor escolhido, 10^4 , para realização dos estudos feitos pelo método Monte Carlo é semelhante a valores mais altos tendo um comportamento preciso o suficiente até $X_A = 10^{-5}$.

4.1. Reações do tipo $A \rightarrow B$:

A principal parte deste estudo se deve a investigação da temperatura em função do tempo (dado em passos de Monte Carlo). Com isto inicialmente, vamos analisar o comportamento do reagente X_A para diferentes valores de temperatura sendo representada por θ . Tanto k_B quanto E_a foram considerados como valores fixos para obtenção destes resultados. Para obter os resultados desta reação foram utilizados $N=10^4$ moléculas. o número de amostragens de 10^3 .

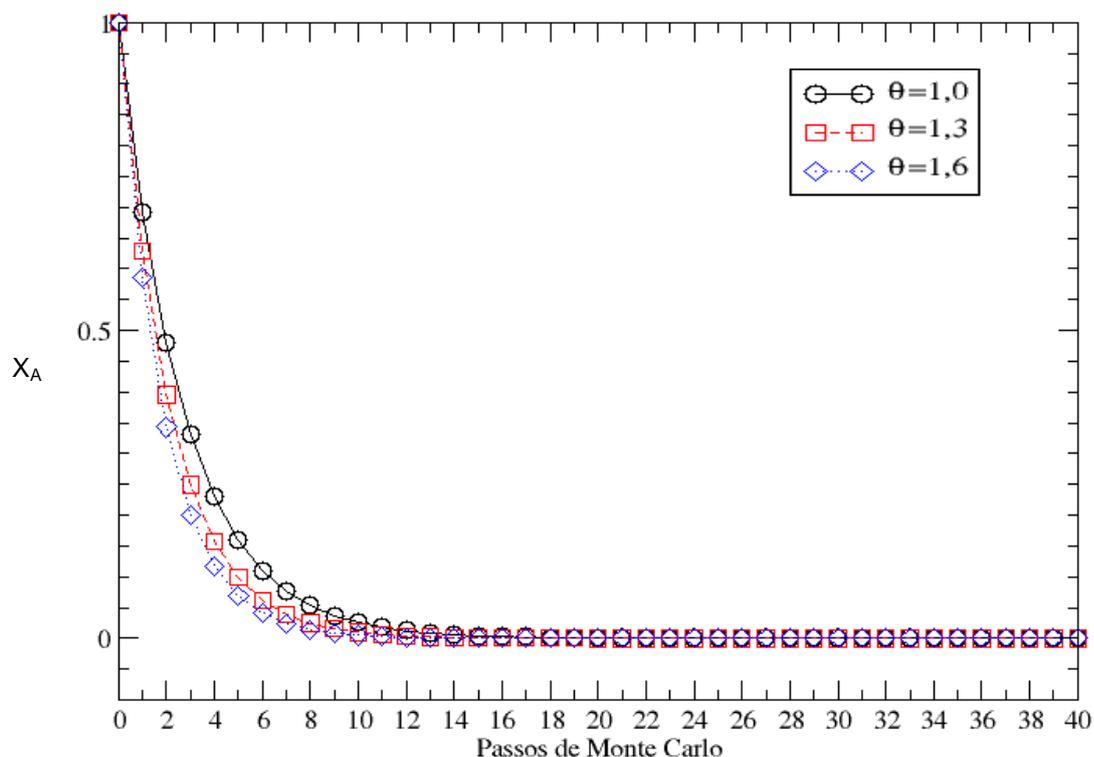


Figura 4: Fração em mols em função do tempo de MC para valores de $\theta=1,0$ (círculo preto), $\theta=1,3$ (quadrado vermelho), $\theta=1,6$ (losângulo azul).

É possível observar na Figura 4 que o aumento dos valores de θ favorece a transformação de $A \rightarrow B$, também a velocidade em si aumenta na mesma proporção, neste caso para valores de $\theta=1,0$; 1,3; 1,6 respectivamente. Isso acontece porque com o aumento da temperatura as moléculas ficam em média mais rápidas, isso aumenta o número de moléculas com energia cinética maior que a energia de ativação, $E_b > E_a$, e com isso a rapidez com que A se transforma em B.

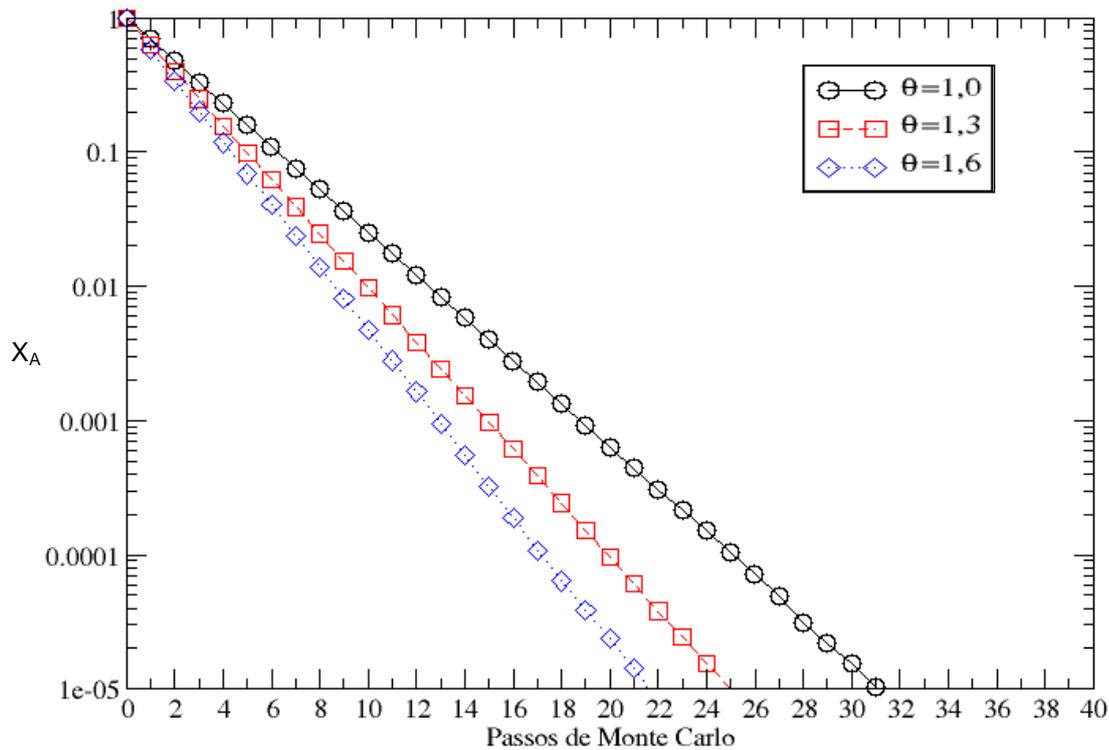


Figura 5: Fração molar de X_A em escala logarítmica em função do Passo de Monte Carlo para valores de $\theta=1,0$ (círculo preto), $\theta=1,3$ (quadrado vermelho), $\theta=1,6$ (losangolo azul).

Na Figura 5, temos a representação de um gráfico da fração em mols em função do passo de Monte Carlo na escala logarítmica para diferentes valores de temperatura resultaram em várias retas. Este resultado demonstra que a reação é de primeira ordem, pois este tipo de comportamento só resultará numa reta para reações de primeira ordem. Segundo Russell (1994), o método gráfico leva vantagens sobre outros métodos na determinação da ordem de uma reação química.

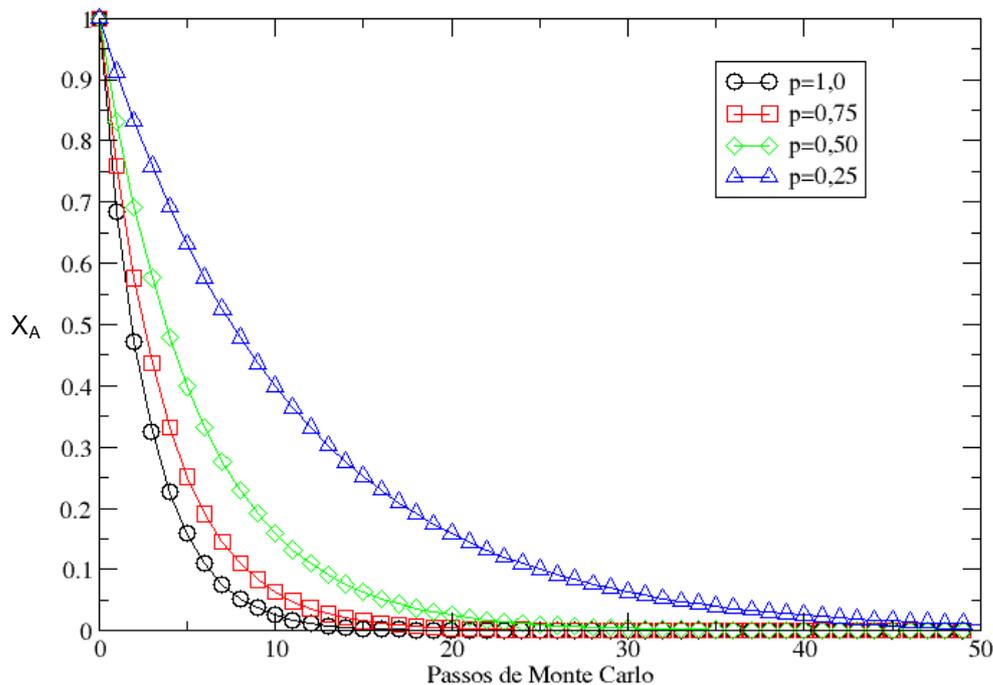


Figura 6: Comportamento da fração molar de A em função do tempo de Monte Carlo para quatro valores distintos de fator estérico(p) de $p=1,0$ (círculo), $p=0,75$ (quadrado), $p=0,50$ (losangulo) $p=0,25$ (triangulo).

Como pode ser observado na figura 6, para $N=10^4$ moléculas, número de amostras de 10^3 e valor de $\theta = 1$, é possível perceber que ao alterar o valor de p (fator de estérico) ha uma queda na velocidade com que a reação ocorre. Isto acontece porque quando $p=1$ significa que todo choque entre moléculas é orientado e ocorrerá a reação, mas quando $p=0,75$ então de todos os choques entre moléculas com energia suficiente para que ocorra a reação apenas 75% desta ocorrerão, pois tem a orientação necessária sendo que vale desta mesma lógica para os valores de $p=0,50$ e $0,25$.

A causa da variação da velocidade da reação com o fator estérico está no fato de a constante de velocidade k variar com o valor de p . A relação entre estas variáveis e suas aplicações em várias reações foi desenvolvidas por Arrhenius, $k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$, sendo $A \sim p$.

Os resultados obtidos na simulação Monte Carlo estão de acordo com os valores encontrados na literatura para o estudo das reações químicas.

4.2. Reações do tipo $A \leftrightarrow B$

Para todos os gráficos nesta seção feitos utilizando 10^4 moléculas e realizamos uma média sobre 10^3 amostras utilizando o mesmo padrão das reações do tipo $A \rightarrow B$.

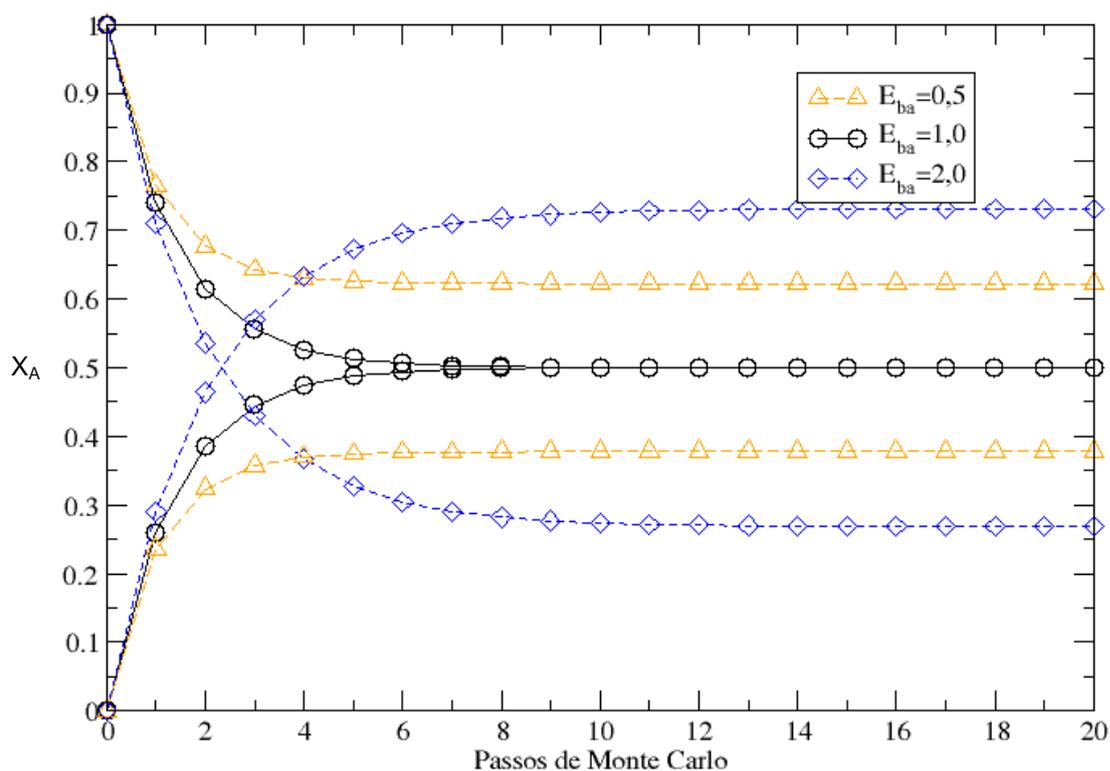


Figura 7: Estudo comparativo entre diferentes valores de E_{ba} com a fração molar de A e B em função do tempo de Monte Carlo para reação do tipo $A \rightleftharpoons B$ com $N=10^4$ e uma média sobre 10^3 amostras. $E_{ba}=0,5$ (linha tracejada laranja), $E_{ba}=1,0$ (linha cheia preta), $E_{ba}=2,0$ (linha tracejada azul).

Através da Figura 7 é claramente notada a influência do E_{ba} no favorecimento da reação para formação de B a partir de A quando se é utilizado um valor fixo para $\theta=1,0$ e variando E_{ba} entre os valores: 0,5; 1,0 e 2,0.

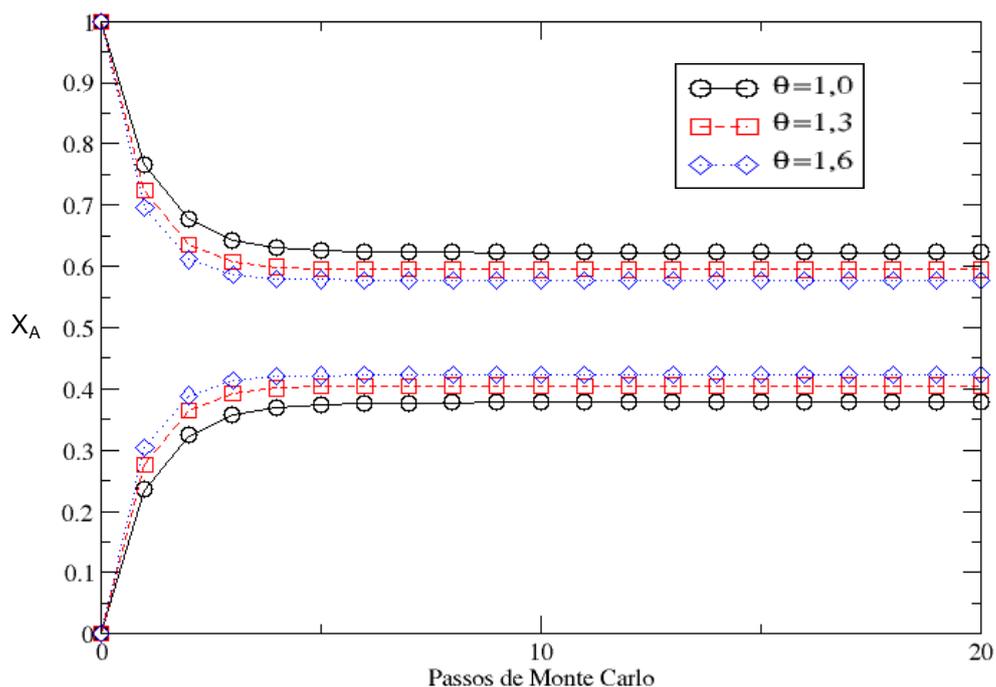


Figura 8: Gráfico de $E_{ba}=0,5$ tendo a fração molar de A e B em função do passo de Monte Carlo com variação de θ entre os valores $\theta=1,0$ (círculo preto com linha cheia), $\theta=1,3$ (quadrado vermelho com linha tracejada) e $\theta=1,6$ (losângulo azul com linha pontilhada).

Na Figura 8 a reação apresenta um valor de $E_{ba}=0,5$ não sendo favorecida a formação de produtos, pois a energia de ativação direta é menor que a inversa.

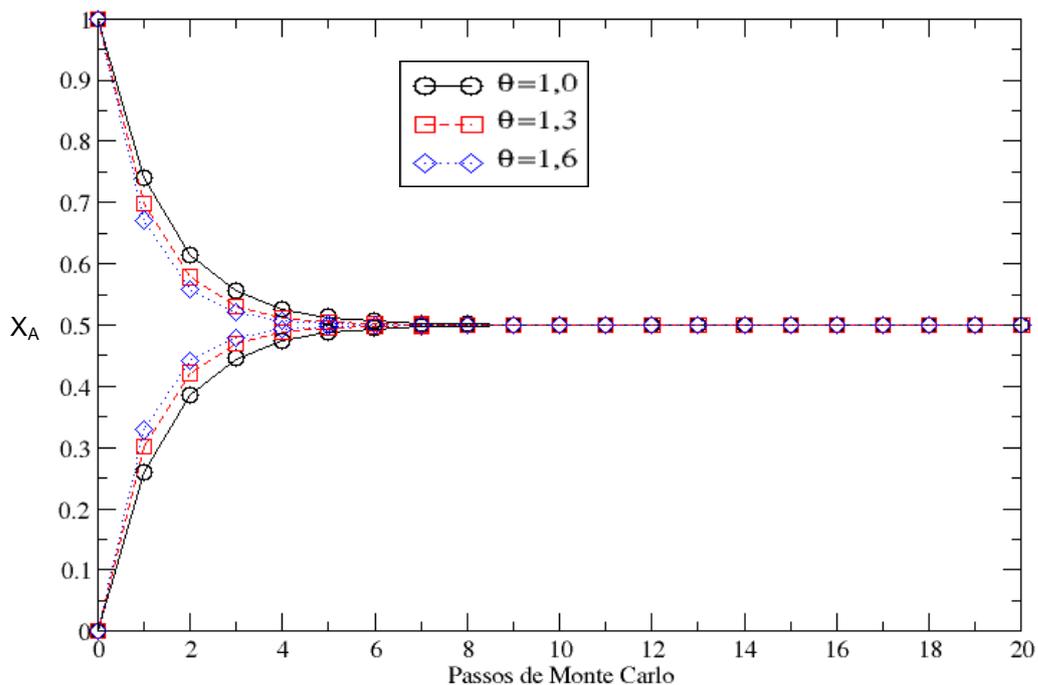


Figura 9: Gráfico de $E_{ba}=1,0$ tendo a fração molar de A e B em função do passo de Monte Carlo com variação de θ entre os valores $\theta=1,0$ (círculo preto com linha cheia), $\theta=1,3$ (quadrado vermelho com linha tracejada) e $\theta=1,6$ (losângulo azul com linha pontilhada).

Na Figura 9 para $E_{ba} = 1$ o resultado obtido é interessante, entretanto a constante de equilíbrio, $K_e = X_B/X_A$, não depende da temperatura. Este resultado não é para uma reação específica, mas para uma família de reações químicas cuja barreira de energia direta é igual ao inverso, em qualquer temperatura.

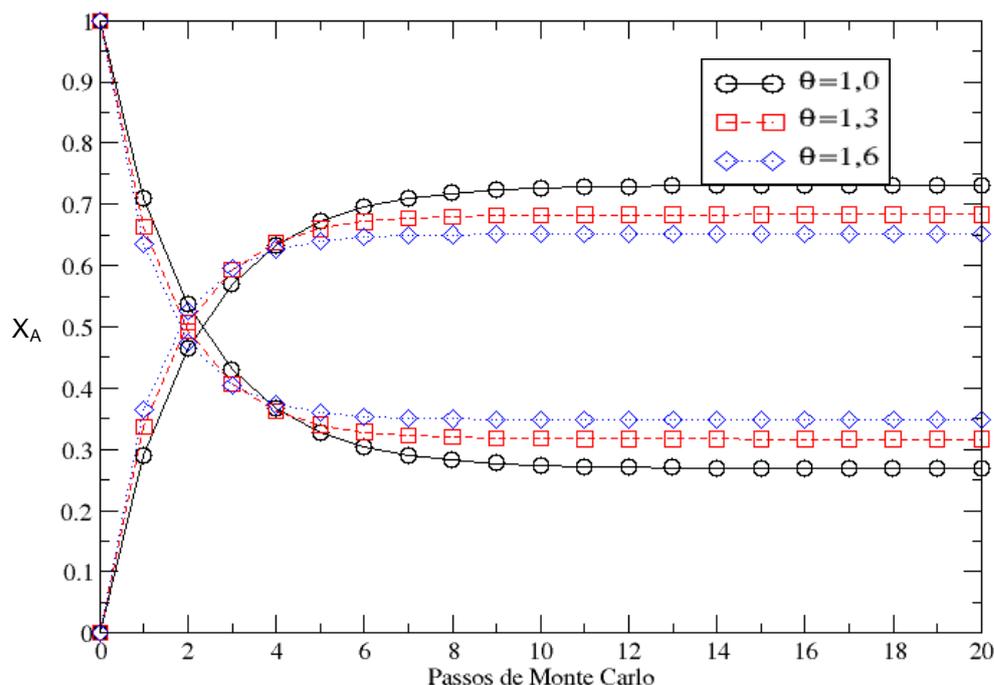


Figura 10: Gráfico de $E_{ba}=2,0$ tendo a fração molar de A e B em função do passo de Monte Carlo com variação de θ entre os valores $\theta=1,0$ (círculo preto com linha cheia), $\theta=1,3$ (quadrado vermelho com linha tracejada) e $\theta=1,6$ (losangolo azul com linha pontilhada).

Na Figura 10 a reação apresenta um valor de $E_{ba}=2,0$ sendo favorável a formação de B, pois a energia de ativação direta é maior que a inversa. Com o aumento dos valores de θ mais rápido é alcançado o equilíbrio, contudo menos produto é obtido, pois torna mais favorável o retorno de $B \rightarrow A$.

É observado que quanto maior a barreira energética de E_b comparada E_a , uma molécula do tipo B tem uma chance menor de superar tal barreira quando comparada com uma molécula do tipo A superar a barreira E_a , sendo assim, quanto maior for o valor para E_{ba} mais difícil será o retorno de $B \rightarrow A$.

5. Considerações Finais

Foi realizado um teste comparativo para determinar o melhor valor de N (numero de moléculas), para que fosse utilizado neste estudo.

Através das simulações Monte Carlo, estudamos várias características das reações químicas tais como: correlação entre a variação de θ e variações de velocidade para reações irreversíveis, introdução do fator estérico utilizando a equação de Arrhenius, evolução temporal rumo ao estado de equilíbrio termodinâmico.

Este estudo mostra também que o equilíbrio químico não depende da temperatura ou de E_{ba} como fatores isolados, mas sim da interação entre elas, para reações reversíveis. Tendo em mente que todas as características de equilíbrio apresentadas nestas simulações não são apenas para uma determinada reação química homogênea, mas para uma família de reações químicas.

Após sucessivas simulações via método Monte Carlo é possível ter uma noção sobre a extensão dos possíveis trabalhos a qual este pode ser integrado, seja na área de exatas ou humanas.

6. Bibliografia

- [1] Brown, Theodore L. *Química, a ciência central*, Pearson Prentice, (2005)
- [2] Russell, J. B. *Química Geral*. Tradução e revisão técnica Márcia Guekezian. 2^a.ed. volume 2. São Paulo: Pearson Makron Books v.II, (1994).
- [3] Atkins, P. *Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*. Porto Alegre: Bookman, (2001).
- [4] Coutinho, K. *Método Monte Carlo Aplicado a Simulação de Líquidos*, no Livro de Resumos da VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, (2000).
- [5] Angelotti, W. F. D., Fonseca, A. L., Torres, G. B., Custodio, R., Uma abordagem simplificada do Método de Monte Carlo Quântico: da solução de integrais ao problema da distribuição eletrônica, *Quim. Nova*, Vol. 31, Nº 2, (2008).
- [6] Farias, R. R., Cardoso, L. A. M., and Oliveira-Neto, N. M., *A Simple Model to Access Equilibrium Constants of Reactions*. *Exatas Online* 2, 7 (2011).
- [7] López-Castillo, A., Souza Filho, J. C., *Simulação Do Equilíbrio: O Método De Monte Carlo*. *Quim. Nova*, Vol. 30, Nº. 7, (2007).

7. Anexo

FICHA DE AVALIAÇÃO DO ESTAGIÁRIO

IDENTIFICAÇÃO DO ALUNO:

NOME: Francis Pereira Nascimento

ENDEREÇO: Rua 2 Nº 39A, Urban I, Jequié, Jequié

TELEFONE: (75) 3662 2267 / (73) 9128 5087

IDENTIFICAÇÃO DA EMPRESA / INSTITUIÇÃO / LABORATÓRIO:

NOME: Lab. Fis. I

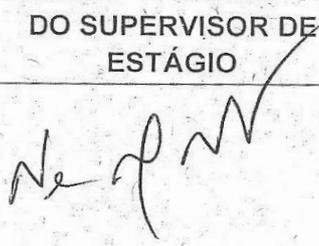
SUPERVISOR DE ESTÁGIO: NEMÉSIO MATOS DE O. NETO.

ENDEREÇO: UESB

TELEFONE DE CONTATO: 8843 7073

PERÍODO DO ESTÁGIO: OUTUBRO a MARÇO de 2013 (P.L. 2012.2)
2012

AVALIAÇÃO DO ESTAGIÁRIO

ATIVIDADE AVALIADA	NOTA	CARIMBO E ASSINATURA DO SUPERVISOR DE ESTÁGIO
Pontualidade	8	 Data: <u>14/03/2013</u>
Assiduidade	8	
Capacidade de auto-avaliação	9	
Postura ética e profissional	10	
Capacidade de comunicação	7	
Interação com a equipe de trabalho	9	
Desempenho nas atividades	8	
NOTA FINAL	8,42	

As notas das avaliações serão de 0 a 10. A nota final é a média das notas individuais.



Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia

Credenciada pelo Decreto Estadual nº. 7.344 de 27.05.1998

PLANO DE ESTÁGIO

IDENTIFICAÇÃO DO ESTUDANTE:

Nome: *Francis Pereira Nassimera*
Curso: *Química Bacharel*
Instituição de Ensino: *UESB - Jequié*

IDENTIFICAÇÃO DO SUPERVISOR DE ESTÁGIO DA EMPRESA:

Nome: *NEMÉSIO M. O. NETO*
Cargo: *PROFESSOR*
Formação: *DR. FÍSICA*

EMPRESA / UNIDADE / LABORATÓRIO: *LAB. Física I*
PERÍODO DO ESTÁGIO: *Outubro de 2012 a Março de 2013.*

PROGRAMAÇÃO DE ATIVIDADES

Outubro a Novembro Revisas Bibliográficas
Novembro/2012 a fevereiro 2013 - *Obtenção resultados
* Encontros / DEBATES COM SUPERVISOR
Fevereiro - Confeccão Relatório
Março - Finalizar Relatório; novos teste simulacionais;
Preparação Apresentação.

Programação de Atividades: atividades a serem executadas no período do estágio.

Data: *16/10/2012*

De acordo:

N. P. N.

Supervisor do estágio da Empresa

Professor Orientador

Francis Pereira Nassimera

Estudante

FOLHA DE FREQUÊNCIA DO ESTAGIÁRIO

IDENTIFICAÇÃO DO ALUNO:

NOME: Francis Pereira Nasornando
 ENDEREÇO: Rua 2 N°39A, Urbis I, Jequiaguá, Jequié
 TELEFONE: (75) 3662 2267 / (73) 91285087

IDENTIFICAÇÃO DA EMPRESA / INSTITUIÇÃO / LABORATÓRIO:

NOME: LABORATÓRIO FÍSICA I
 PRECEPTOR DE ESTÁGIO: NEMESIO M. D. NETO.
 ENDEREÇO: DOE
 PERÍODO DE ESTÁGIO: OUTUBRO/2012 a MARÇO/2013

FOLHA DE FREQUÊNCIA DO ESTAGIÁRIO

Data	Assinatura do Estagiário	Entrada	Saída	Assinatura do Supervisor
05/11/12	Francis P.N.	08:00	17:00	Ne
06/11/12	Francis P.N.	08:00	18:00	Ne
07/11/12	Francis P.N.	13:00	19:00	Ne
08/11/12	Francis P.N.	16:00	20:00	Ne
09/11/12	Francis P.N.	16:00	20:00	Ne
11/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
13/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
14/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
15/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
16/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
17/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
18/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
19/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
20/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
21/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
22/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
23/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
26/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
27/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
28/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
29/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne
30/11/12	Francis P.N.	16:00	21:00	Ne

Ne

FOLHA DE FREQUÊNCIA DO ESTAGIÁRIO

FOLHA DE FREQUÊNCIA DO ESTAGIÁRIO

Data	Assinatura do Estagiário	Entrada	Saída	Assinatura do Supervisor
03/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
04/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
05/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
06/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
07/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
12/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
13/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
14/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
17/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
18/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
19/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
20/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
21/12/12	Francis P.N.	16:00	21:00	N
18/02/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
19/02/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
20/02/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
21/02/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
22/02/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
25/02/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
26/02/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
27/02/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
28/02/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
01/03/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
04/03/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
05/03/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
08/03/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N
11/07/13	Francis P.N.	16:00	21:00	N

Handwritten signature