

# Simulador Computacional para Estudo de Reações Químicas

**Evaniele B. Santos, Jeziel R. Lago, Nemesio M. Oliveira-Neto, Baraquizio B. Nascimento Junior e Alex F. Santos**

Centro de Pesquisa e Desenvolvimento de Software (CPDS)

Departamento de Química e Exatas (DQE)

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB)

Rua José Moreira Sobrinho, Jequiezinho – Jequié, Bahia, Brasil, CEP – 45206-190

evaniele.braga@yahoo.com.br, jezi.lago@hotmail.com, nmon@uesb.edu.br,  
baraquizio@gmail.com, afsantos@uesb.edu.br

**Abstract.** *This article deals with the development of a simulator of reversible and irreversible chemical reactions to assist in the teaching / learning at different levels of education. One of the goals is to develop a simple interface to the user. The simulations are performed via Monte Carlo method.*

**Resumo.** *Neste trabalho abordamos do desenvolvimento de um simulador de reações químicas reversíveis e irreversíveis para auxiliar no processo de ensino/aprendizagem nos diferentes níveis da educação. Um dos objetivos do trabalho é o desenvolvimento de uma interface simples para o usuário. As simulações são realizadas via Método de Monte Carlo.*

## 1. Introdução

Com o notório aumento do uso do computador no processo de ensino, sua utilização como recurso metodológico tornou-se essencial e necessária no processo de ensino e aprendizagem. Na literatura, encontramos diversos trabalhos relacionados à utilização da tecnologia na educação, no ensino fundamental, [Telemberg 2004], [Medeiros e Schimiguel 2012], no ensino médio, [Eichler e Del Pino 2000], [Castilho e Ricci 2006], [Sousa 2012] e no ensino universitário [Silva e Marques 2011].

O computador deve ser utilizado como uma ferramenta de apoio à educação e não uma tecnologia de substituição aos métodos tradicionais de educação. A intenção é utilizá-lo como um instrumento de suporte no ensino para melhorar o entendimento do aluno para o assunto abordado em sala de aula. Portanto, o computador pode ser uma poderosa ferramenta permitindo excelência e grandes avanços no processo de educação.

Na área Científica como Física, Química e Biologia o uso dos recursos oferecidos pelo computador tem sido cada vez mais explorado, principalmente porque nestas áreas do conhecimento, geralmente se percebe maior dificuldade dos alunos para absorverem e compreenderem os assuntos trabalhados em sala de aula apenas com o uso de livros e similares, bem como a lousa. O uso dos recursos de sons e imagens possibilita a maior interação do usuário ao sistema e a simulação computacional permite a representação de fenômenos naturais em um ambiente virtual.

A simulação busca a representação de um sistema real através de modelos teóricos. Desta forma, permite que o aluno estude e entenda os diversos fenômenos naturais sem necessariamente estar em laboratórios específicos, voltados para as aulas

práticas.

De acordo com Medeiros (2002) qualquer simulação computacional está baseada em um modelo de uma situação real, modelo este, matematizado e processado pelo computador, a fim de fornecer animações de uma realidade virtual. Portanto, a construção de uma simulação computacional pressupõe, necessariamente, a existência de um modelo que lhe dá suporte e que lhe confere significado.

Diante deste contexto, desenvolvemos um simulador computacional para estudos de reações químicas. Tal software foi confeccionado a partir de um modelo estocástico baseado no Método de Monte Carlo [Farias, et al, 2013]. Uma vez que em geral professores e estudantes não possuem uma habilidade para programar tal Método de Monte Carlo, o objetivo é proporcionar ao usuário, uma interface amigável que permita a interação com o sistema. Tal interface é um fator importante no desenvolvimento de um sistema, pois esta é responsável pela comunicação do usuário com o software. Assim, o usuário poderá realizar as simulações das reações químicas e entender melhor o assunto abordado, ao invés de apenas observá-las em imagens de livros ou revistas.

Ressaltamos que existem softwares com os quais podemos estudar reações Químicas. Um deles é o Modellus [Teodoro 2003] no qual utiliza modelos via Equações Diferenciais, as quais torna o software inviável para níveis básico de ensino, bem como para o nível universitário nos primeiros semestres dos cursos de graduação em Ciências Naturais e Exatas. Um outro chamado de CINESTEX [Winnischofer et al 2010], utilizado para o estudo de decaimento de estados excitados, possui uma interface que não é de fácil utilização por usuários que não possuem experiência em programação.

## **2. Discussão**

Diante das grandes modificações ocorridas na forma de viver das pessoas, advinda do uso da tecnologia presente no lazer, nos negócios, no trabalho, nas compras, como também nos processos educacionais, tornou-se praticamente impossível realizar atividades, sem o uso das novas tecnologias que também estão presentes em um dos setores de grande relevância: a educação. Neste sentido as simulações computacionais tornam-se a cada dia mais necessárias nas escolas e universidades.

Segundo Miyagi (2006) Um dos maiores desafios da simulação é representar com a maior proximidade possível o mundo real do virtual, tornando a construção do problema a mais realista possível. A simulação traz vantagens quando com um custo menor, se comparado com alguns experimentos, consegue representar o que acontece no mundo real. Na simulação os dados de saída da simulação devem coincidir com as saídas de um sistema real.

As modificações e testes feitos no sistema sem comprometer o modelo real é uma facilidade proporcionada pela simulação para analisar um determinado problema. A simulação não substitui a ação humana, ela serve como um instrumento para facilitar e tornar mais preciso o processo de análise e estudos feitos. Simular é a importação da realidade para um ambiente controlado onde se pode estudar o comportamento da mesma, em várias condições, com o mínimo de riscos físicos e/ou grandes custos envolvidos [Pinho, Montevechi e Marins 2010].

### **2.1 Sistemas**

Um sistema é um conjunto de elementos interligados com certa relação de

funcionalidade, para alcançar um objetivo comum. Mudanças em qualquer um dos elementos que compõem o sistema acarretarão modificações no sistema como um todo, a isto se dá o nome de sinergia, uma forte característica dos sistemas.

Todo sistema é composto por entidades que são objetos de interesse do sistema. Cada entidade possui características e propriedades específicas nomeadas de atributos. Em um sistema a atividade equivale a um período de tempo de duração específica, o evento é o elemento designador de uma ocorrência que pode gerar qualquer alteração no sistema. O estado de um sistema ou variáveis de estado são as variáveis que descrevem o comportamento do sistema.

## **2.2 Modelo**

Inicialmente para compreensão do termo modelo, vamos considerar a definição de um sistema segundo a ênfase estudada, simulação. Um sistema é um conjunto de itens que possuem algum tipo de relação, sendo esta o objeto de estudo. Logo, um modelo é a descrição deste sistema, levando em consideração os aspectos relevantes do sistema na simulação, com o objetivo de alcançar a maior proximidade possível do sistema com a realidade.

Os modelos servem para solucionar um problema específico que teria um alto custo se fosse utilizada uma solução experimental, vale ressaltar que o experimento se diferencia da simulação, pois no primeiro caso qualquer mudança será feita no próprio sistema, enquanto a simulação as mudanças serão realizadas sobre uma representação do sistema, neste caso uma representação computacional.

O exercício de um modelo que representa um sistema permite fazer uma estimativa do comportamento futuro deste sistema. Ao exercício de um modelo dá-se o nome de simulação [Mello 2007].

## **2.3 Simulação**

A simulação pode ser descrita como a ação de “imitar” um processo real, permitindo a representação, de maneira artificial, de determinada situação para análise de suas características. Dentre outras, a principal vantagem da simulação é a possibilidade de analisar um problema real sem interferir no mesmo, sendo que alteração realizada na simulação não alterará em nada o caso real. Outra vantagem é representar no mundo virtual, com menor custo, o que acontece no mundo real.

Simular é o processo de projetar um modelo computacional de um sistema real e conduzir experimentos com este modelo com o propósito de entender seu comportamento e/ou avaliar estratégias para sua operação [Freitas 2008].

Atualmente, e em particular, devido à complexidade dos eventos naturais que ocorrem nas Ciências tais como em Química, Física e Biologia, a simulação tem sido um dos meios mais comuns para estudo de tais problemas pois permite a análise de situações que seriam impossíveis de serem observadas e analisadas no mundo real.

## **2.4 Reações Químicas**

Uma reação química pode ser definida como a transformação sofrida por uma ou mais substâncias, as quais são classificadas como reagentes e produtos. Os reagentes são as substâncias que irão reagir e sofrer alteração e os produtos, as substâncias resultantes da reação.

As reações podem ser reversíveis ou irreversíveis. As reações reversíveis são reações que ocorrem em dois sentidos, tanto na direção direta como na inversa, neste caso os reagentes e os produtos podendo assumir ambos os mesmos papéis. As reações irreversíveis ocorrem em um único sentido, apenas os reagentes são convertidos em produtos, não ocorrendo o processo inverso. Ambas as reações podem ser visualizadas em <http://www.educadores.diaadia.pr.gov.br>.

### **3. Definição do problema**

Inicialmente foi preciso definir ou entender o problema proposto, se considera impossível resolver um problema sem antes conhecê-lo a fundo, isto se faz necessário para não se perder tempo resolvendo uma questão errada. No laboratório de Física da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB) – existe um programa computacional baseado no Método de Monte Carlo que simula reações químicas do tipo reversível e irreversível; o mesmo foi desenvolvido na linguagem de programação FORTRAN.

As simulações são executadas através do terminal do sistema operacional Linux, logo é pré-requisito para o usuário do sistema de simulação um conhecimento prévio sobre alguns comandos do Linux. A ideia básica consiste no desenvolvimento de um ambiente que proporcione uma interface simples para o usuário, exigindo-lhe o mínimo de conhecimento em informática.

#### **3.1 Desenvolvimento**

No desenvolvimento de sistemas de simulação a escolha da ferramenta pode variar de acordo com as características, como flexibilidade, facilidade de uso, dentre outros.

A linguagem utilizada no desenvolvimento do simulador foi JAVA, que de acordo com especificações acima pode ser caracterizada como uma linguagem de aplicação geral. Optou-se por esta linguagem, pois a interface gráfica seria desenvolvida em Java que oferece diversas bibliotecas destinadas a realizar a comunicação gráfica entre usuário e máquina/sistema.

#### **3.2 Verificação e validação do modelo**

São duas fases muito importantes durante o desenvolvimento de um sistema de simulação, a verificação e a validação.

A verificação é a etapa onde são analisados os resultados obtidos, verificam-se os parâmetros de saída do sistema analisando se os mesmos são os esperados, para isto são realizados vários testes de verificação para concluir se o mesmo está funcionando corretamente.

A validação consiste em determinar se o modelo simulado representa o sistema real com suas características relevantes; nesta etapa são comparados os parâmetros do sistema real com os parâmetros do simulador. A validação busca mostrar que o simulador realmente é parecido com o sistema real, levando o usuário a acreditar nisto.

#### **3.3 Método de Monte Carlo**

O Método de Monte Carlo (MMC) originou-se da pesquisa de dois cientistas: Von Neumann e Ulam [Binder, Heermann 1992]. O método surgiu pelo uso da aleatoriedade no Monte Carlo Cassino em Monte Carlo, Mônaco. Inicialmente o Método de Monte

Carlo foi fundamental para simulações no projeto de Manhattan, um programa de investigação durante a segunda guerra mundial que originou a bomba atômica. Atualmente o método é mais geral, utilizado pelas diversas Ciências como Física e Química na resolução de problemas através do uso de números aleatórios e estatísticos.

O MMC é um método estocástico, ou seja, um método probabilístico utilizado em simulações de eventos de ordem aleatória, onde pelo menos uma de suas características operacionais seja dada segundo alguma função de probabilidade. Ele permite determinar características probabilísticas de certa população a partir de nova amostragem, por importância, escolhida aleatoriamente da mesma população. Segundo Luz (2008, p. 21), isto permite apresentar soluções aproximadas para uma grande variedade de problemas físicos e matemáticos por meio de experimentos numéricos que utilizam números aleatórios ou pseudoaleatórios. Esta técnica pode ser aplicada tanto a problemas de natureza probabilística quanto a problemas determinísticos.

O MMC é um método de amostragem artificial utilizado na solução de experimentos aleatórios onde se tem conhecimento das distribuições de probabilidade das variáveis envolvidas. Tem sido utilizado, por exemplo, para determinar a confiabilidade de sistemas estruturais [Barbosa, Freitas e Neves 2005].

O algoritmo, ou dinâmica, de Metropolis é o mais utilizado nas simulações que utilizam o método de Monte Carlo. O mesmo define as taxas de transições entre os estados/configurações acessíveis ao sistema em estudo. Tais taxas, ou probabilidades, são dadas pelo peso de Boltzmann [Luz 2008].

### 3.4 Algoritmo Metropolis

O algoritmo de Metropolis foi introduzido por Nicolas Metropolis e W. K. Hastings em 1953. Este algoritmo admite valores esperados das características do sistema a partir de uma média.

O algoritmo de Metropolis pode ser implementado através do seguinte conjunto de regras [Luz 2008]:

- **Passo 1:** Geração de uma configuração inicial aleatória, ou seja, com valores aleatórios para todos os graus de liberdade do sistema, respeitando as suas restrições. Atribui-se o índice  $m$  a essa configuração, que é aceita para a amostra;
- **Passo 2:** Geração de uma nova configuração tentativa de índice  $n$ , resultado de pequenas alterações nas coordenadas da configuração  $m$ ;
- **Passo 3:** Se a energia da configuração  $n$  for menor que a da configuração  $m$ , inclusive a configuração  $n$  na amostra, e atribui-se a ela o índice  $m$  a partir desse momento. Caso contrário, realizam-se os passos descritos nos itens 4 e 5;
- **Passo 4:** Gera-se um número aleatório entre 0 e 1;
- **Passo 5:** Se esse número aleatório for menor que  $P_n/P_m$ , aceita-se na amostra a configuração  $n$ . Caso contrário, o índice  $m$  permanece designando a configuração original;
- Repete-se os passos 2 e 3 até que algum critério de parada seja satisfeito.

## 4 Simulador

O Simulador de Reações Químicas (SRQ) é um software *desktop*, gratuito destinado a realizar simulação, específico para realizar reações químicas e permite a simulação de reações reversíveis e não reversíveis.

### 4.1 Funcionalidades do SRQ

As funcionalidades do simulador podem ser divididas em duas etapas: inserção dos parâmetros necessários para gerar a simulação e geração dos gráficos.

- **Inserção de parâmetros:** Nesta etapa o usuário tem a função de inserir os dados necessários para gerar a simulação. Os dados são: **tempo** em que será analisada a reação química (execução da simulação); **temperatura** em que a reação vai ocorrer; e o valor  $N$  do número de moléculas da reação.
- **Geração dos Gráficos:** Após inserir os dados solicitados pelo sistema, o usuário pode gerar a simulação que será representada por gráficos mostrando o comportamento da reação química simulada a partir dos parâmetros inseridos.

Realizadas as etapas acima o usuário pode fazer os estudos e tirar conclusões dos resultados obtidos sobre os parâmetros que realizou a simulação.

### 4.2 Estrutura do Simulador

Todos componentes estão dispostos na tela inicial do simulador como exibe a Figura 1. Na barra superior da tela do SRQ fica o “MenuSair” exposto na Figura 2. A função deste menu é possibilitar ao usuário a saída do sistema, que pode acontecer a qualquer momento, ou permanecer no sistema e seguir no uso, realizando as simulações que desejar estudar.

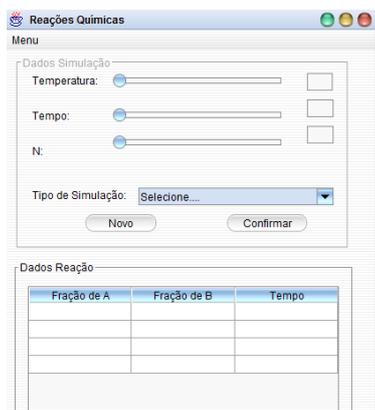


Figura 1. Tela inicial do simulador

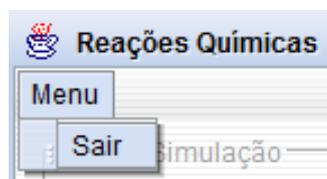


Figura 2. Menu sair

Na parte central da tela estão dispostos os *Slider's* (Figura 3) nos quais o usuário pode entrar com os dados necessários para realizar as simulações. Nestes slider's, o usuário manipula o mouse livremente com os valores que deseja para cada variável de entrada, variando de zero até o limite determinado pelas equações das simulações, para cada variável existe um valor mínimo e um valor máximo.

Após preencher todos os dados necessários para realizar as simulações, o usuário deve escolher o tipo de simulação que deseja realizar, selecionando a opção que deseja: reversível ou irreversível, como mostra Figura 4.

Quando a simulação é gerada, os dados são lançados e exibidos numa tabela situada na parte inferior da tela, exibida na Figura 5, onde ficam os valores das frações em mols de A e B, bem como o instante de tempo relacionado. Isto possibilita o estudo dos dados gerados pela simulação em cada instante de tempo, que um ponto importante quando se estuda cinética Química.

A partir destes resultados o software gera gráficos representando o comportamento dinâmico das frações em mols de cada substância, permitindo a análise da reação dada para a temperatura previamente selecionada. Cada gráfico é exibido em uma tela individualmente, sendo assim, o usuário pode gerar várias simulações com dados diferentes para comparar os resultados e tirar suas conclusões durante os estudos. Por exemplo, pode observar a influência da temperatura na cinética da reação (velocidade, perfil de conversão, etc.).

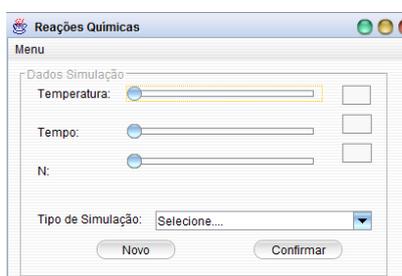


Figura 3. Slider's para entrada de dados

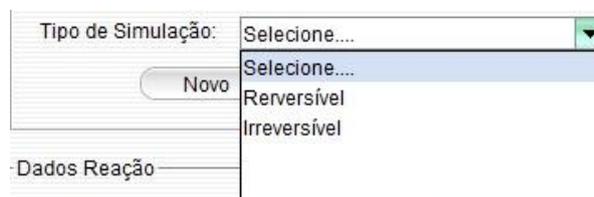


Figura 4. Campo de seleção do tipo de reação

Dados Reação		
Fração de A	Fração de B	Tempo

Figura 5. Tabela onde são lançados os dados gerados pela simulação

## 5. Validação

Com o objetivo de verificar a validade do simulador algumas simulações foram realizadas e seus resultados comparados com os resultados da equação teórica responsável pelos gráficos gerados.

### 5.1 Simulação do Tipo Irreversível

Para validação das simulações irreversíveis foram gerados, em um mesmo gráfico, o resultado dos valores simulados e os resultados dos valores teóricos [Atkins 1994] que fundamentam a equação responsável pelas simulações geradas pelo simulador. A Tabela 1 ilustra os parâmetros utilizados nas simulações 1 e 2 para o tipo irreversível.

Tabela 1. Parâmetros da Simulação do Tipo Irreversível.

Simulação	N	Tempo	Temperatura
1	1000	100	2
2	1000	100	4

A Figura 6 e a Figura 7 ilustram os resultados das simulações. A linha de cor vermelha representa a ocorrência dos valores gerados durante a simulação, enquanto que a linha de cor azul representa os valores gerados pela equação teórica, base para as

simulações geradas.

É fácil perceber a proximidade entre o resultado simulado e o teórico, existe certa dificuldade em distinguir as duas linhas mostradas nos gráficos das figuras acima, pois ambas as linhas ficaram sobrepostas, devido a poucas variações que ocorrem, sendo quase imperceptíveis.



Figura 6. Simulação 1



Figura 7. Simulação 2

## 5.2 Simulação do Tipo Reversível

Para a validação das simulações do tipo reversível, comparamos os resultados existentes na literatura (Figura 8) com os resultados gerados pelo simulador (Figura 9). Nas Figuras a seguir, pode-se notar a influência da variável Energia durante as simulações.

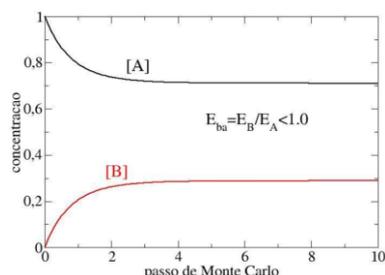


Figura 8. Energia de ativação ( $E_{ba}$ ) < 1. Resultado da Literatura

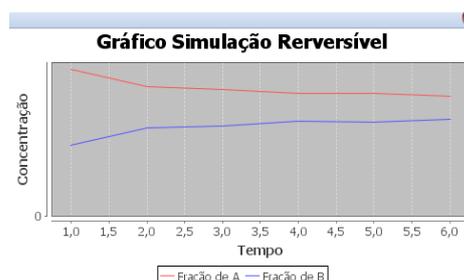


Figura 9. Energia de ativação ( $E_{ba}$ ) < 1. Resultado Simulado

As duas figuras acima exibem comportamento qualitativo idêntico; ambas representam uma reação reversível reagente favorecido a qual ocorre para um valor de  $E_{ba} < 1$ .

Para uma reação reversível com  $E_{ba} > 1$ , realizamos as simulações a seguir e comparamos os resultados da literatura (Figura 10) com o simulado no software (Figura 11). Perceba que os resultados possuem comportamento qualitativo semelhante.

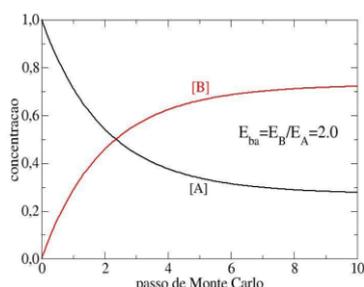


Figura 10. Energia de ativação ( $E_{ba}$ ) > 1. Resultado da Literatura

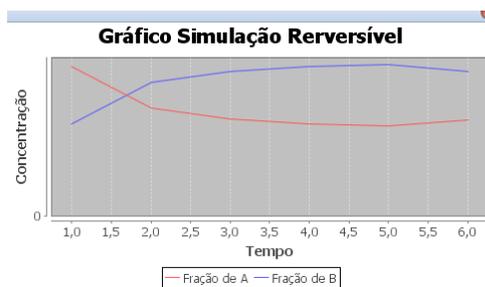
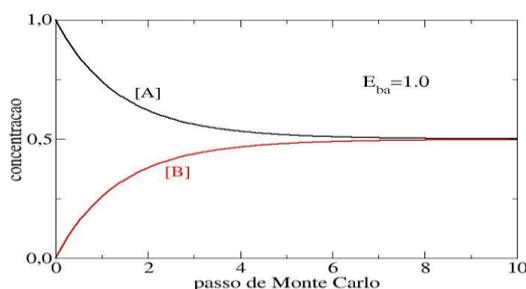


Figura 11. Energia de ativação ( $E_{ba}$ ) > 1. Resultado Simulado

Para uma reação reversível com valor de Energia igual a 1 ( $E_{ba} = 1$ ), realizamos

as simulações a seguir e comparamos os resultados da literatura (Figura 10) com o simulado no software (Figura 11). Perceba que os resultados são similares.



**Figura 12. Energia de ativação Eba = 1. Resultado da Literatura**



**Figura 13. Energia de ativação Eba = 1. Resultado Simulado**

Como podemos observar, os resultados simulados são qualitativamente e quantitativamente similares aos encontrados na literatura. A partir de comparações com a monografia de Farias (2012), foi possível chegar a validade do simulador, sendo o mesmo condizente com a proposta inicial de simular reações químicas, verificando-se a influência de fatores como energia de ativação e temperatura nas reações tanto reversíveis quanto irreversíveis.

## 6. Conclusões

Neste trabalho, apresentamos um simulador computacional para estudo de reações químicas. O sistema proporcionará aos professores e alunos algumas melhorias no processo de ensino e aprendizagem respectivamente, pois através do computador é possível estudar o comportamento dos elementos que compõe as reações de maneira mais precisa através dos gráficos dispostos com a simulação.

Se tratando das pesquisas científicas, o sistema contribuirá possibilitando o estudo de reações com parâmetros de valores altos, algo arriscado de ser feito de maneira real em laboratórios reais, além de ser mais custoso. De uma maneira geral, o sistema trará benefícios em níveis acadêmicos, pois permite a simulação das reações independente do local, irrestrito apenas a laboratórios como acontece com os experimentos reais, bastará apenas um computador com a aplicação instalada.

## Referências

- Barbosa, A. H., Freitas, M. S. R., Neves, F. A. (2005). Confiabilidade estrutural utilizando o método de Monte Carlo e redes neurais. Revista Escola de Minas, vol.55, nº 3, jul/set 2005.
- Farias, R. R. (2012). Uma análise das reações químicas homogêneas e elementares via método de Monte Carlo. Monografia para obtenção de grau de Licenciatura em Química. Universidade estadual do Sudoeste da Bahia. Jequié.
- Freitas, P. J. F. (2008). Introdução à Modelagem e Simulação de Sistemas, Ed. 2ª.
- Luz, L. L. (2008). Avaliação da Estratégia de Implementação Concorrente do Algoritmo de Random Walker para o Modelo de Potts Celular. Dissertação para obtenção de título de Graduação. Universidade Estadual de Pelotas. Pelotas.

- Medeiros, A., Medeiros, C. L. (2002). Possibilidades e limitações das Simulações Computacionais no Ensino de Física. *Revista Brasileira do Ensino de Física*, São Paulo, vol. 24, nº. 2, p. 77-86, Jun.
- Mello, A. B. (2007). *Modelagem e Simulação de Sistemas*. Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões. Departamento de Engenharias e Ciência da Computação. Santo Ângelo. Última atualização: 10/10/2007
- Miyage, P. E. (2006). *Introdução à Simulação Discreta*. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecatrônica e de Sistemas Mecânicos. São Paulo.
- Pinho, A. F., Montevechi, J. A. B., Maris, F. A. S. (2010). Metodologia para utilização de Algoritmos Genéticos em Modelos de Simulação Computacional em Ambientes de Manufatura. Pesquisa divulgada na Edição Especial – Projeto Pró Engenharias. *Revista P&D em Engenharia de Produção* V. 08 N. 01.
- Telemberg, T. (2004). *Tecnologia na educação: As representações de docentes de séries iniciais*. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção, UFSC, Florianópolis.
- Medeiros, M. O. e Schimiguel, J. (2012). Uma abordagem para avaliação de jogos educacionais: Ênfase no ensino fundamental. *Anais do 23º Simpósio Brasileiro de Informática na Educação*.
- Castilho, M. I. e Ricci, T. F. (2006). O uso de animações como elemento motivador de Aprendizagem, *Experiências em Ensino de Ciências*, V1(2), pp. 10-17.
- Sousa, J. M. (2012). *Objetos de Aprendizagem e o Ensino de Conceitos de eletromagnetismo no ensino médio*. Programa de pós-graduação em ensino de ciências – Mestrado Profissional, Universidade Federal de Itajubá.
- Silva, I. e Marques, I. S. (2011). Conhecimentos e barreiras na utilização dos recursos da Tecnologia da Informação e Comunicação por docentes de Enfermagem. *J. Health Inform. Jan-Mar*; 3(1): 3-8.
- Eichler, M., Del Pino, J. C. (2000). Carbópolis: um software para a educação em Química. *Química Nova na Escola*, n. 11, Maio 2000.
- Farias, R. R., Cardoso, L. A. M., Oliveira-Neto, N. M., Nascimento Jr., B. B. . Estudo de Reações Química Homogêneas Via o Método de Monte Carlo, *Quim. Nova*, Vol. 36, n. 5, 729-733, 2013.
- Binder, K.; Heermann, D. W.; *Monte Carlo Simulation and Statistical Physics*, 2nd ed., Springer-Verlag: New York, 1992.
- Teodoro, V. D. (2003). *Modellus: Learning physics with mathematical modelling*. PhD Thesis, Lisboa: Universidade Nova de Lisboa.
- Winnischofer, H. et al. (2010). *Quim. Nova*, 33, 225.
- Atkins, P. W. (1994). *Physical Chemistry*, 5th ed., Oxford University Press: Oxford.