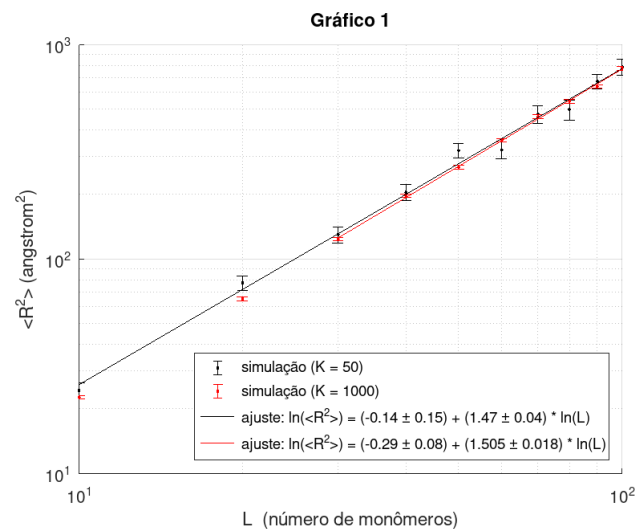


Polímeros Lineares
Parte A - Geometria (10 pontos)
Questão A.1
3pts

L	K	$\langle R^2 \rangle$ (\AA^2)	$\sigma_{\langle R^2 \rangle}$ (\AA^2)
10	50	24.4	2.2
20	50	77.2	6.1
30	50	130	11
40	50	205	17
50	50	320	26
60	50	322	29
70	50	473	44
80	50	498	53
90	50	674	53
100	50	787	70

Questão A.2
5pts

Questão A.3
2pts

 Parâmetros de $R = aL^{2\nu}$ (obtidos com amostragem $K = 1000$):

- $\nu = 0.753 \pm 0.009$
- $a = (0.76 \pm 0.06) \text{\AA}^2$

 (O comportamento do sistema é bem conhecido. Em <https://polymerdatabase.com/polymer%20physics/SAW.html> obtém-se $\nu = 3/4$ e $a = 0.771$ U.A.)

Parte B - Probabilidades de obtenção na amostragem simples (12 pontos)
Questão B.1
1pts

- O polímero pode ter até 4 monômeros.

O polímero abaixo com $L = 4$ cresce no sentido de se auto-interceptar com o menor número de monômeros. A partir de $L = 5$ isso será possível.


Questão B.2
2pts

k	possível sequência	$N_{it,k}$
1	FFV	3
2	FFFFFFV	6
3	V	1
K	FFFV	4

- F = polímero descartado (fracasso)
- V = polímero aproveitado (sucesso)

Número total de polímeros gerados em K realizações do experimento:

$$N_T = \sum_k^K N_{it,k}. \quad (1)$$

Em cada realização ocorre um sucesso, logo, probabilidade de sucesso é

$$P = \frac{K}{N_T}. \quad (2)$$

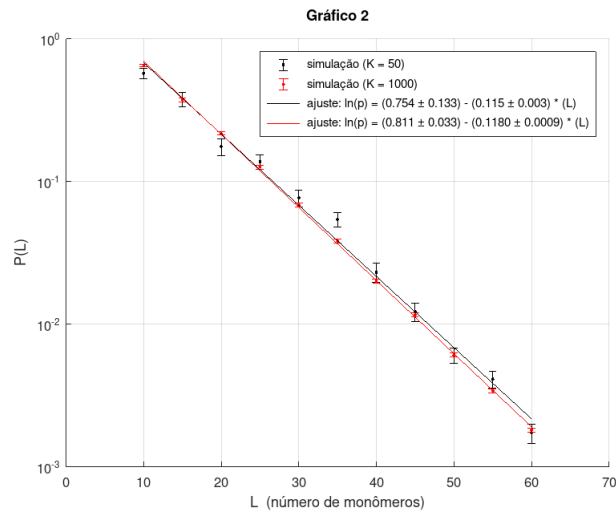
O número médio de iterações é

$$\langle N_{it} \rangle = \frac{\sum_k^K N_{it,k}}{K} = \frac{N_T}{K}, \quad (3)$$

que é o inverso da definição de probabilidade dada acima.

Questão B.3
3pts

L	$\langle N_{it} \rangle$	$\sigma_{\langle N_{it} \rangle}$	P_L	σ_{P_L}
10	1.76	0.14	0.57	0.05
15	2.68	0.31	0.37	0.04
20	5.72	0.77	0.174	0.024
25	7.30	0.87	0.136	0.016
30	13.1	1.7	0.076	0.010
35	18.5	2.1	0.054	0.006
40	43.4	6.5	0.023	0.004
45	82	12	0.0121	0.0017
50	166	20	0.0060	0.0007
55	244	33	0.0041	0.0007
60	581	91	0.0017	0.0003

Questão B.4
3pts

Questão B.5
2pts

Parâmetros λ e C de $P_L = C \exp(-\lambda L)$ obtidos do ajuste (amostragem $K = 1000$):

- $\lambda = 0.1180 \pm 0.0009$
- $C = (2.25 \pm 0.07)$

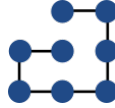
Questão B.6
1pts

$$P_{300} = 2.25 \exp(-0.1180 \cdot 300) = 9.51 \times 10^{-16} \approx 10^{-15}.$$

Número médio de iterações para obter um polímero com $L = 300$, por amostragem simples, é de aproximadamente $\approx 10^{15}$. Isso é 10 ordens de grandeza maior que limite máximo de 5×10^5 do app, logo, impraticável.

Parte C - Amostragem direcionada de polímeros lineares (6 pontos)
Questão C.1
1pts

- São necessários pelo menos 8 monômeros.


Questão C.2
2pts

Com $K = 50$ iterações $\langle N_{it,300} \rangle = 416 \pm 62$, logo, $P_{300} = (2.2 \pm 0.3) \times 10^{-3}$.

É 12 ordens de grandeza maior que a probabilidade por amostragem simples.

Questão C.3
3pts

A tabela apresenta os valores de 10 simulações

k	R^2 (\AA^2)	W	k	R^2 (\AA^2)	W
1	953	2.928e-45	6	3185	6.855e-46
2	3089	7.044e-48	7	1945	4.458e-48
3	421	5.655e-52	8	2197	2.036e-50
4	2621	2.603e-45	9	1385	8.328e-44
5	169	3.900e-44	10	1949	8.666e-45

Usando os dados da tabela, determina-se a média ponderada através de

$$\langle R_{300}^2 \rangle = \frac{\sum_k^{10} R_k^2 W_k}{\sum_k^{10} W_k}. \quad (4)$$

O resultado é $\langle R_{300}^2 \rangle = 1098.2 \text{ \AA}^2$.

Polímeros não Lineares

Parte D - Dimensão fractal (12 pontos)

Questão D.1

2pts

- Há apenas 1 possibilidade para a localização do 1º monômero.
- É possível acrescentar cada novo monômero em 4 posições.
- O número total de configurações de um polímero com L monômeros é $4^{(L-1)}$.

Questão D.2

3pts



- Dimensão fractal aumenta/diminui com grau de compactação/elongamento.

Questão D.3

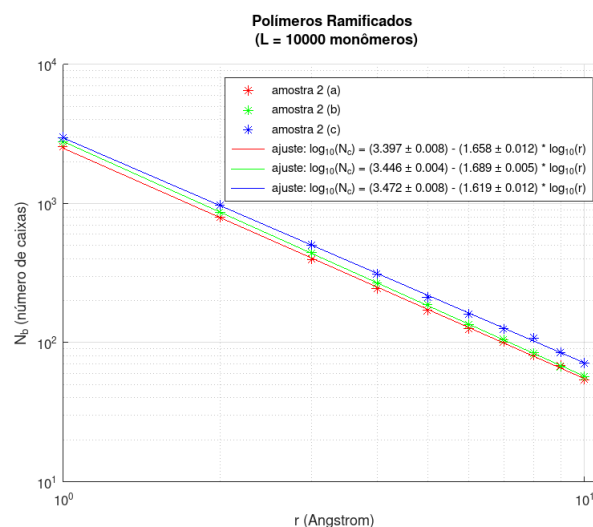
3pts

Tabela 3 - amostra 2 (c)

r (Å)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N_c	2979	975	502	312	211	160	125	108	85	71

Questão D.4

3pts



Questão D.5

3pts

(Usando ajustes sobre dados da amostra 2 (c))

- $d = 1.619 \pm 0.012$
- $k = [(25 \pm 5) \times 10^4] (\text{Å})^{1.619}$