

Neste trabalho desenvolvemos simulações de Monte Carlo para um modelo de reação química do tipo $A + B \leftrightarrow C$ em duas dimensões. Aqui as moléculas são representadas por sítios ocupados em uma rede quadrada, que podem difundir e reagir entre si de acordo com taxas de reação do tipo lei de Arrhenius. Assim, para uma dada temperatura e concentração inicial o sistema evolui para um estado estacionário compatível com as taxas de reação K_1 e K_2 das reações direta e inversa, respectivamente. Durante a simulação, as moléculas do tipo A (B) difundem para um sítio primeiro vizinho se ele estiver vazio, ou, caso ele esteja ocupado por uma molécula do tipo B (A), reagem com taxa K_1 . Da mesma forma, as moléculas do tipo C podem difundir para um sítio vizinho, ou se dissociar em A+B com uma taxa K_2 . Para este sistema obtivemos a evolução temporal das concentrações de cada componente, bem como os tempos de relaxação para pequenas perturbações na temperatura e na concentração. Comparamos os dados das simulações com os resultados obtidos pelas equações diferenciais das velocidades de reação, e verificamos que para baixas densidades os resultados são semelhantes. Em altas concentrações, o impedimento espacial imposto pela rede dificulta as reações, deslocando seu equilíbrio. Verificamos também que o processo de relaxação é de primeira ordem e que o tempo de relaxação em função da temperatura para pequenas perturbações nos parâmetros do sistema varia como uma lei de potências.