

UNIVERSIDADE FEDERAL DA INTEGRAÇÃO LATINO AMERICANA

Programa para o cálculo de fluxos de população correspondentes aos processos Vibration-Vibration e Vibration-Translation

¹SANTOS, A. A., ²GARRIDO, J. D. A., ²KONZEN, P. H. A., ¹SILVA, E. S. J.

¹Bolsista e acadêmico de Engenharia Civil de Infraestrutura ²Professor da Universidade Federal da Integração Latino Americana Email: andrey.santos@unila.edu.br; Juan.garrido@unila.edu.br; pedro.konzen@unila.edu.br; edivaldo.junior@unila.edu.br

Introdução – Motivação

No presente trabalho estuda-se espécies moleculares vibracionalmente excitadas, em condições de desequilíbrio termodinâmico. A motivação geral do presente trabalho é dada pela diferença existente entre as medições dos perfis de concentração do ozônio estratosférico e aquelas calculadas teoricamente utilizando o mecanismo de

Chapman (problema do "déficit de Ozônio")

O MODELO

$$\frac{df_{v}}{dt} = -\left[\Pi_{v+1} - \Pi_{v}\right]$$

$$\begin{split} \Pi_{v+1} = & \sum_{v'=0}^{v'd} Q_{v+1,v-1}^{v',v'+1} [f_v f_{v'+1} \exp \frac{2\Delta E(v-v')}{kT} - f_{v+1} f_{v'}] \\ + & P_{v+1,v} [f_v \exp \frac{-E_1 + 2\Delta Ev}{kT} - f_{v+1}] \end{split}$$

$$\begin{split} \Pi_{v} = & \sum_{v'=0}^{v'd} Q_{v,v-1}^{v'-1,v'} [f_{v-1}f_{v'} \exp \frac{2\Delta E(v-v')}{kT} - f_{v}f_{v'-1}] \\ + & P_{v,v-1} [f_{v-1} \exp \frac{-E_1 + 2\Delta E(v-1)}{kT} - f_{v}] \end{split}$$

$$\overline{Q_{v,v-1}^{v'-1,v'}} = \overline{Q_{1,0}^{0,1}}(v+1)(v'+1)\exp(-\delta_{v-v}|v-v'|)$$

$$\overline{P_{\nu+1,\nu}} = \overline{P_{1,0}}(\nu+1)\exp{-\delta_{\nu-t}\nu}$$

OZONE1DP

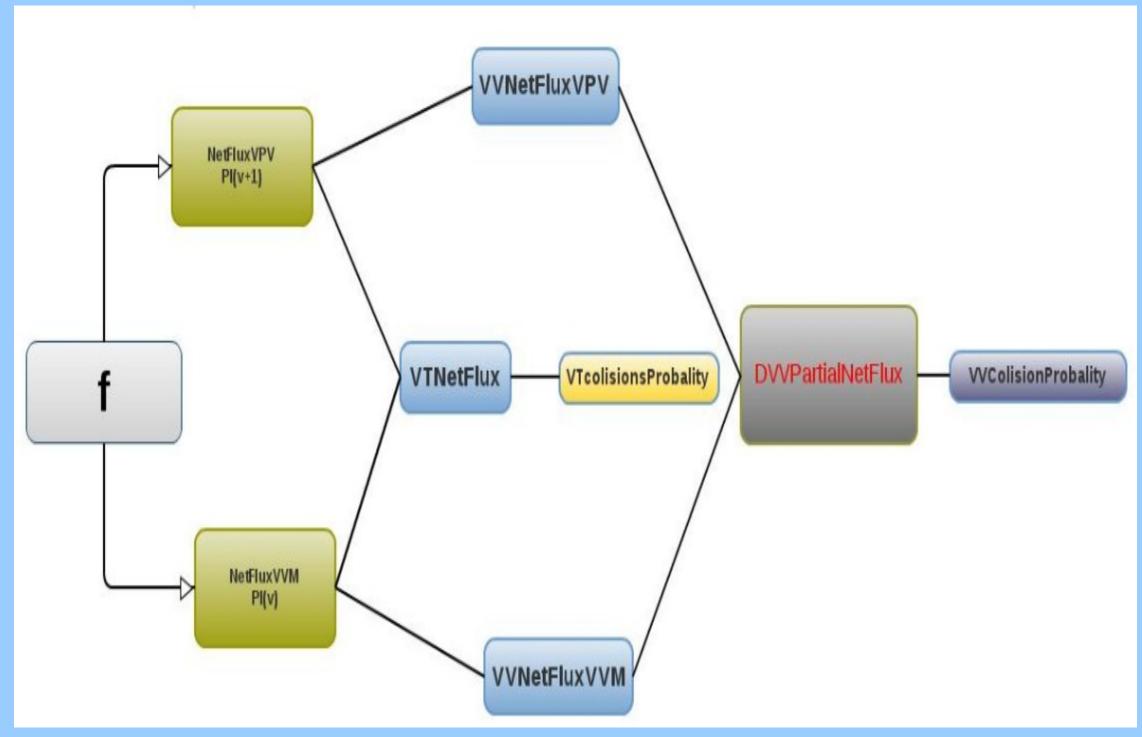


FIGURA 1: Estrutura de implementação

FUNÇÕES DE DISTRIBUIÇÃO

Função de distribuição de Treanor:

$$f_{(v,T)} = f_0 \exp \left[-v \left(\frac{E_1}{T_1} - \frac{\Delta E}{T} (v-1) \right) \right]$$

Onde:

$$T_1 = E_1 \left[\ln \left(\frac{f_0}{f_1} \right) \right]^{-1}$$

Função de distribuição de Bolztmann:

-6 In(fv/f0) level

-12

T=750K

FIGURA 4: Gráfico da função de distribuição de

boltzmann e da função de distribuição de treanor.

FIGURA 6: Processos Vibration-Vibration do gás N-N.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

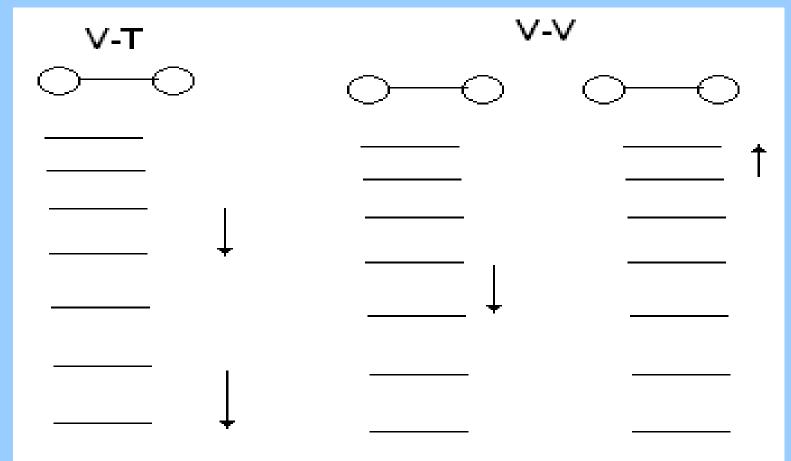


FIGURA 2: Esquema de representação da troca de um *quanto*.

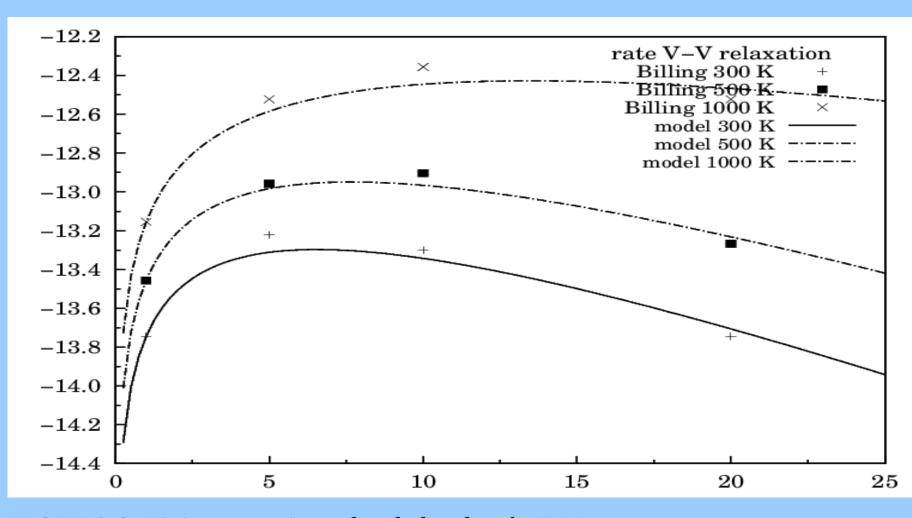


FIGURA 3: Fitting para ajuste dos dados do gás N-N.

T1=4102K

C.I. Boltzmann T=6000K

Treanor T=750, T1=4102K

Num. Modelo VV T=750K Num. Modelo VV-VT T=750

Boltzmann T=750

T=6000K

level

20

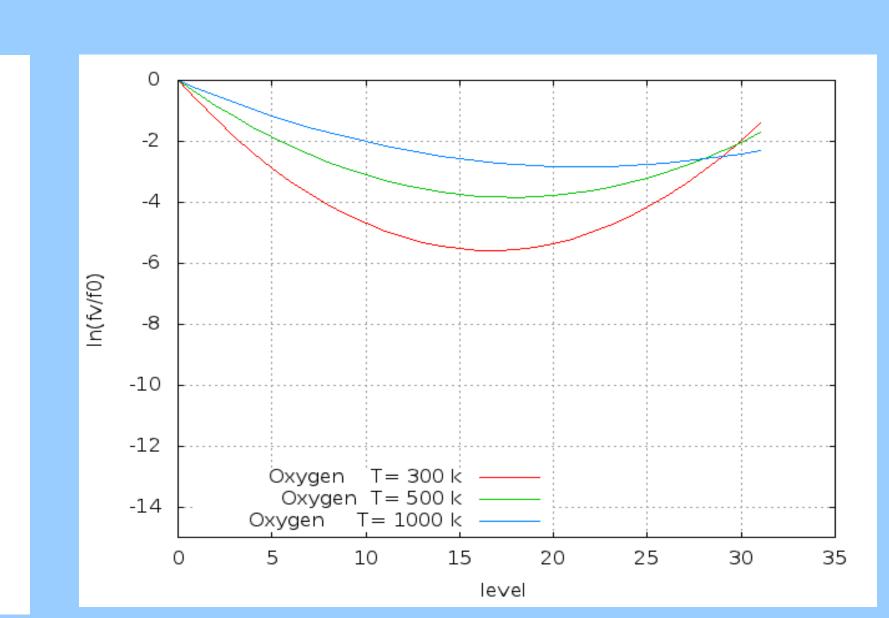


FIGURA 5: Processos Vibration-Vibration do gás O-O

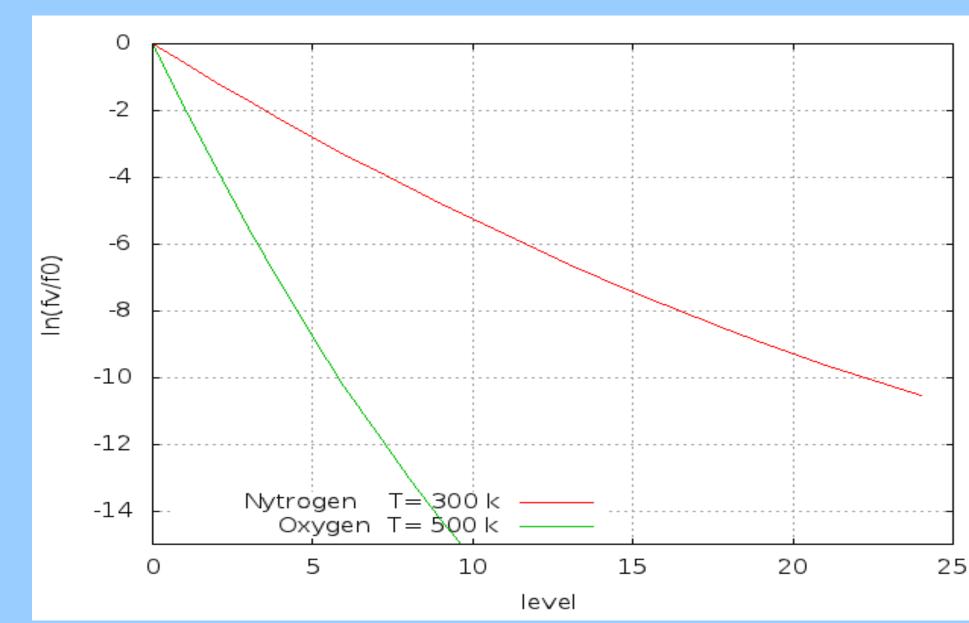


FIGURA 7: Processos Vibration-Vibration E Vibration-Translation do gás N-N.

$f_{v} = f_{0} \exp\left(\frac{E_{v}}{kT}\right)$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Bray, K.N.C; J. Phys. B, 1, 1968, 705-717. [2] Treanor, C.E.; Rich, J.W.; Rehm, R.G.; J. Chem. Phys., 1968, 48(4), 1798-1807.

AGRADECIMENTOS E FINANCIAMENTOS

Agradecimento aos professores Juan de Dios e Pedro incentivo, acompanhamento Konzen pelo compreensão constante. Trabalho financiado pela Universidade Federal da Integração Latino Americana - UNILA