



Sessão de Física e Química
Dia 05/06/12 - 14h00 às 18h00
Unila-Centro - Sala 14 - 3º Piso



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

Andrey Araújo dos Santos

Bolsista do Programa de Bolsas de Iniciação Científica da UNILA (PROBIC)

Contato: andrey.santos@unila.edu.br

Juan de Dios Garrido Arrate

Orientador

Pedro Henrique Almeida Konzen

Coorientador

RESUMO

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). Para o estudo dos mecanismos foi desenvolvido um pacote computacional para resolução dos modelos matemáticos, o pacote é chamado de OZONE1DP. O pacote consiste numa interface orientada-a-objeto paralelizada que faz uso do pacote computacional livre CVODE, capaz de solucionar equações diferenciais ordinárias não lineares de primeiro ordem com condições iniciais. No pacote computacional não consideramos a variação de temperatura durante os processos, embora seja conhecida a possibilidade de sua ocorrência. Tomamos apenas a temperatura inicial de vibração e de traslação. O pacote foi estruturado em forma de blocos que simulam os processos independentes. Foram utilizadas na investigação gases diatômicos homogêneos não-reativos. Para a validação do programa foram utilizados problemas que envolvessem processos *vibratrion-vibration*, e que envolvessem processos *vibration-vibration* e *vibration-translation*, usando moléculas do gás Nitrogênio ou do gás Oxigênio. A validação foi facilitada pelo fato da existência na literatura das soluções analíticas dos problemas em estudo. As simulações realizadas cobrem um adequado conjunto de temperaturas iniciais e, por tanto, de condições iniciais de excitação. Os processos foram simulados até alcançar o estado de quase-equilíbrio. Para o estudo dos processos *vibration-vibration* foi usado o modelo de trocas de um quanto, segundo o qual o ganho de um quanto de uma molécula é igual a perda de um quanto por outra molécula. Dentro desse modelo foi verificado que se chega a uma distribuição de Treanor de quase-equilíbrio como é indicado na literatura. Nos processos *vibration-translation* temos os processos de colisão entre duas moléculas, onde um quanto de energia passa dos graus de liberdade vibracional à traslação molecular, isso corresponde a variação de temperatura do sistema, nesses processos a solução quase-estacionária leva a uma função de distribuição de Boltzmann. Os modelos estudados consideram o modelo anarmônico das moléculas diatômicas.

Palavras-chave: química da atmosfera, cinética química, físico-química, déficit de ozônio, simulação numérica.