

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

$$\frac{df_v}{dt} = -[\Pi_{v+1} - \Pi_v]$$

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

$$\Pi_v = \sum_{v'=0}^{v-1} Q_{v,v'}^{v'-1,v'} [f_{v-1} f_{v'} \exp \frac{2\Delta E(v-v')}{kT} - f_v f_{v'-1}] + P_{v,v-1} [f_{v-1} \exp \frac{-E_1 + 2\Delta E(v-1)}{kT} - f_v]$$

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

$$P_{v+1,v} = P_{1,0} (v+1) \exp -\delta_{v-1} v$$

OZONE1DP

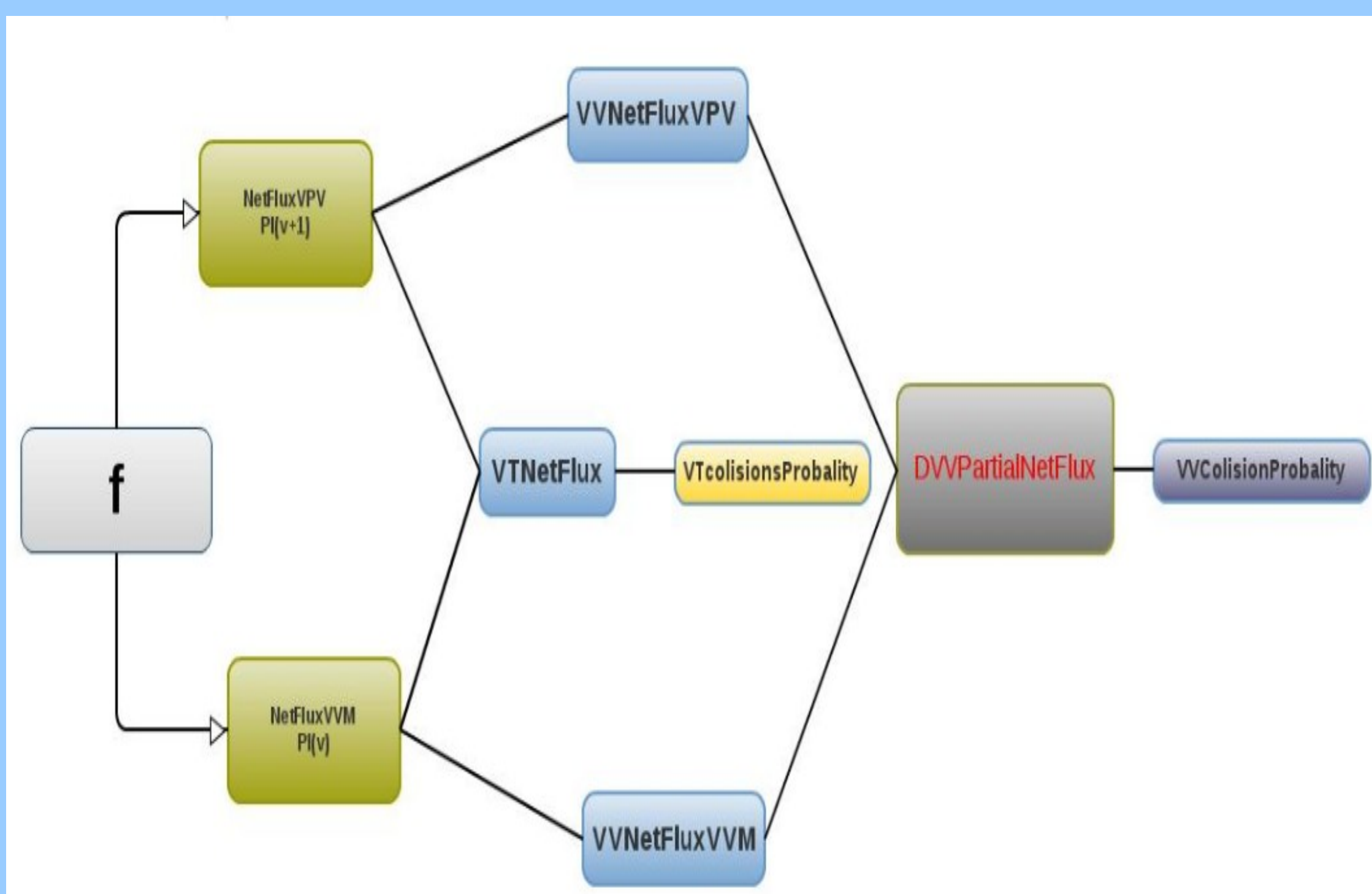


FIGURA 1: Estrutura de implementação

RESULTADOS E DISCUSSÃO

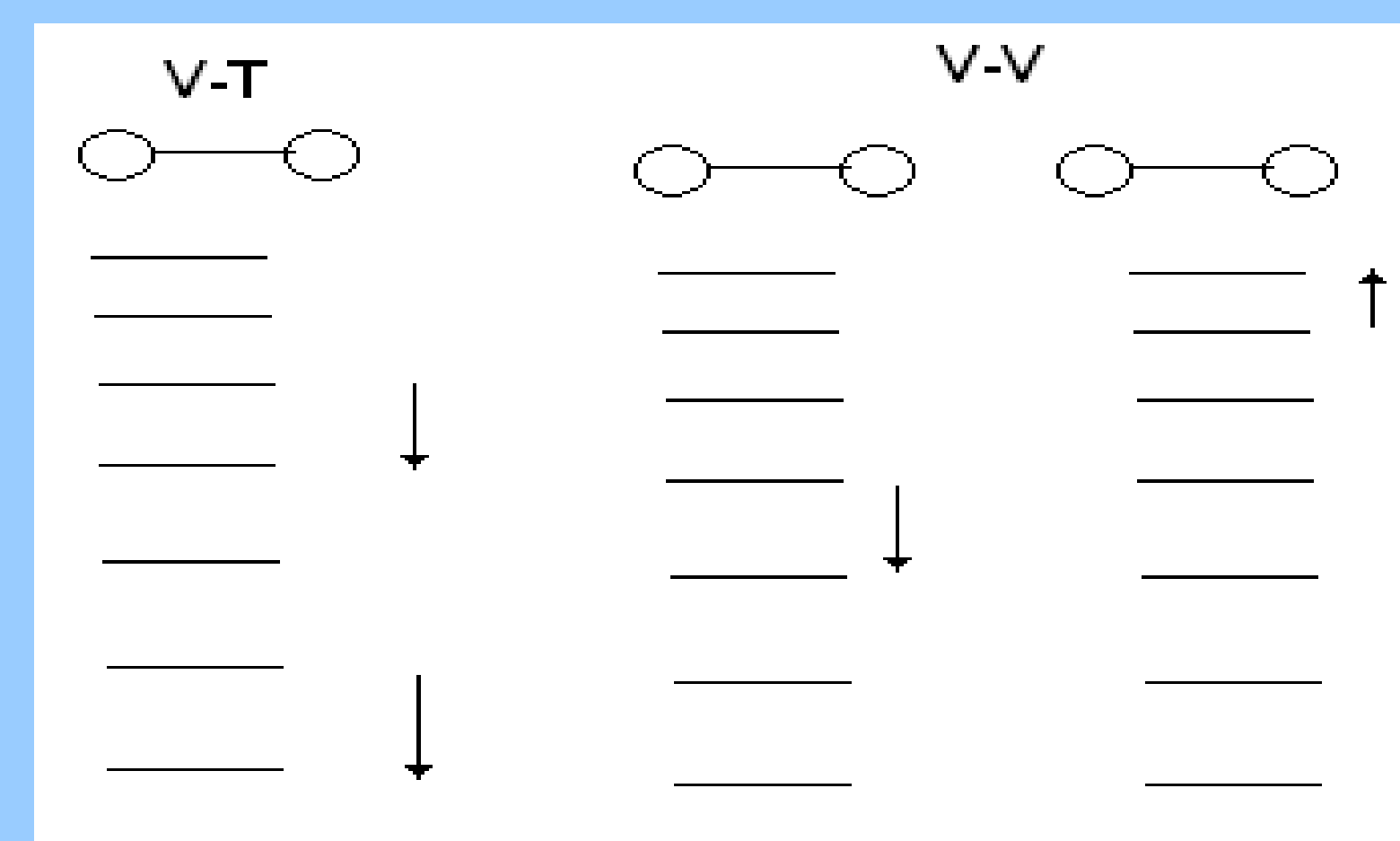


FIGURA 2: Esquema de representação da troca de um *quanto*.

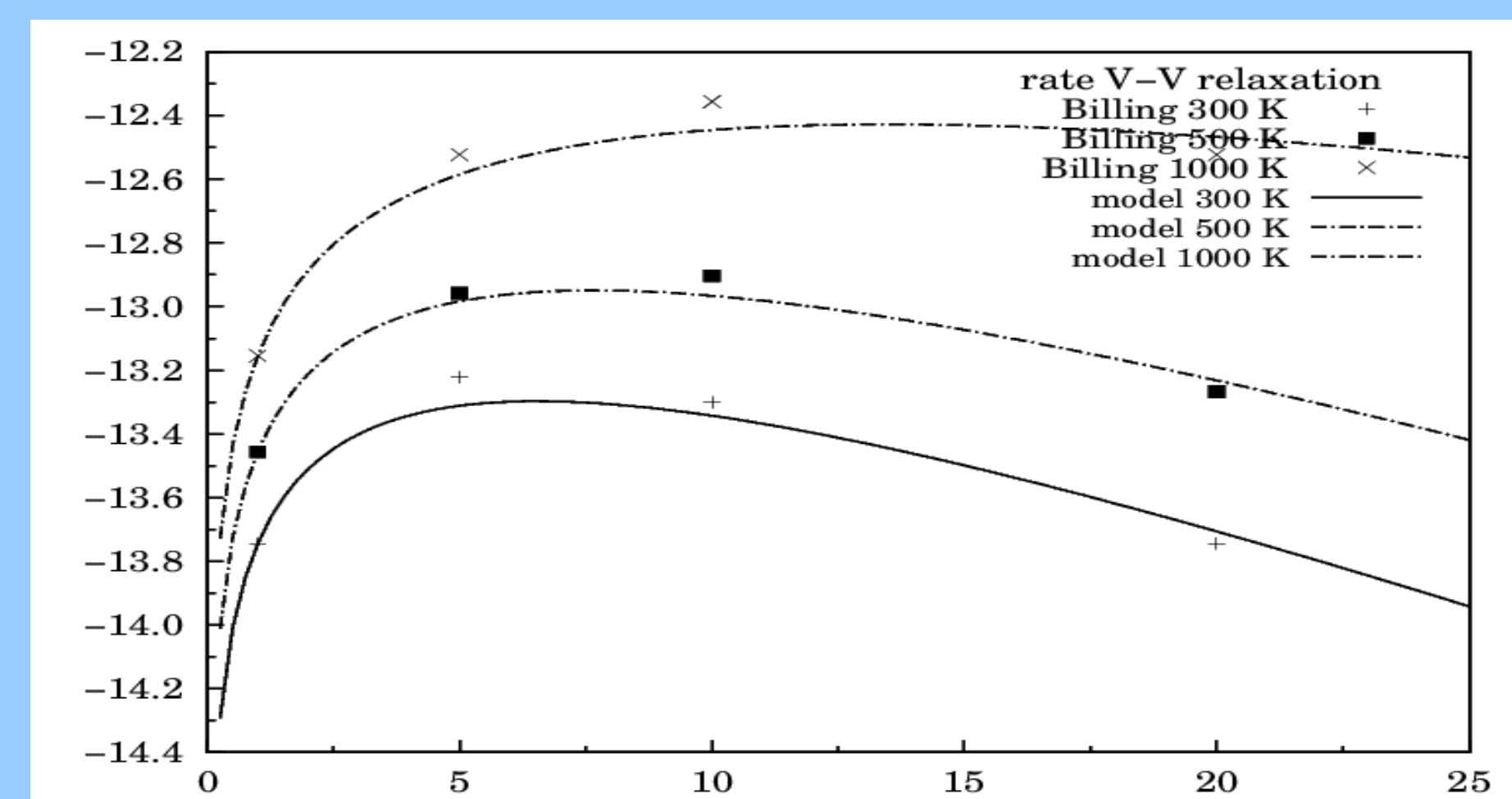


FIGURA 3: Fitting para ajuste dos dados do gás N-N.

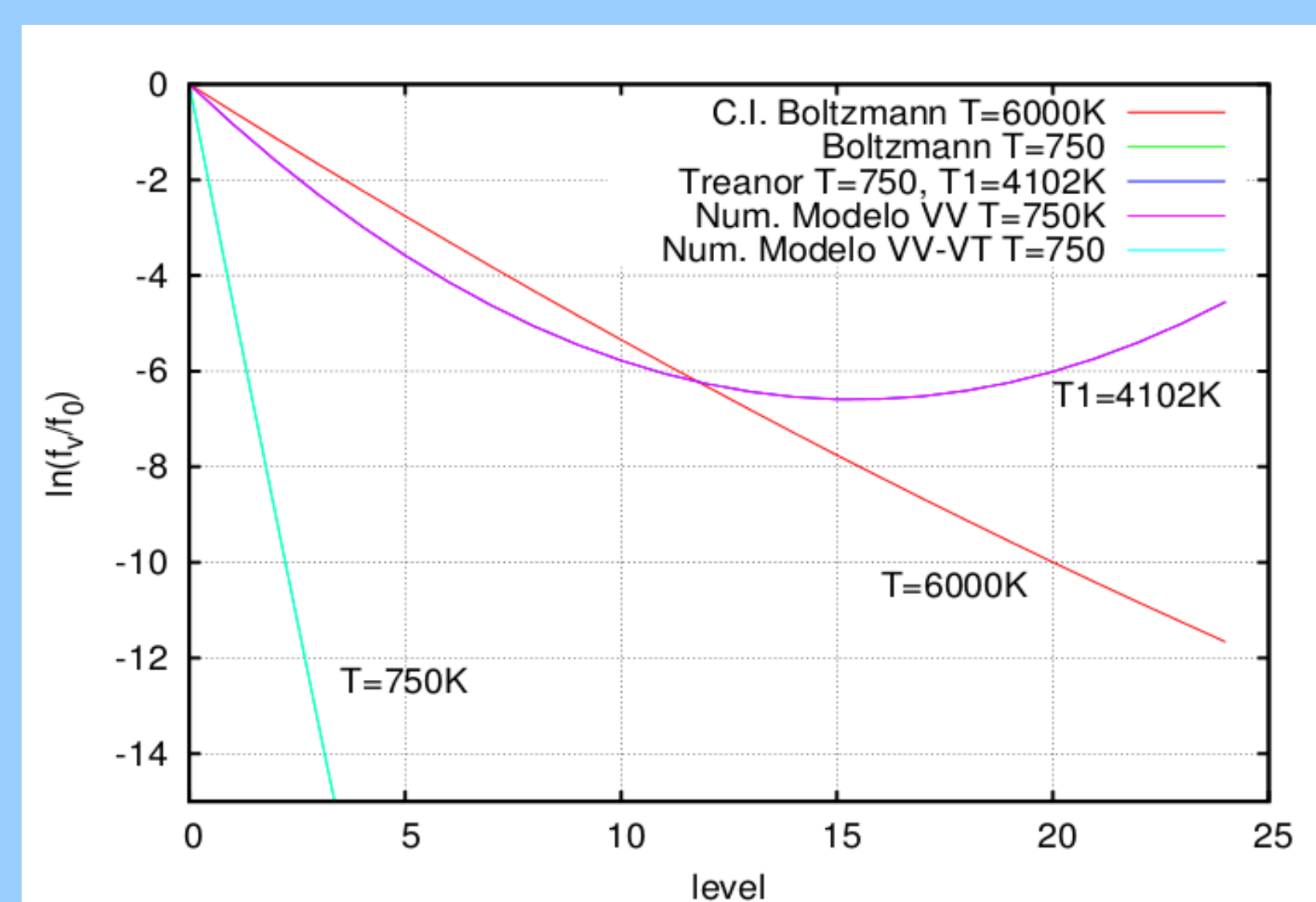


FIGURA 4: Gráfico da função de distribuição de boltzmann e da função de distribuição de treanor.

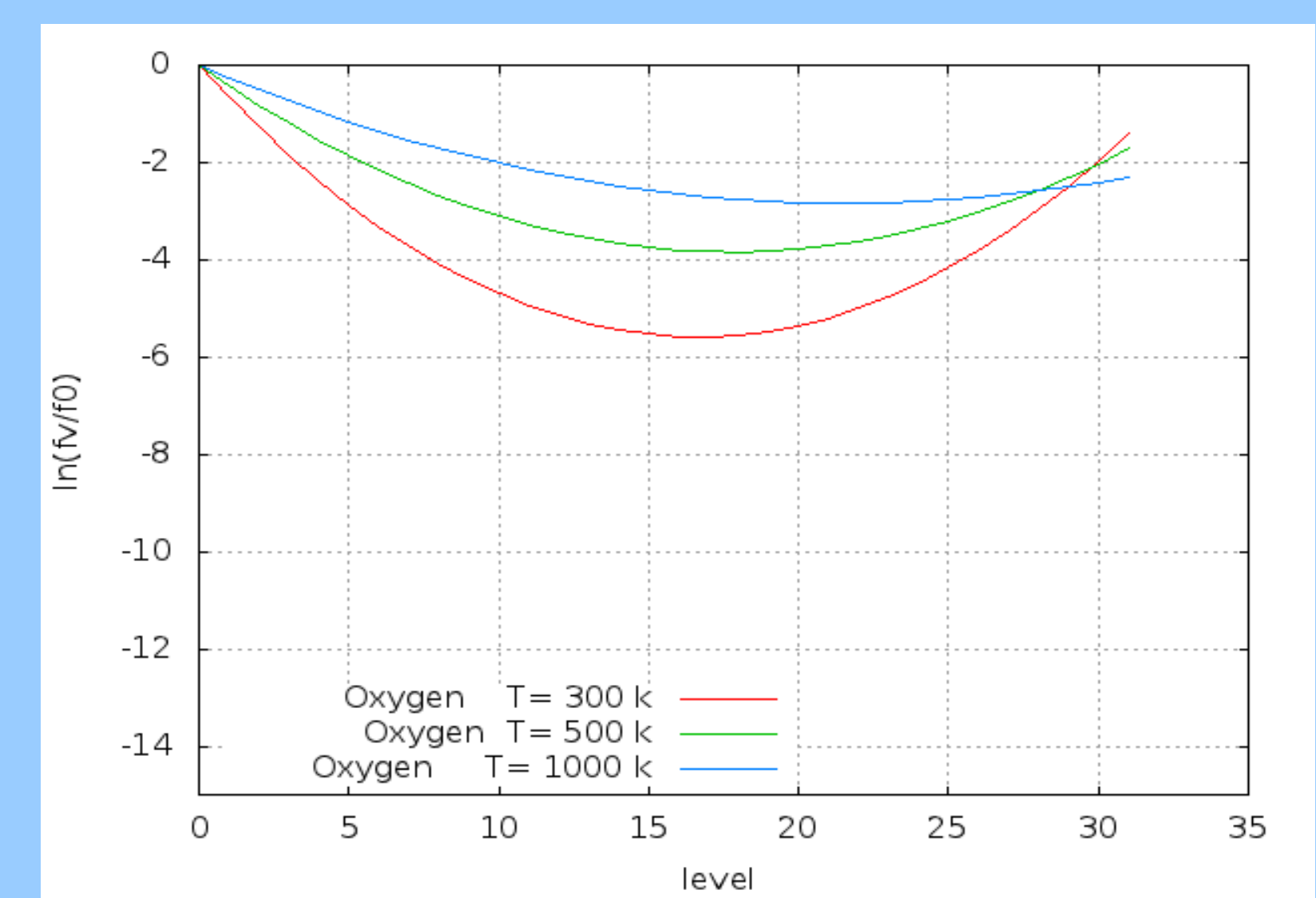


FIGURA 5: Processos Vibration-Vibration do gás O-O

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 Boltzmann :

$$f_v = f_0 \exp \left(\frac{E_v}{kT} \right)$$

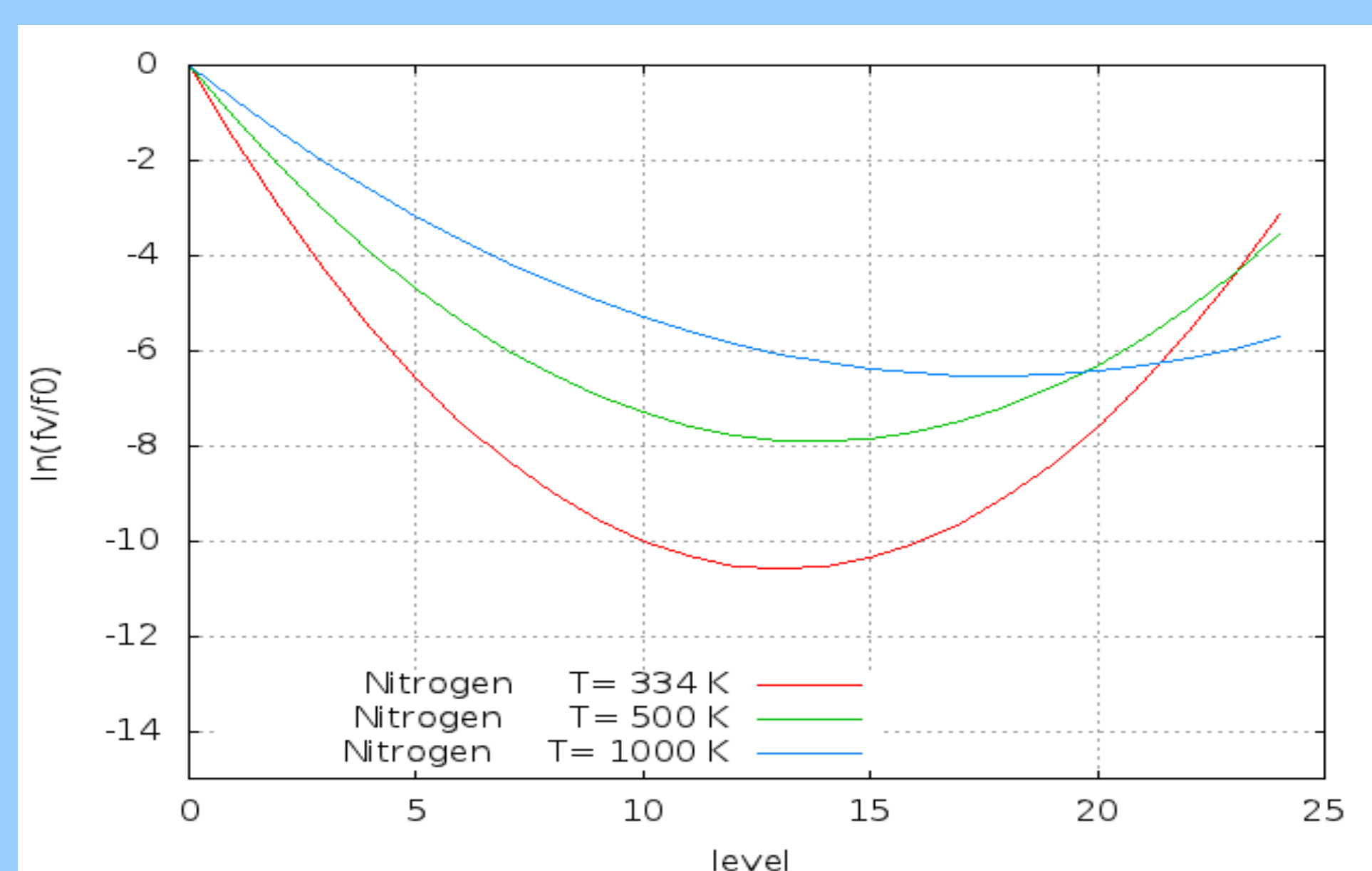


FIGURA 6: Processos Vibration-Vibration do gás N-N.

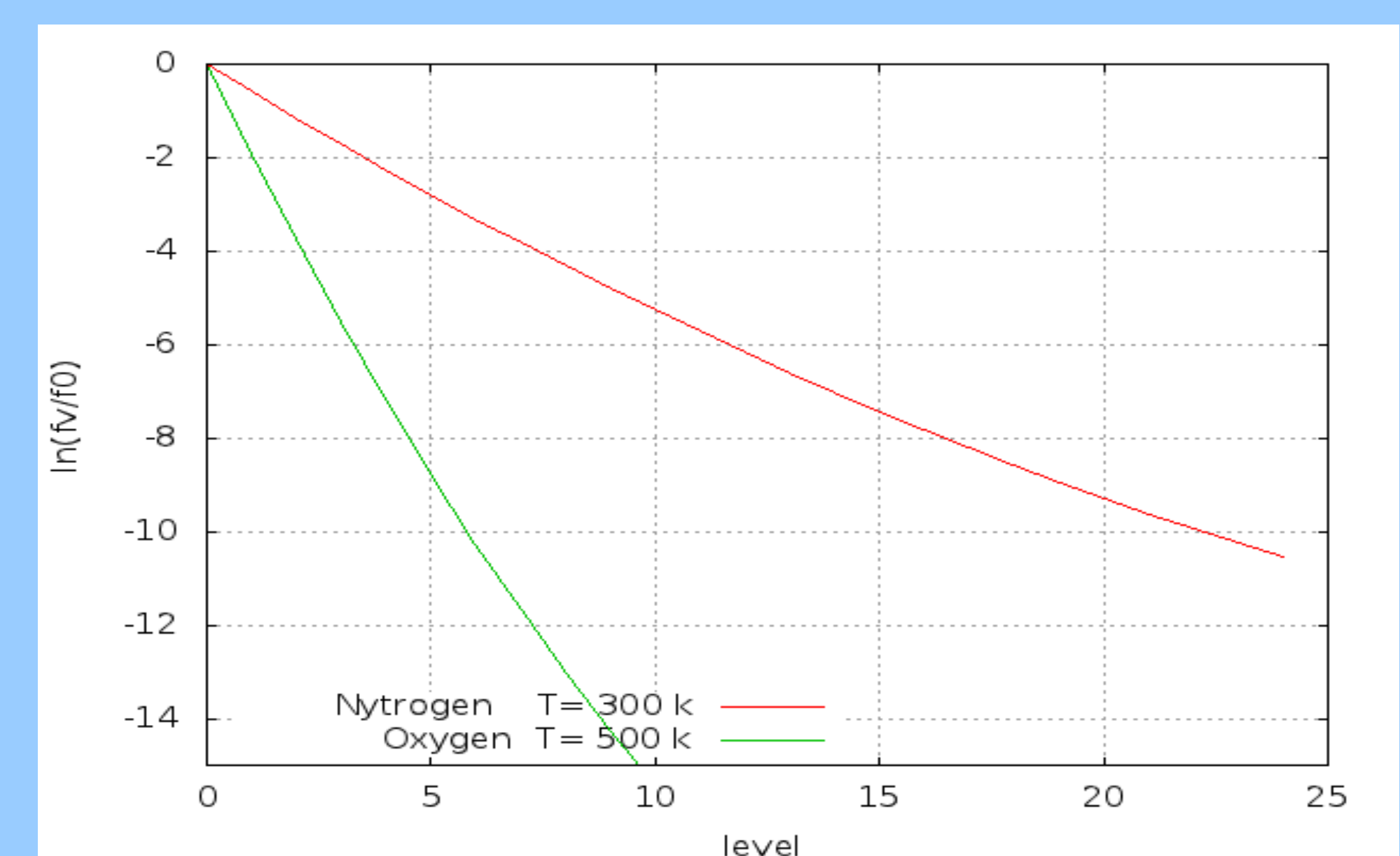


FIGURA 7: Processos Vibration-Vibration e Vibration-Translation do gás N-N.

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 Konzen pelo incentivo, acompanhamento e compreensão constante. Trabalho financiado pela Universidade Federal da Integração Latino Americana - UNILA