



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 V-V e V-V' em colisões moleculares do sistema OH (v' , j') + O₂ (v'' , j'')

Edivaldo José da Silva Junior

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

Contato: edivaldo.junior@unila.edu.br

Juan de Dios Garrido Arrate

Orientador

Pedro Henrique de Almeida Konzen

Coorientador

RESUMO

O projeto busca desenvolver em dois anos um pacote computacional capaz de modelar reações químicas de interesse atmosférico. Especificadamente a reação do O₂ (v') + OH (v'), oxigênio molecular e da hidroxila vibracionalmente excitados, proposta como uma nova fonte para a formação de O₃ (ozônio) [1]. Este trabalho tem como motivação o chamado problema do "Déficit de Ozônio", consistente na diferença existente entre as concentrações do ozônio esperado, considerando os estudos teóricos, quando comparado aos dados experimentais, o que indica que ainda existem fontes de O₃ que não estão sendo consideradas. Na primeira etapa do projeto foi desenvolvido um pacote computacional paralelizado que recebeu o nome de OZONE1DP, que possui uma interface escrita em C++ que liga os cálculos introduzidos ao pacote computacional CVODE [2]. O pacote OZONE1DP calcula equações diferenciais ordinárias (rígidas e não-rígidas) com alta precisão. Para validar o pacote computacional foi introduzido um problema que prevê um sistema homogêneo de N₂ (nitrogênio molecular), para o qual os processos de relaxação vibracional mais prováveis durante as colisões são aqueles que correspondem às trocas de um quantum o que leva a troca entre três níveis vibracionais da molécula. Esse problema foi resolvido por Treanor em 1968 [3]. As equações foram introduzidas no pacote e adaptadas de forma a gerar menos custo computacional. As equações foram resolvidas utilizando os processos V-V (vibration-vibration), onde ocorre a conservação da energia interna da molécula, e V-V, V-T (vibration-vibration e vibration-translation), onde ocorre a perda da energia interna da molécula que é convertida em energia translacional. O OZONE1DP conseguiu chegar na função de distribuição de Treanor, nos processos V-V, e na função de distribuição de Boltzmann, nos processos V-V, V-T, assim como previsto por Treanor em 1968. Com a finalidade de fazer comparações com outras moléculas, foram calculados os parâmetros moleculares do O₂, espécie de interesse do projeto global. Determinados esses parâmetros foram realizados cálculos para um sistema molecular formado por O₂ considerando somente os processos VV. Percebeu-se que o sistema formado por N₂ chega em uma solução estacionária mais rápido que um sistema formado por O₂. Isso ocorre porque o oxigênio molecular possui mais níveis vibracionais que o nitrogênio molecular e também porque a probabilidade de colisão do N₂ é maior que o do O₂.

Palavras-chave: colisões moleculares, relaxação vibracional, nitrogênio molecular.