

PROGRAMA PARA O CÁLCULO DE FLUXOS DE POPULAÇÃO CORRESPONDENTES AOS PROCESSOS V-V V-V' EM COLISÕES MOLECULARES

BOLSISTA: EDIVALDO JOSÉ DA SILVA JUNIOR
edivaldo.junior@unila.edu.br

ORIENTADOR: JUAN DE DIOS GARRIDO
COORIENTADOR: PEDRO HENRIQUE KONZEN

O projeto busca desenvolver em dois anos um pacote computacional capaz de modelar reações químicas de interesse atmosférico. Especificadamente a reação do $O_2(v'')$ + $OH(v')$, oxigênio molecular e da hidroxila vibracionalmente excitados, proposta como uma nova fonte para a formação de O_3 (ozônio). 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 O_3 que não estão sendo consideradas.

2. VALIDAÇÃO DO PACOTE: Relaxação vibracional do modelo anarmônico de moléculas com transições de um quantum: condições isotérmicas

$$\frac{df_v}{dt} = -[\Pi_{v+1} - \Pi_v], \quad v = 0, 1, \dots, v_T$$

onde:

- $f_v = [M_2(v)]/[M_2]$ - população no nível v
- Π_{v+1} - fluxo neto de partículas entre os níveis vibracionais $v + 1$ e v
- Π_v - fluxo neto de partículas entre os níveis vibracionais v e $v - 1$

$$\Pi_v := \Pi_v^{V-V} + \Pi_v^{V-T}$$

com:

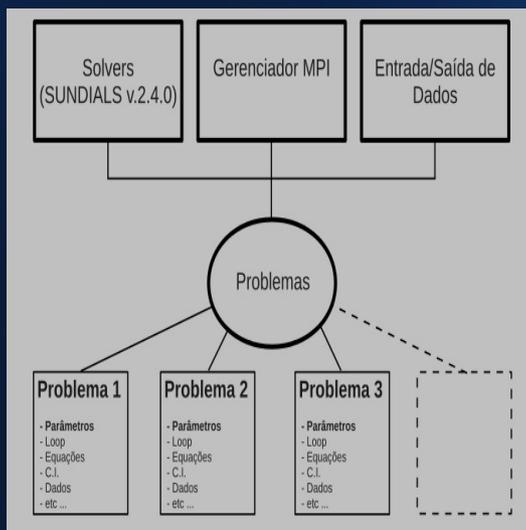
$$\Pi_v^{V-V} = \sum_{v'=0}^{v_T} \left\{ Q_{v',v-1}^{v'} \left[f_{v-1} f_{v'} \exp\left(\frac{2\Delta E(v-v')}{kT}\right) - f_v f_{v'-1} \right] \right\}$$

$$\Pi_v^{V-T} = P_{v,v-1} \left[f_{v-1} \exp\left(-\frac{E_1 + 2\Delta E(v-1)}{kT}\right) - f_v \right]$$

onde:

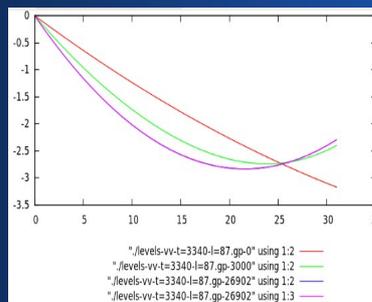
- $Q_{v',v-1}^{v'}$ - frequência do processo V-V
- $P_{v,v-1}$ - frequência do processo V-T
- E_1 - energia do primeiro nível ($v = 1$)
- ΔE - anarmonicidade da molécula
- k - constante de Boltzmann
- T - temperatura de translação

1. OZONE1DP – Desenvolvimento de um Pacote computacional que resolve equações diferenciais ordinárias, rígidas e não rígidas.

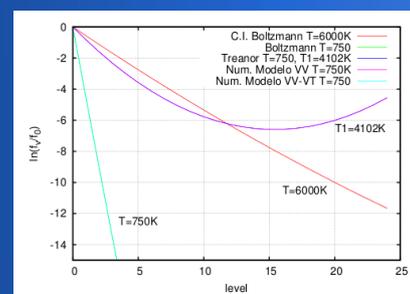


3. RESULTADOS

Evolução temporal da função de distribuição de Treanor



Evolução temporal da função de distribuição de Boltzmann



[1] J. D. Garrido, P. J. S. B. Caridade and A. J. C. Varandas J. Phys. Chem. A, 106, 5314, (2002).
 [2] Sundials. Disponível em: <https://computation.llnl.gov/casc/sundials/main.html>. Acessado: 02/04/2012.
 [3] C. E. TREANOR, J. W. RICH, AND R. G. REHM. Vibrational Relaxation of Anharmonic Oscillators with Exchange-Dominated Collisions. Cornell Aeronautical Laboratory. 1968.