

Transferência de energia em colisões de N_2 com H_2

Francisco de Freitas Abreu ¹ e Delvany de Castro Gomes ²

Departamento de Física - Universidade Federal de Juiz de Fora - Brasil

Sinopse: Investigamos o processo de transferência de energia Translacional para Vibracional (T-V) em colisões de N_2 e H_2 , com energia translacional relativa menor que 60 kcal/mol.

Os processos de transferência de energia em colisões moleculares são de particular interesse para diversos estudos em físico-química. Dentre os diversos tipos, a translacional para vibracional (T-V) é um processo fundamental de transferência de energia em colisões, no qual parte da energia cinética é convertida em excitação vibracional.

No presente trabalho, investigamos o processo de transferência de energia T-V [1] quando estudamos a colisão entre uma molécula de nitrogênio (N_2) e uma molécula de hidrogênio (H_2), com energia translacional relativa menor que 60 kcal/mol. Mais especificamente, buscamos estudar as distribuições vibracionais destas moléculas após a colisão e calcular a seção de choque.

Os seguintes histogramas ilustram as distribuições de energia vibracional para as moléculas de H_2 e N_2 , respectivamente, após a colisão de N_2 e H_2 , com energia translacional relativa igual a 50 kcal/mol

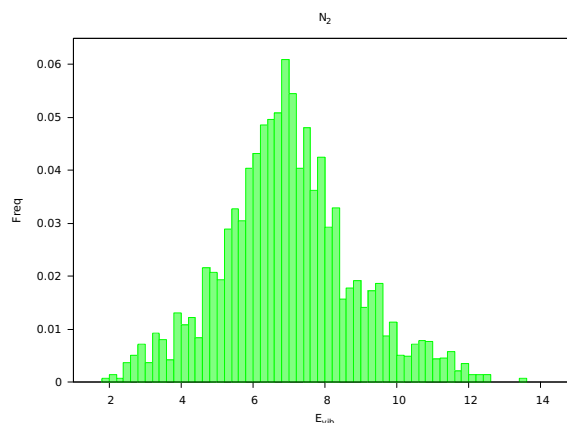
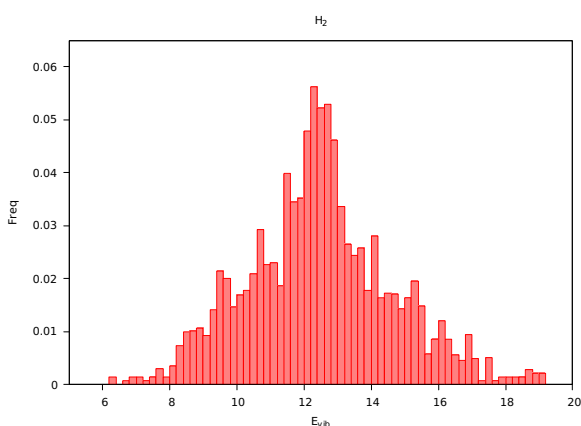


Figure 1. Histograma de N_2

Para a realização dos cálculos envolvidos utilizamos o método das trajetórias quase-clássicas (QCT) implementado em uma versão adaptada do MERCURY [2]. Em tais cálculos, empregamos uma superfície de energia potencial (PES) de dimensão seis para o estado fundamental do N_2H_2 , obtida usando a teoria da dupla expansão de muitos corpos (DMBE) [3, 4].

Referências

- [1] J. Ma *et al* 2016 *Physical Review A*. **93** 040702
- [2] W. L. Hase. 1983. Mercury: a general Monte Carlo classical trajectory computer program. *QCPE*, 3, 453.
- [3] L. A. Poveda *et al* 2009 *J. Chem. Phys* **131** 044309
- [4] M. Y. Ballester and A. J. C. Varandas 2005 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7** 2305-2317

Apoio:



Figure 1. Histograma de H_2

¹E-mail: francisofreitas.fis@gmail.com

²E-mail: jrjfm22@bol.com.br