

## Efeito da excitação molecular sobre a transferência de energia roto-vibracional em colisões Ar+Cl<sub>2</sub>, Ar+HCl e Ar+CO

F. S. Carvalho<sup>1</sup>, E. Borges<sup>1</sup>, J. P. Braga<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Viçosa, Av. P.H. Rolfs, s/nº, 36570-000, Viçosa, Minas Gerais, Brasil

<sup>2</sup>Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Presidente Antônio Carlos, 6627, 31270-901, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil  
felipe.s.silva@ufv.br

Palavras-chave: Energia, Colisões, Coriolis

### INTRODUÇÃO

A interação roto-vibracional, também chamada acoplamento de Coriolis tem sido frequentemente investigada em processos espectroscópicos e de transferência de energia<sup>1</sup>. A compreensão do acoplamento de Coriolis tem se mostrado relevante, por exemplo, para a descrição de mecanismos envolvendo reações de interesse ambiental e tecnológico<sup>2</sup>. No presente trabalho relata-se o papel desta interação para a transferência de energia em processos não reativos envolvendo os sistemas Ar+CO, Ar+HCl e Ar+Cl<sub>2</sub>.

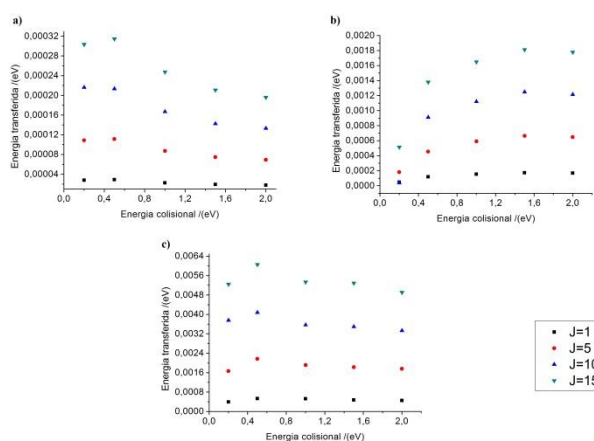
### METODOLOGIA

Utilizou-se uma metodologia semi-clássica em que as equações dinâmicas são clássicas e as condições iniciais quantizadas. Os potenciais utilizados foram o de Morse (intramolecular) e Lennard-Jones (intermolecular). As condições iniciais foram obtidas por meio das energias espectroscópicas e de um conjunto de coordenadas cartesianas acopladas aos modos normais. Desta forma foi possível analisar a transferência de energia para diferentes estados quânticos. Os cálculos foram realizados com um algoritmo desenvolvido pelo grupo e foram computadas 5000 trajetórias para obtenção dos valores médios da energia transferida.

### RESULTADOS E DISCUSSÕES

Notam-se algumas tendências em todos os sistemas: a variação de energia aumenta com o aumento do número quântico rotacional, salvo para a energia colisional de 0.2 eV para o CO; na medida em que o momento de inércia aumenta observa-se uma diminuição da energia transferida. Observou-se a mesma tendência para os estados excitados vibracionalmente. Também observou-se que excitando-se as moléculas vibracionalmente a

energia transferida aumenta. Esses efeitos dos números quânticos sobre a quantidade de energia transferida para a componente de Coriolis já foi observado para outros sistemas<sup>1</sup>.



**Figure 1.** Transferência de energia para números quânticos  $N=0$  e diferentes valores de  $J$  a) Ar+Cl<sub>2</sub> b) Ar+CO c) Ar+HCl.

### CONCLUSÕES

Esses resultados preliminares mostram que os diferentes estados excitados das moléculas influenciam na transferência de energia roto-vibracional (ou Coriolis) aparentemente em concordância com um padrão que está sendo analisado no momento. Um próximo passo desse estudo será além da compreensão do padrão mencionado anteriormente, a análise da dependência do acoplamento de Coriolis com o número de modos normais.

### REFERÊNCIAS

- 1 E. BORGES, G. G. FERREIRA, J. P. BRAGA, J. C. BELCHIOR, *Journal of Quantum Chemistry*, **2006**, *106*, 13.
- 2 G. LIN, J. ATKINSON, *Dynamics of Atmospheres and Oceans*, **2000**, *31*, 247-269.