

Um novo paradigma na modelagem de espectros de emissão: O caso do Sistema Secundário de N_2

C. D. Silva^a, M. G. Silva^a, C. E. Fellows^b e M. Y. Ballester^a

a) Departamento de Física, Universidade Federal de Juiz de Fora, MG.

b) Departamento de Física, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, RJ.

Resumo

O objetivo principal deste trabalho é revolucionar as metodologias de simulação para modelar espectros de rotação gerados por descargas elétricas em pressões relativamente baixas. Para atingir esse objetivo, implementamos um ciclo cinético abrangendo completamente a evolução temporal das espécies moleculares, iônicas e atômicas de nitrogênio, dentro do contexto do resolvidor plasm químico zero dimensional (ZDPlasKin). Uma vez que a análise de espectros de emissão é uma ferramenta comum para diagnosticar descargas elétricas em gases, decidimos focar nas transições entre os níveis rovibracionais do segundo sistema positivo de $N_2(C^3\Pi_u, v' = 0, J' \rightarrow B^3\Pi_g, v'' = 0, J'')$. Essas transições moleculares formam uma banda que utilizamos como estudo de caso, possibilitando a obtenção de informações em tempo real sobre o gás durante a descarga elétrica. Para determinar as intensidades de cada transição óptica, apresentamos duas abordagens: uma que utiliza as densidades absolutas das espécies emissores e outra que analisa as trajetórias das reações. Ambos os métodos produzem resultados muito semelhantes. Além disso, validamos os espectros sintéticos comparando-os com medidas experimentais realizadas em um tubo de descarga. Nossas metodologias também permitem a avaliação da evolução temporal dos espectros ao longo da duração da descarga elétrica.