

SIMULAÇÃO DO ESPECTRO ROTACIONAL MOLECULAR DO N₂⁺ USANDO A LINGUAGEM PYTHON (APOIO UNIP)

Aluno: André Sant'Ana Menezes

Orientador: Prof. Dr. Joares Lidovino dos Reis Junior

Curso: Engenharia de Controle e Automação (Mecatrônica)

Campus: São José dos Campos

O objetivo deste trabalho foi criar um programa em linguagem Python que simula espectros da molécula de N₂⁺. Esses espectros rovibracionais são dependentes da temperatura, uma vez que se admite que as moléculas em uma descarga estão em equilíbrio térmico, de acordo com a distribuição de Boltzmann. A temperatura é de fundamental importância para se compreender os processos físico-químicos de uma descarga elétrica, pois determina as taxas das reações químicas que ocorrem no plasma. Os espectros podem ser usados para se determinar a temperatura de uma descarga por serem obtidos por técnicas ópticas simples e não invasivas. O método mais usado para se determinar a temperatura é por espectros simulados computacionalmente. Em nosso trabalho, usamos a linguagem Python, que é do tipo “*opensource*”, para gerar um código que simule os espectros do primeiro sistema negativo do nitrogênio. A interface com o usuário foi simplificada de tal forma que apenas os parâmetros de temperatura e de alargamento de linha são requeridos como entrada. O programa funciona corretamente, permitindo ao usuário gerar espectros com diversas temperaturas e alargamentos de linha, atendendo assim aos objetivos propostos no início da pesquisa, e será disponibilizado de forma gratuita para a comunidade científica.