

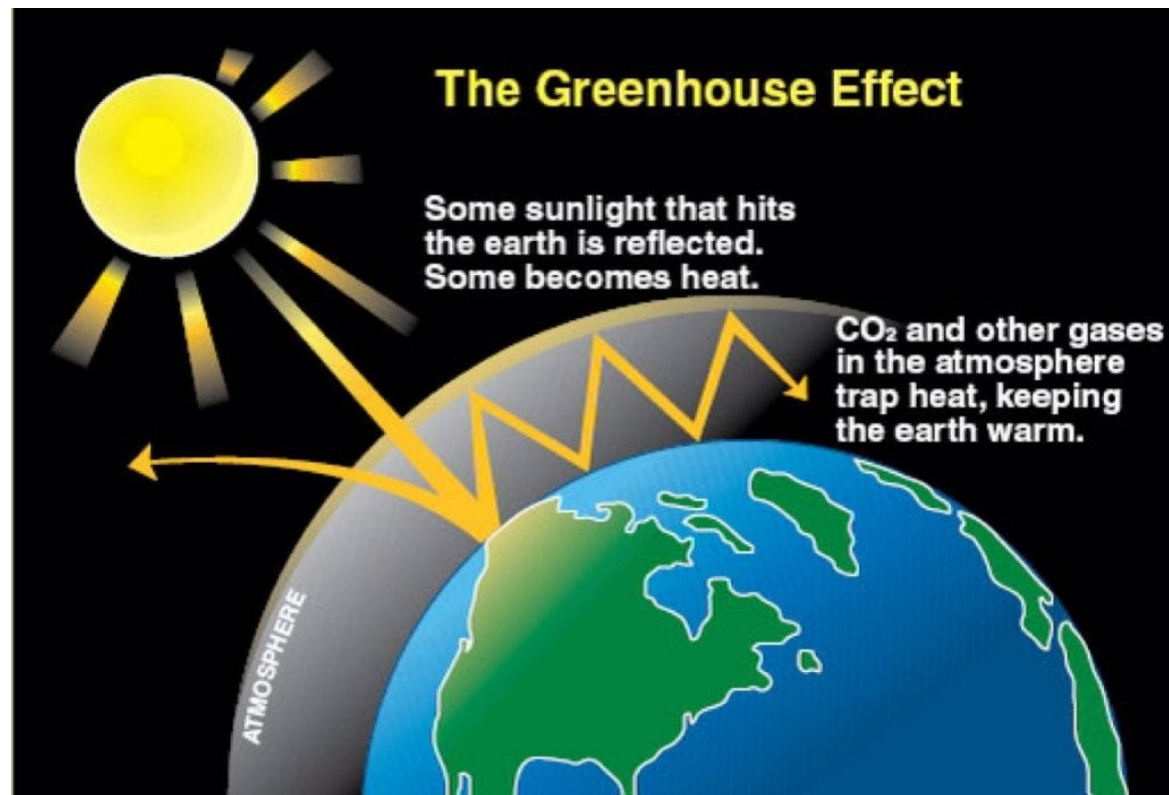
Simulação Atomística

Prof. James Moraes de Almeida



- Vamos começar nossa jornada quântica agora.
- Vamos simular o que?
- Começaremos com moléculas relevantes para o aquecimento global.
 - CO_2 .
 - CH_4 .
 - CO .
 - O_3 .
 - H_2O .

- Porque ocorre o efeito estufa?



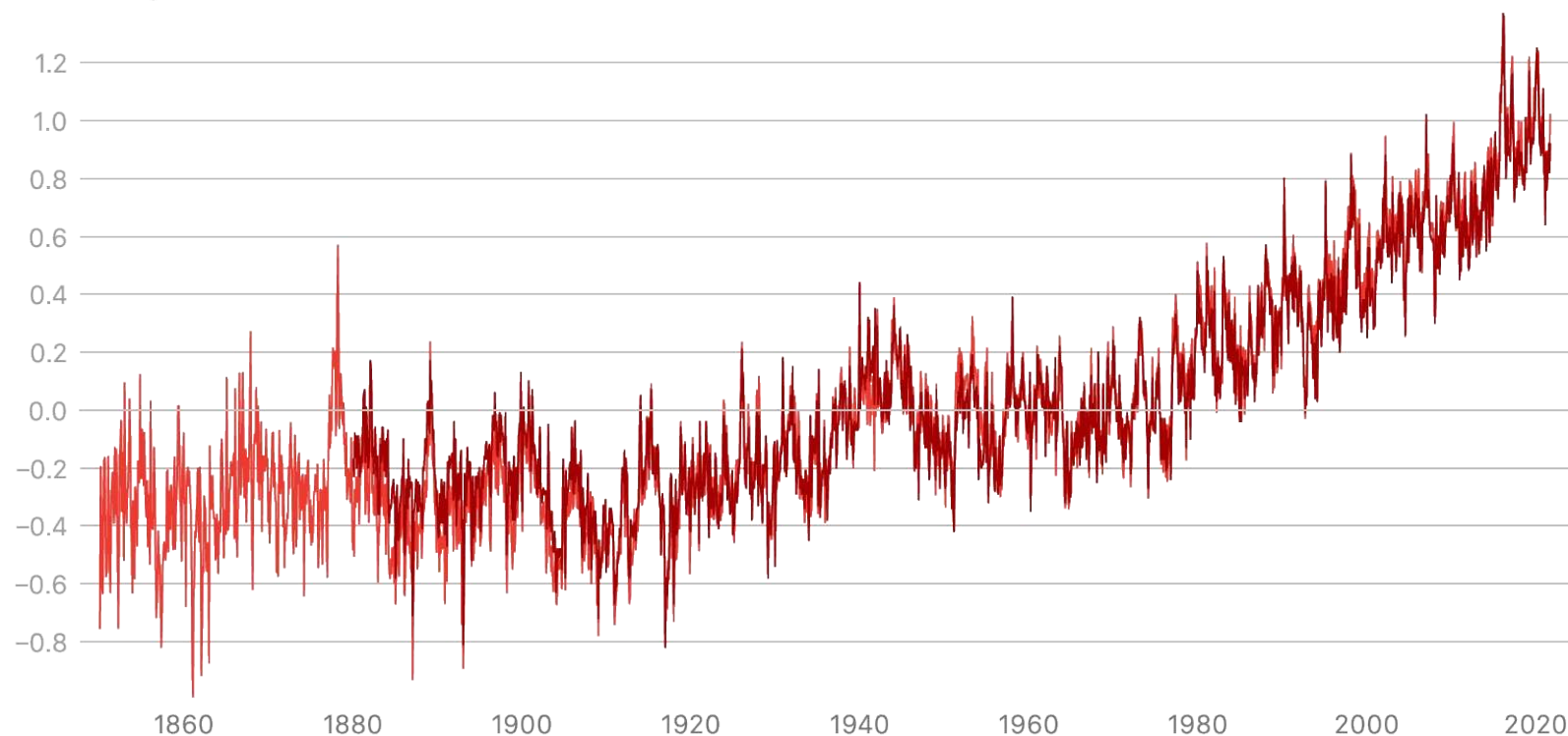
- Se parte da radiação não escapa, o que acontece?

- Se parte da radiação não escapa, o que acontece?

Global average temperature

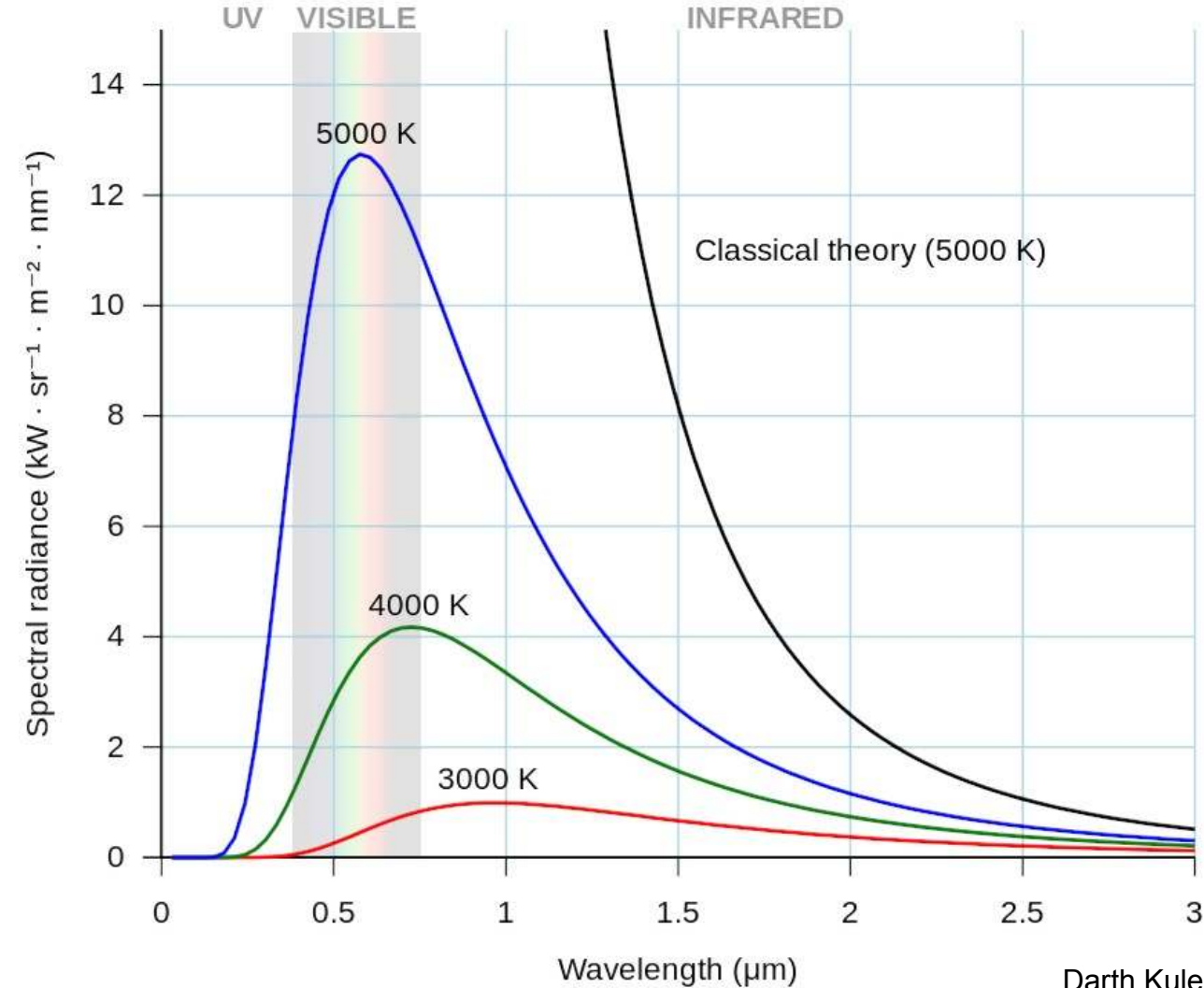
Difference from 1951-1980 average (degrees Celsius)

— Berkeley Earth — NASA

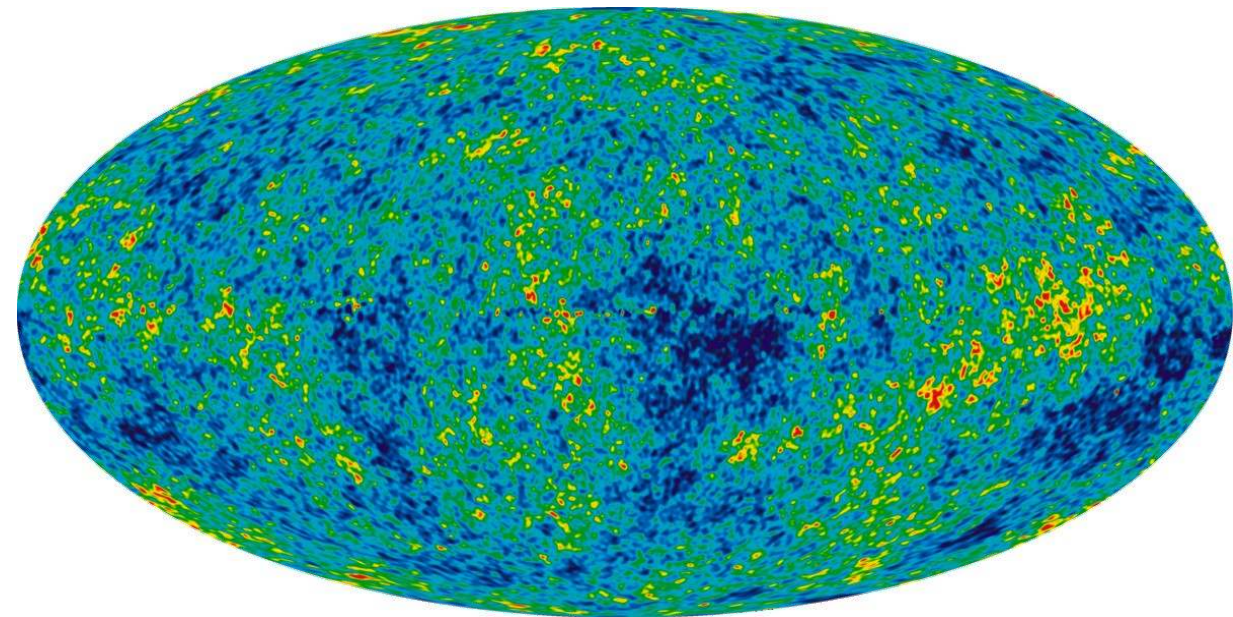


Simulações de DFT

- Antes vamos revisar a radiação de corpo negro.

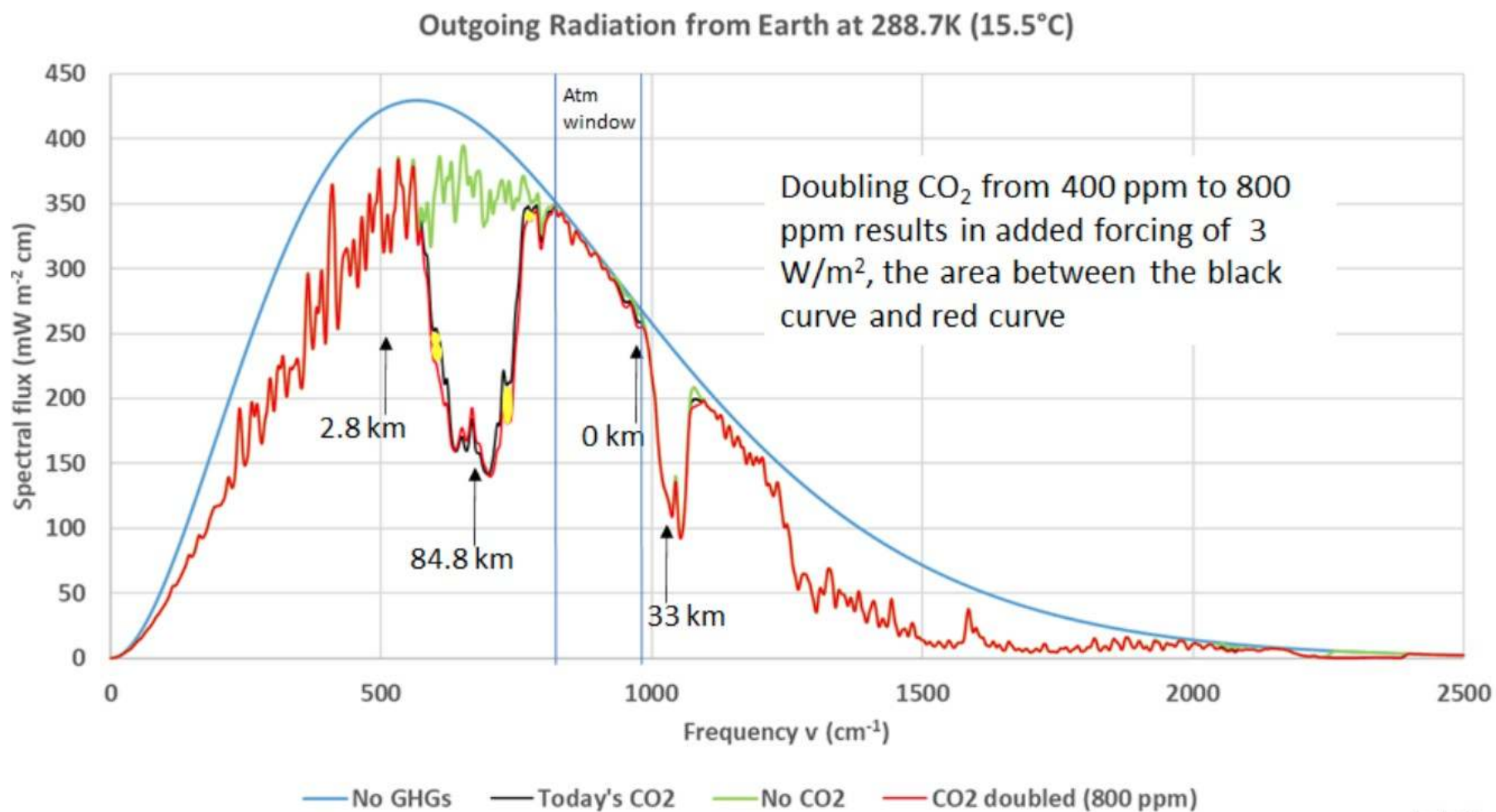


$$B_{\nu}(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$



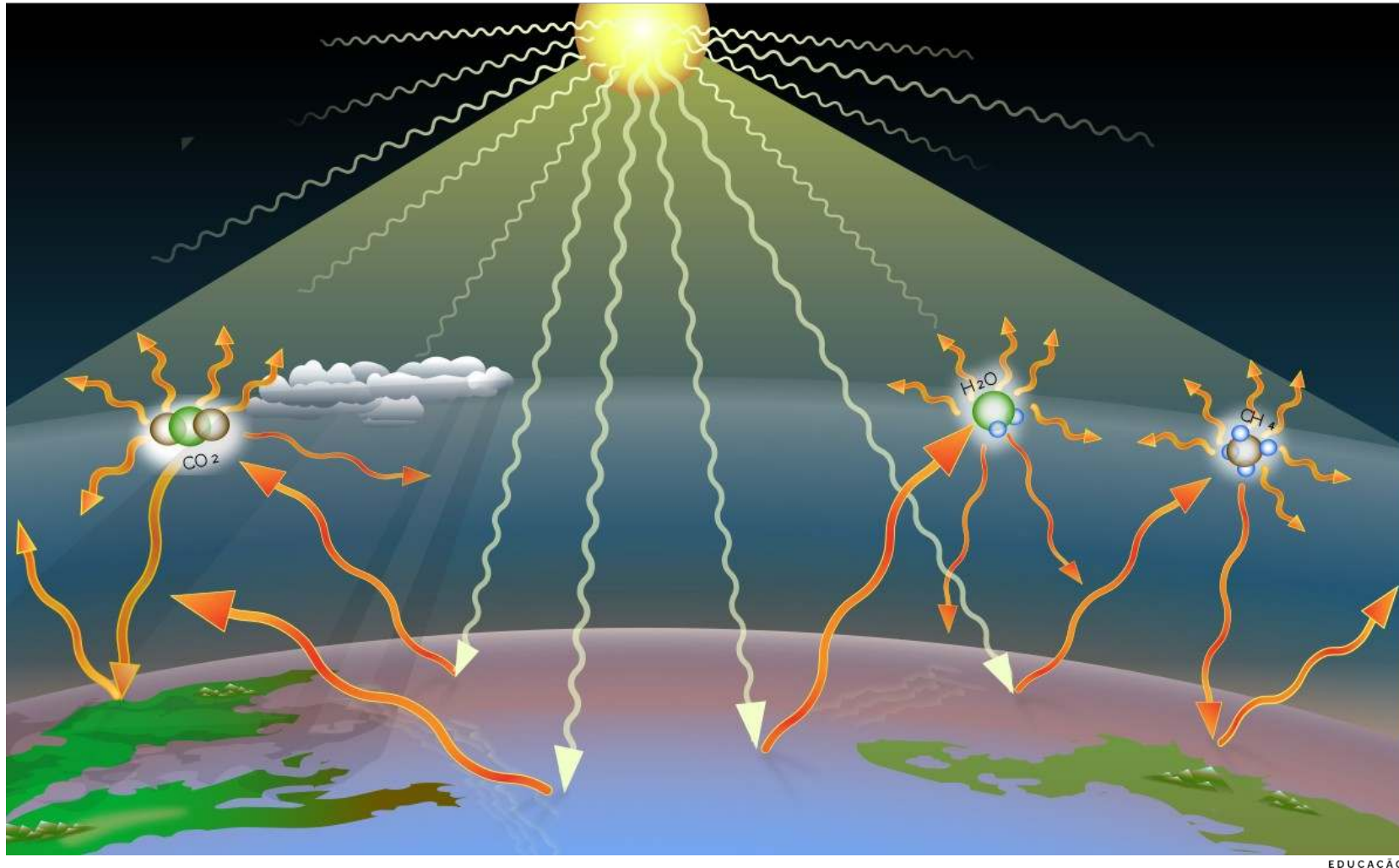
Simulações de DFT

- Emissão de radiação da Terra.



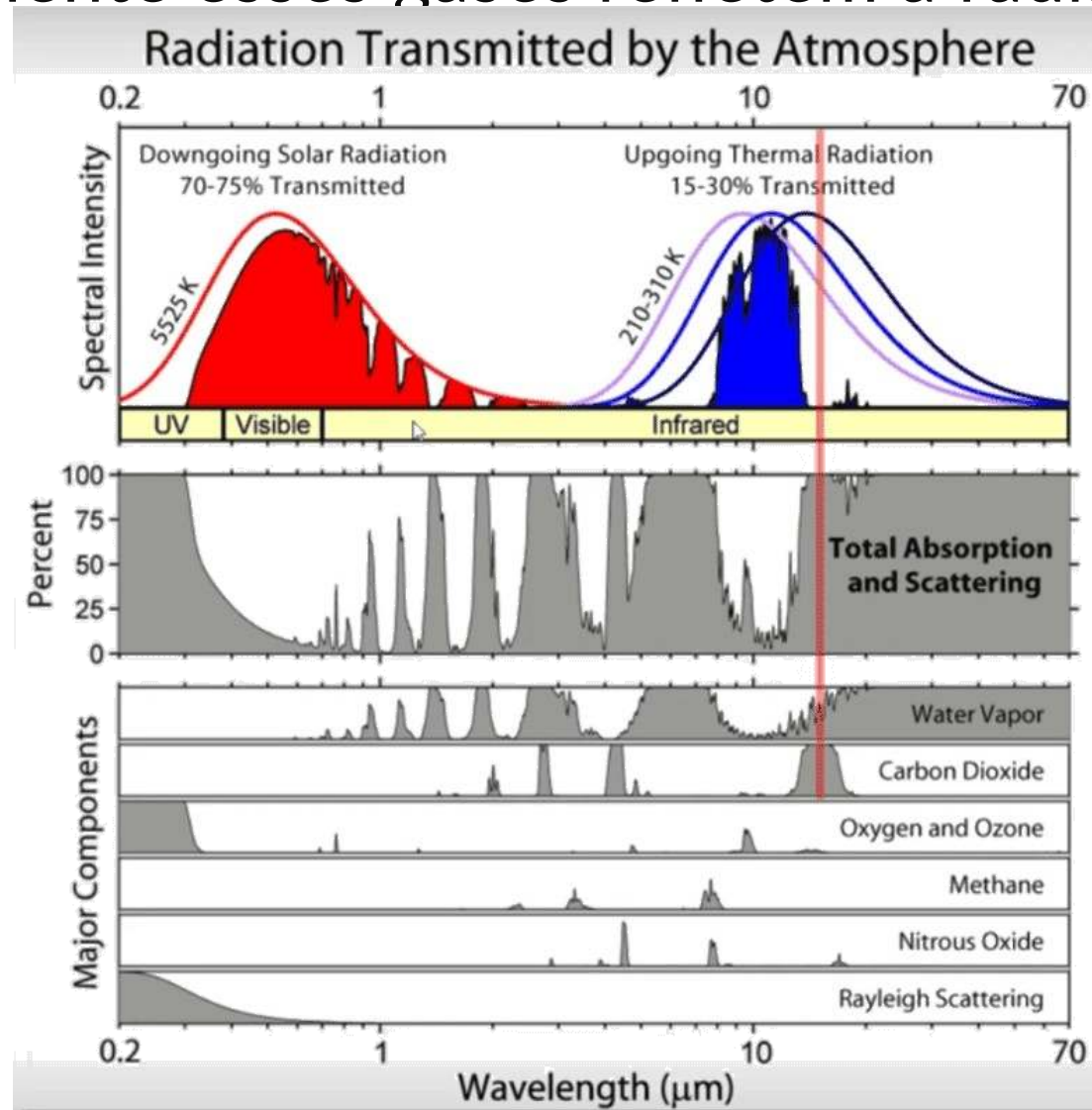
Simulações de DFT

- Mas porque exatamente esses gases refletem a radiação de volta?



Simulações de DFT

- Mas porque exatamente esses gases refletem a radiação de volta?



Simulações de DFT

- E onde se encontram as vibrações das moléculas simuladas?

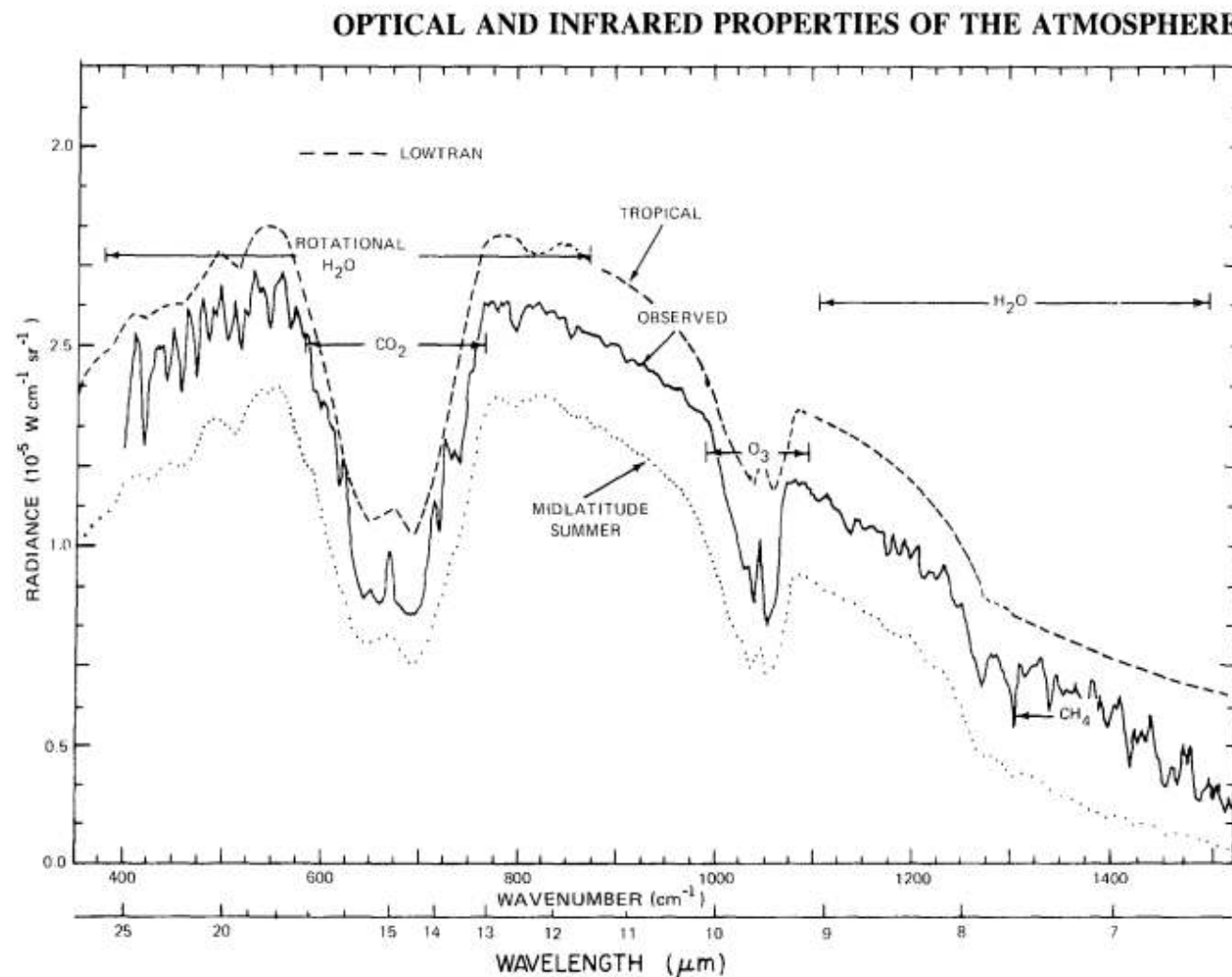
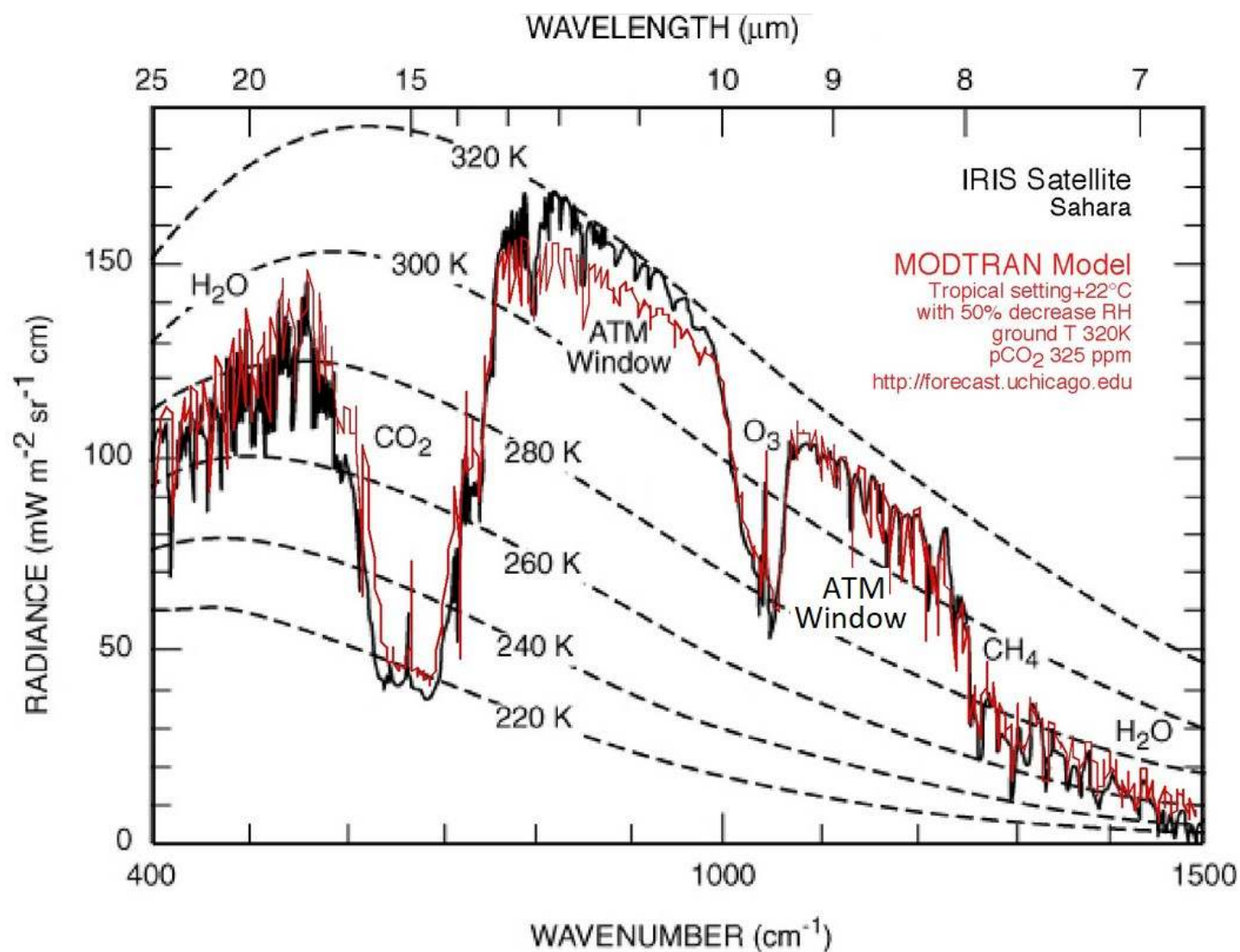


Figure 18-82. Comparison between LOWTRAN prediction and NIMBUS 3 satellite measurement of atmospheric radiance over the Gulf of Mexico.

Simulações de DFT

- E onde se encontram as vibrações das moléculas simuladas?



OBRIGADO

James Moraes de Almeida



ilum.cnpem.br



MINISTÉRIO DA
EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO



MINISTÉRIO DA
EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO

