

Caracterização experimental do papel do solvente em uma reação química a partir da análise da densidade espectral dependente do tempo de processos estocásticos.

Rene A. N. Silva (PQ), Bruno F. Zornio (PG), Debora A. Tesserolli (IC).

Resumo

Este projeto visa à análise estatística de processos químicos em solução, averiguando o papel do meio sobre o soluto durante a dinâmica de processos físico-químicos a partir da análise de densidade espectral dependente do tempo de processos estocásticos, tomando como base o modelo de dinâmica Browniana para descrição de reações químicas.

Palavras Chave: espectroscopia, efeito de solvente, processo estocástico.

Introdução

Um processo estocástico consiste na dinâmica aleatória da posição de uma partícula definida em um espaço de probabilidade dependente do tempo ^[1]. Um exemplo bem conhecido de processo estocástico é o movimento Browniano, movimento aleatório de partículas em um fluido. A densidade espectral auxilia na captura da frequência do processo estocástico e identifica periodicidades. Neste estudo buscou-se maior compreensão sobre a investigação do papel do meio sobre o soluto durante a dinâmica de processos físico-químicos a partir da análise de densidade espectral dependente do tempo de processos estocásticos.

Resultados e Discussão

A partir da Dinâmica de Langevin sabe-se que o potencial é dependente apenas da posição da partícula, logo qualquer informação sobre o sistema é obtido por sua posição em função do tempo. Sendo assim, na tentativa de prever a transição de estados Biggs ^[2] propõe analisar os momentos amostrais – média, variância, assimetria e curtose.

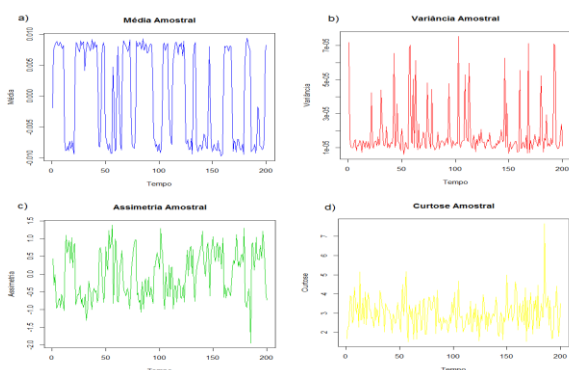


Figura 1. Gráficos dos momentos amostrais para intervalos iguais da: a) média, b) variância, c)

curtose e d) assimetria.

Porém outros autores sugerem que a densidade espectral possa ser um bom indicador da transição entre estados.

A densidade espectral é uma função real positiva de uma frequência de uma variável associada a um processo estocástico.

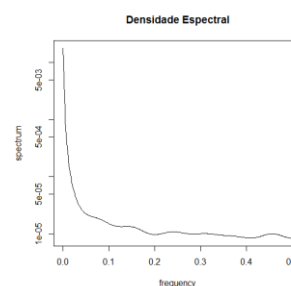


Figura 2. Gráfico da densidade espectral.

Conclusões

Para a média, existe um comportamento semelhante aos dados originais. Já para a variância, pode-se correlacionar cada pico a uma transição de estados. Quanto à assimetria e curtose, não há indícios de nenhum padrão que se possa aferir sobre a transição de estados.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, que me deu a oportunidade de realização deste projeto, ao Professor Doutor Rene Afonso Nome Silva e ao doutorando Bruno Fedosse Zornio pela orientação, suporte e confiança necessária para a elaboração deste projeto.

¹ MORETTIN, P.A. & TOLOI, C.M.; *Análise de Séries Temporais*. Edgar Blucher Ltda. São Paulo, 2004.

² BIGGS, Reinette; CARPENTER, Stephen R.; BROCK, William A. Turning back from the brink: detecting an impending regime shift in time to avert it. *Proceedings of the National academy of Sciences*, v. 106, n. 3, p. 826-831, 2009.