

Estudo Teórico da Fotoionização para a Molécula HC₃N

Adevânia J. da Silva¹, Manoel G. P. Homem^{2*}

^{1,2}Universidade Federal de São Carlos - UFSCar/Rod. Washington Luis, km 235 -
São Carlos - SP - BR. CEP:13565-905

*email: adevaniajustino@gmail.com

Observações espectroscópicas do meio interestelar levaram à observação de uma grande variedade de moléculas orgânicas.¹ Essa complexidade química está relacionada à interação com campos ionizantes,² e a compreensão dos mecanismos reacionais por meio da obtenção de parâmetros cinéticos de interesse, como, por exemplo, as seções de choque de interação radiação-molécula, faz-se necessária. Assim sendo, no presente trabalho, estudou-se teoricamente os processos de ionização direta da molécula de HC₃N por meio do cálculo de seções de choque de fotoionização e parâmetros de assimetria usando o pacote computacional ePolyScat-E3.^{3,4} Esses dados foram obtidos considerando-se os três orbitais mais externos da molécula 2π , 1π e 9σ , cujos potenciais de ionização são 11,643, 13,557 e 14,053 eV, respectivamente.⁵ Os resultados serão apresentados e discutidos durante a conferência.

Referências

1. McGuire, B. A. (2018). 2018 census of interstellar, circumstellar, extragalactic, protoplanetary disk, and exoplanetary molecules. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 239(2), 17.
2. Öberg, K. I. (2016). Photochemistry and astrochemistry: Photochemical pathways to interstellar complex organic molecules. *Chemical Reviews*, 116(17), 9631-9663.
3. Gianturco, F. A., Lucchese, R. R., & Sanna, N. (1994). Calculation of low-energy elastic cross sections for electron-CF₄ scattering. *The Journal of Chemical Physics*, 100(9), 6464-6471.
4. Natalense, A. P., & Lucchese, R. R. (1999). Cross section and asymmetry parameter calculation for sulfur 1s photoionization of SF₆. *The Journal of Chemical Physics*, 111(12), 5344-5348.
5. Leach, S. *et al.* (2014). Ionization photophysics and spectroscopy of cyanoacetylene. *The Journal of Chemical Physics*, 140(17).

Agradecimentos

Este trabalho foi realizado com o apoio da CAPES — código de financiamento 001 —, FAPESP (2015/08258-2), e CNPq, através da concessão da bolsa de estudos vinculada ao processo 130554/2021-9.