

Ionização e dissociação da acetonitrila por colisão de prótons

G. Rocha¹, J. Basílio¹, W. Wolff¹; L. Coutinho¹; F. Ribeiro²; S. López³; A. Mendez³; C. Montanari³

¹ Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro

² Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro

³ Instituto de Astronomia e Astrofísica de Buenos Aires/Conicet

Gabriel.rocha.225@gmail.com

Nitrilas são compostos orgânicos descritos por uma ligação tripla de carbono e nitrogênio (CN), sendo a molécula mais simples da classe a acetonitrila (H₃CCN) [1]. Essas moléculas estão presentes nas atmosferas de planetas e luas e no meio interestelar (ISM), em nuvens e nebulosas. A acetonitrila tem importante função nos processos químicos nesses ambientes. Por exemplo, ela faz parte do ciclo do nitrogênio na Terra e enriquece a química no ISM [2]. Por conta da incidência de radiação ionizante, como elétrons, prótons e íons presentes no vento solar e na radiação cósmica, a acetonitrila é ionizada e posteriormente dissociada em fragmentos carregados ou não [1,2].

O estudo apresenta os processos de ionização dissociativa por impacto de prótons na faixa de 40 - 155 keV da H₃CCN gasosa. A faixa de energia dos prótons é a mesma daqueles que incidem na atmosfera terrestre[3]. Prótons de corrente de nanoampere pulsados são produzidos por uma fonte de íons, alimentadas por H₂, selecionados por um filtro de Wien, pré-acelerados e direcionados inicialmente por um par de placas paralelas. Posteriormente, eles são acelerados por colunas até uma faixa de energia de centenas de keV, transmitidas por 3 quadropolos e 2 placas paralelas em uma câmara em ultra alto vácuo (UHV). O feixe colide com as moléculas de acetonitrila em uma célula gasosa a uma pressão de 0.006 mbar. Os íons resultantes são extraídos da zona de interação por um campo pulsado e são coletados por um espectrômetro de alta resolução temporal, baseado em um detector diodo de alta eficiência de massa. A partir dos espectros de tempo de voo, os possíveis canais de fragmentação são identificados e os rendimentos de formação em relação à molécula original ionizada e a soma das espécies iônicas são determinados. Os valores são, então, comparados aos obtidos pela incidência de elétrons na mesma faixa de velocidade[4]. Seções de choque absolutas são obtidas a partir da normalização da seção de choque total de ionização total teórica calculada por CTMC. Os resultados experimentais podem ser aplicados aos fluxos de elétrons e prótons presentes ou incidentes em objetos estelares, disponíveis na literatura, e a meia vida dessas moléculas podem ser medidas.

Os experimentos foram realizados no Instituto Nacional de Metrologia da Alemanha (PTB) com a colaboração de Gerhard Hilgers e Volker Dangendorf e coordenação de Wania Wolff.

Referências

1. ACS *Earth Space Chem.* 2022, 6, 4, 1126–1132
2. A&A 647, A82 (2021) <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202039695>
3. Ceccarelli, C. et al. (2022). Organic chemistry in the first phases of Solar-type protostars. arXiv preprint arXiv:2206.13270.
4. NIST. Nist Web Book. Disponível em: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>. Visualizado em: 30/08/2023