

Propriedades Espectroscópicas do Etanol obtidas com Espalhamento Ressonante Inelástico de Raios-X

Lucas M. Cornetta^{1*}, Ricardo dos R. Marinho², Jan-Erik Rubensson³, Olle Björneholm³, Johan Söderström³, Hans Ågren³, Arnaldo N. De Brito¹

¹*Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP*

²*Universidade de Brasília*

³*Department of Physics and Astronomy, Ångströmlaboratoriet, Uppsala University*

*email: lucascor@unicamp.br

A condução de experimentos baseados na espectroscopia ressonante de raios-X (RIXS) de alta resolução vem sendo viabilizados nos últimos anos com a evolução de linhas de luz em síncrotrons de quarta geração e *X-ray Free Electron Lasers*. Além de serem elemento-específico, medidas RIXS de alta resolução permitem resolver a estrutura vibracional no estado final como resultado da dinâmica quântica do estado de caroço-excitado, o que possibilita a investigação de diversas propriedades espectroscópicas simultaneamente.

Nesse trabalho apresentamos medidas RIXS da molécula de etanol em fase líquida. Os espectros foram obtidos na borda *K* do átomo de oxigênio, onde focamos no intervalo de perda de energia entre 0 – 8 eV. Essa faixa compreende o canal de espalhamento quasi-elástico e o canal de excitação eletrônica para o primeiro estado excitado. Esses canais apresentam, respectivamente, assinaturas de progressão vibracional e de eliminação ultra-rápida de hidrogênio. Além disso, também apresentamos técnicas teóricas para o cálculo de seções de choque RIXS para sistemas moleculares.

Referências

- Faris Gel'mukhanov and Hans Ågren, *Phys. Reports* **312**, 87 (1999)
Faris Gel'mukhanov, *et al. Rev. of Mod. Phys.* **93**, 035001 (2021)
Vinicius Vaz da Cruz *et al. J. Chem. Phys.* **150**, 234301 (2019)
Vinicius Vaz da Cruz *et al. Nature Comm.* **10**, 1013 (2019)