

Fragmentação por Impacto de Elétrons da R-carvona

R.A.A. Amorim^{1*}, M.C.A. Lopes¹, W.A.D. Pires¹, A.C.P. Fernandes¹,
T.M. Casagrande¹, D.B. Jones², F. Blanco³, G. García⁴, M.J. Brunger^{2,5}

¹ Departamento de Física, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, MG,
36936-900, Brasil

² College of Science and Engineering, Flinders University, GPO Box 2100, Adelaide,
SA, 5001, Australia

³ Departamento de Estructura de la Materia, Física Térmica y Electrónica e
IPARCOS, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, Spain

⁴ Instituto de Física Fundamental, Consejo Superior de Investigaciones Científicas
(CSIC), Serrano 113-bis, 28006, Madrid, Spain

⁵ Dept of Actuarial Science and Applied Statistics, Faculty of Business and
Management, UCSI University, Kuala Lumpur, 56000, Malaysia

*email: raony.amorim@ufjf.br

Este trabalho tem como objetivo a investigação da fragmentação por impacto de elétrons da R-carvona, molécula presente na hortelã (*Menta Spicata*). Este composto, que contém fórmula molecular $C_{10}H_{14}O$ e massa 154 u.m.a., possui diversas aplicações biológicas na área da saúde, destacando-se no seu potencial no tratamento contra o câncer. Neste trabalho, foram realizadas medidas experimentais dos cátions produzidos por ionização por impacto de elétrons, usando um Espectrômetro de Massa Quadrupolo Híbrido (EPIC 300), com resolução de 1 u.m.a. O espectro de massa (EM) registrado revelou a probabilidade relativa de formar 103 cátions diferentes da R-carvona. Seções de Choque de Ionização Parciais (SCIP) individuais para os 78 principais fragmentos catiônicos foram medidos na região de energias de elétrons de 8 - 100 eV. Seções de Choque de Ionização Totais (SCIT) foram geradas pela adição das SCIP dos 78 fragmentos catiônicos da R-carvona. Além disso, foram determinadas as energias de aparecimento (*Appearance Energies* - AEs) e Expoentes de Wannier para 38 dos fragmentos catiônicos principais observados em nossos experimentos.

Referências

1. M. C. A. Lopes, W. A. D. Pires, R. A. A. Amorim, A. C. P. Fernandes, T. M. Casagrande, D. B. Jones, F. Blanco, G. García, M. J. Brunger, *Int. J. Mass Spectrom.* **456** (2020) 116395.
2. R. A. A. Amorim, W. A. D. Pires, A. C. P. Fernandes, T. M. Casagrande, D. B. Jones, F. Blanco, G. García, M. J. Brunger, M. C. A. Lopes, *Int. J. Mass Spectrom.* **464** (2021) 116556.
3. R. A. A. Amorim, W. A. D. Pires, A. C. P. Fernandes, T. M. Casagrande, D. B. Jones, F. Blanco, G. García, M. J. Brunger, M. C. A. Lopes, *Eur. Phys. J. D* (2021) **75**:217.
4. Amorim, Raony A. A.. **Mecanismos de Fragmentação Iônica da R-carvona Produzidos pelo Impacto de Elétrons com Baixas Energias**. Tese (Doutorado em Física) – Departamento de Física, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora – MG, 2023.