

Explorando o alinhamento molecular em superfícies líquidas por NEXAFS

Ricardo dos Reis Teixeira Marinho^{1*}, Alexandra Mocellin¹, Olle Björneholm², Arnaldo Naves de Brito³, Gunnar Öhrwall⁴

¹*Instituto de Física da Universidade de Brasília - Brasil*

²*Departamento de Física e Astronomia da Universidade de Uppsala - Suécia*

³*Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas - Brasil*

⁴*Laboratório MAX IV, Universidade de Lund - Suécia*

*ricardo.marinho@unb.br

Os oceanos são uma importante fonte de aerossóis atmosféricos (AA). Sua composição conta com diversos materiais orgânicos que podem chegar a 90% de sua massa [1]. Os efeitos dos AA foram identificados pelo Painel Intergovernamental das Nações Unidas sobre Mudanças Climáticas (IPCC) como grandes incertezas nos modelos climáticos [2]. Assim, uma melhor compreensão ao nível molecular destes é importante para melhorar a modelagem climática. Especificamente, devido ao pequeno tamanho dos aerossóis, os fenômenos e processos de superfície, ou interface líquido-gás, tornam-se especialmente importantes.

Estudos da composição da superfície dos aerossóis e a investigação de interfaces líquidos-gás podem ser realizados por meio da espectroscopia de fotoelétrons na região dos raios X (XPS) em combinação com microjatos de soluções aquosas [3-5]. Em experimentos recentes, medidas de absorção na região dos raios X (XAS) de soluções aquosas de ácido benzóico foram realizadas na linha de luz FlexPES do laboratório síncrotron sueco MAX IV. Nessas medidas, foram utilizados microjatos planos e foram variados o ângulo do analisador, em relação ao vetor normal à superfície líquida, e também o ângulo de *take-off* dos fotoelétrons em relação ao espectrômetro de elétrons.

Nessa apresentação será discutido como a espectroscopia de absorção na região dos raios X (XAS) pode ser utilizada para investigar a geometria molecular e especiação das moléculas na interface líquido-gás de microjatos líquidos planos, os quais simulam aerossóis atmosféricos.

Referências

1. L. Jimenez et al., "Evolution of organic aerosols in the atmosphere." *Science*, vol. 326, no. 5959, pp. 1525–9, Dec. 2009.
2. "Climate Change 2022: Impacts, Adaptation and Vulnerability | Climate Change 2022: Impacts, Adaptation and Vulnerability." <https://www.ipcc.ch/report/ar6/wg2/>
3. M. Walz et al., "Surface behavior of amphiphiles in aqueous solution : a comparison between different pentanol isomers," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 17, pp. 14036–14044, 2015.
4. G. Öhrwall et al., "Acid-Base Speciation of Carboxylate Ions in the Surface Region of Aqueous Solutions in the Presence of Ammonium and Aminium Ions," *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 119, no. 10, pp. 4033–4040, 2015
5. J.-E. R. and O. B. v Ekholm, C Caleman, N Bjärnhall Prytz, M-M Walz, J Werner, G Öhrwall, "Strong enrichment of atmospherically relevant organic ions at the aqueous interface : the role of ion pairing and cooperative effects," *Phys Chem Chem Phys*, vol. 20, p. 27185, 2018.