

Estudo da Ionização Dissociativa da Molécula de Dimetil Sulfeto e Determinação de Entalpias de Formação de Cátions

Ana L. C. Doimo^{1*}, Manoel. G. P. Homem²

Departamento de Química - Universidade Federal de São Carlos
Rod. Washington Luis, km 235, SP-310, São Carlos-SP, 13565-905

*email: analuizac.doimo@gmail.com

Investigamos experimentalmente o padrão de dissociação iônica induzida por impacto eletrônico da molécula de dimetil sulfeto (C_2H_6S) usando espectrometria de massas por tempo de voo. Essa molécula é a principal fonte de enxofre de origem não antropogênica na atmosfera e desempenha um papel importante na formação de núcleos de condensação de nuvens, participando, dessa forma, da regulação do clima¹. Dados de seções de choque parciais para produção de cátions provenientes do processo de dissociação iônica, bem como a seção de choque de ionização total foram obtidos na faixa que se estende do limiar de ionização até 400 eV. Para a obtenção dos dados absolutos foi empregada a Técnica de Fluxo Relativo². Na Fig. 1 mostramos os dados experimentais comparados com cálculos realizados na aproximação Binary Encounter Bethe (BEB)³ empregando-se diferentes funcionais de densidade para a descrição da molécula. Além disso, dados para as energias de aparecimento foram obtidos⁴. Os resultados serão apresentados e discutidos durante o Workshop.

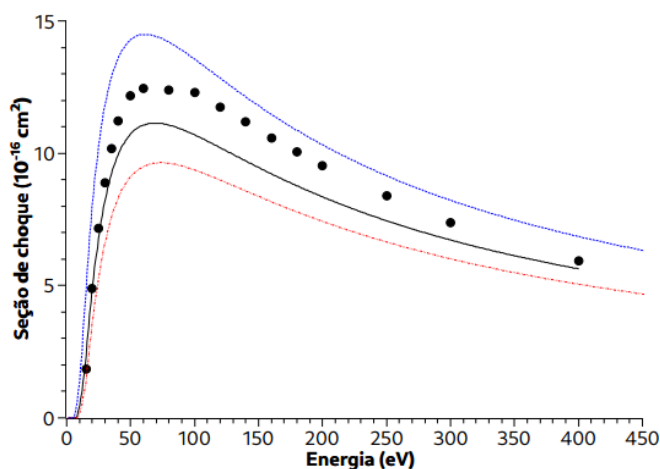


Figura 1. Seção de choque de ionização experimental comparada com resultados do cálculo BEB. Curva azul: WB97X; curva preta: CAMB3LYP; curva vermelha: B3LYP.

Referências

1. R. J. Charlson, J. E. Lovelock, M. O. Andreae and S. G. Warren, *Nature* **326**, 655–661 (1987).
2. M. G. P. Homem, I. Iga, R. T. Sugohara, I. P. Sanches and M.-T. Lee, *Review of Scientific Instruments* **82**, 013109 (2011).
3. Y.-K. Kim and M. E. Rudd, *Physical Review A* **50**, 064313 (1994).
4. R. A. Fass and S. G. Kendall, *Journal of Chemical Education* **48**, 545 (1971).

Agradecimentos

Esse trabalho foi realizado com o apoio do CNPq e FAPESP (2015/08258-2; 2021/09641-5).