

Fragmentos e agregados iônicos de acetonitrila e metanol em fase condensada por impacto de elétrons energéticos

André M. R. Giralddi^{1*}, Jorge H. Basílio¹, Michelle Baschin³, Fabio Ribeiro² e Wania Wolff¹

¹*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil*

²*Instituto Federal do Rio de Janeiro, Nilópolis, Rio de Janeiro, Brasil*

³*Berlin University of Applied Science, Berlin, Germany*

*e-mail: ddrocco@hotmail.com

As moléculas de metanol e acetonitrila são espécies orgânicas de importância prebiótica, desempenhando um papel vital na criação da química necessária para a existência da vida. O metanol e a acetonitrila são respectivamente o mais simples álcool, CH₃OH, e a mais simples nitrila, CH₃CN. Um conhecimento da interação de moléculas em sólidos moleculares é objeto de estudo sob várias perspectivas, inclusive apresentando relevância na ciência espacial. A presença das moléculas em ambientes astroquímicos, como a Nebulosa de Órion, o disco protoplanetário TW-Hydrae e na lua de Saturno, Titã, motivou a investigação da interação entre as mesmas [1]. A incidência de elétrons em metanol condensado, em condições semelhantes ao ISM, produziu uma variedade de produtos, incluindo glicerol, enquanto em diferentes nitrilas resultou na detecção de aminoácidos em laboratório.

Sondar a interação da acetonitrila com metanol sem a presença de água tem sido um tema desafiador, já que a água tem a característica de encapsular as moléculas [2,3]. Inicialmente, aplicamos a espectroscopia de massa por tempo de voo e a dessorção programada por temperatura em metanol e acetonitrila pura para determinar o padrão de fragmentação e formação de agregados das moléculas isoladamente. Dois regimes de deposição e crescimento dos filmes condensados foram aplicados para sondar suas interações no estado sólido: bi-camada e co-deposição.

No primeiro regime, as moléculas sublimadas são depositadas sequencialmente formando filmes sobrepostos e no segundo, são injetadas simultaneamente na fase gasosa e um filme dessa mistura é formado. Os experimentos foram realizados em uma temperatura de 120K e pressão de base de 1×10^{-9} mbar, com pressões de injeção dos compostos da ordem de 1×10^{-7} mbar. Selecionando-se o metanol-d₄ (CD₃OD) e a acetonitrila (CH₃CN), identificou-se a interação entre as moléculas de forma unívoca.

A partir da técnica MS-TOF determinou-se os íons ejetados da superfície do filme, e a abundância dos fragmentos e agregados iônicos gerados pelo impacto dos elétrons de 2300 keV. A técnica TPD permitiu verificar a qualidade do filme, a quantidade das moléculas adsorvidas e a estrutura multi- e monocamada do filme. Verificou-se que a interação entre as moléculas, a qual resulta na formação de agregados de (CH₃CN)_n e (CD₃OD)_n acrescidos de átomos de hidrogênio da acetonitrila e deutério do metanol e radicais de ambas as moléculas, é fortemente dependente do processo de crescimento dos filmes condensados, da razão molar entre os compostos e da presença de água. O processo de cozimento alterou de forma significativa a produção de fragmentos e agregados.

Referências

1. D. J. Burke, W. Brown, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 5947– 5969 (2010).
2. Rabin R. J. Methikkalan *et al.*, *J. Phys. Chem. C* **121**, 2822–2835, (2017).
3. Ryutaro Souda, *The Journal of Physical Chemistry C* **120**, 934-943, (2016).