

# Investigação das estruturas moleculares e da dinâmica de fotoionização dissociativa induzida por radiação VUV de moléculas poliatômicas por teorias *ab initio* e espectroscopia de coincidência fotoelétron-fotoíon

Alexandre Figueiredo Lago<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC (UFABC),  
09210-580 Santo André, SP, Brazil

\*email: alexandre.lago@ufabc.edu.br

**Resumo :** Moléculas orgânicas halogenadas tem sido objeto de importantes estudos teóricos e experimentais avançados, devido às diversas aplicações de tais espécies em distintas áreas do conhecimento científico e tecnológico. Dentre os diversos sistemas moleculares deste tipo investigados em nosso grupo, para fins desta apresentação, serão destacados os recentes resultados obtidos para a molécula de cloroacetona ( $C_3H_5OCl$ ) em fase gasosa. Radiação síncrotron no ultravioleta a vácuo (VUV), cobrindo a faixa de energia entre 10 - 21,50 eV foi empregada como agente ionizante, e os produtos iônicos resultantes foram analisados por espectrometria de massa de tempo de voo (TOF-MS) no modo de coincidência fotoelétron-fotoíon (PEPICO). As energias de aparecimento dos fragmentos catiônicos mais relevantes produzidos nesta faixa de energia foram determinadas, e os caminhos de fragmentação mais prováveis que levam à formação das espécies iônicas foram propostos e discutidos. Os espectros de massa mostram que o produto catiônico de fotodissociação mais dominante para a molécula de cloroacetona, nesta região do VUV, aparece em  $m/z$  43 e foi atribuído à espécie  $C_2H_3O^+$ . Os outros canais de dissociação e demais produtos iônicos também foram analisados criteriosamente. Combinando os dados experimentais e teóricos, conseguimos determinar as entalpias de formação correspondentes ( $\Delta_f H^\circ 0K$ ) para as espécies neutras e catiônicas mais importantes dessas moléculas. Além da análise dos dados experimentais, os parâmetros teóricos estruturais e energéticos para as espécies neutras e catiônicas associadas, e as vias de fotodissociação, também foram examinados, com base em cálculos mecânico quânticos em altos níveis de teorias (*ab initio* e DFT), os quais também serão apresentados.

## Referências

1. D. O. Rogério, A. F. Lago; Journal of Molecular Structure, 1220 (2020) 128703(1-8).
2. D. O. Rogério, R. L. Cavasso-Filho, and A. F. Lago; Journal of the American Society for Mass Spectrometry , 32, (2021) 2186–2195.