

Estudo da Dissociação de Espécies Aniônicas e Catiônicas do Metano e Sua relação com a Irradiação de Gelos Astrofísicos

Authors: Leonardo Baptista¹, Enio Frota da Silveira²

Address: ¹Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Tecnologia,

Departamento de Química e Ambiental,

²Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física

Resumo: No meio interestelar (ISM), cometas meteoritos e superfícies planetárias são constantemente bombardeadas por radiação e vento solar. É sabido que este processo de irradiação leva à erosão de sólidos e à síntese de novas moléculas. A molécula de metano é encontrada em diversos corpos congelados de nosso sistema solar, como nas nuvens de gelo de planetas Jovianos, em Titã e na superfície de plutão. Por meio de experimentos pode-se constatar que o bombardeio de metano sólido por íons pesados de alta energia leva à síntese de hidrocarbonetos. Após irradiação, foram observados como produtos majoritários: etano, eteno, etino e propano[1]. A partir dos dados experimentais surge a questão: Qual o mecanismo que leva ao crescimento da cadeia carbônica após impacto dos íons? Este trabalho tem como objetivos de longo prazo descrever os caminhos de dissociação do metano após ionização[2] e captura de elétrons e, finalmente, relacionar estes processos a síntese de novas moléculas em gelos astrofísicos. Neste momento será apresentada a descrição quanto-mecânica da dissociação do CH_4 e CH_4^- . Todo o estudo de dissociação foi realizado em nível multiconfiguracional (CASSFC e NEVPT2) com espaço ativo de nove elétrons e oito orbitais, no caso do ânion, oito elétrons e oito orbitais para molécula neutra, e base 6-311++G(d,p). Os caminhos de dissociação foram descritos e, quando possível, são propostas geometrias para as estruturas de transição envolvidas nestes caminhos. A investigação da contribuição dos estados eletrônicos excitados do metano para dissociação e captura de elétrons foi investigada em nível MRCISD. Inicialmente os resultados dos coeficientes de velocidade microcanônicos, calculados via teoria RRKM e dados de estrutura eletrônica obtidos em nível NEVPT2(9,8)/6-311++G(d,p), foram comparados com as seções de choque de dissociação induzida por captura de elétrons do metano (Figura 1)[3]. Qualitativamente observa-se um bom acordo entre as $k(E)$ calculadas e a seção de choque experimental. Ambos os dados indicam que após a captura de elétrons o caminho de dissociação majoritário é a formação de CH_3 e H . Comparações entre as curvas de dissociação do metano neutro e metano aniônico estão sendo realizadas a fim de se entender como a captura de elétrons afeta o processo de dissociação e como tais processos se relacionam com a irradiação de gelos astrofísicos.

XIX SBOQT

Simpósio Brasileiro de Química Teórica 2017

12 a 17/Nov, 2017, Águas de Lindóia/SP, Brasil

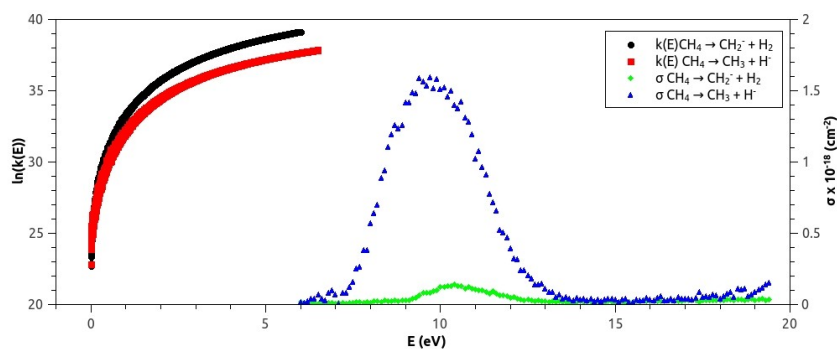


Figura 1: Comparação da seção de choque para dissociação induzida por captura de elétrons[3] e $k(E)$ calculada via teoria RRKM e propriedades eletrônicas e estruturais calculadas em nível NEVPT2(9,8)/6-311++G(d,p).

Key-words: dissociação do metano, métodos multiconfiguracionais, astroquímica, teoria RRKM

Support: FAPERJ e CNPq

References:

- [1] A. L. F. de Barros et al. A&A 531, A160 (2011)
- [2] L. Baptista, E. F. da Silveira, Phys. Chem. Chem. Phys., 16, 21867, (2014)
- [3] M. Song et. al., J. Phys. Chem. Ref. Data, 44, 023101-1, (2015)