

# Espalhamento elástico de elétrons de baixa energia por moléculas de nitrobenzeno

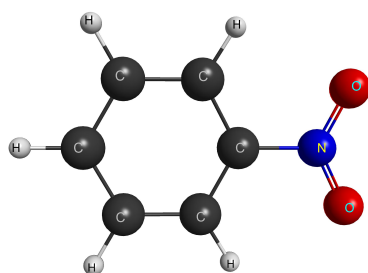
Leticia S. Maioli<sup>1</sup>, Márcio H. F. Bettega<sup>2</sup>,

Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Caixa Postal 19044, 80531-990, Curitiba, Paraná, Brasil

**Sinopse** Neste trabalho apresentamos as seções de choque calculadas para o espalhamento elástico de elétrons de baixa energia por moléculas de nitrobenzeno, onde verifica-se a presença de duas ressonâncias de forma  $\pi^*$  em baixas energias pertencentes as simetrias  $A_2$  e  $B_1$ . Comparamos suas posições em energia com resultados encontrados na literatura [1].

Nitro compostos são moléculas com grande importância industrial, particularmente utilizadas como base de explosivos [2]. Como estes contêm um ou mais grupos funcionais  $\text{NO}_2$  apresentam facilidade em aceitar elétrons em decorrência da interação do elétron com o orbital molecular de mais baixa energia desocupado (LUMO) do grupo  $\text{NO}_2$  [1].

Neste trabalho apresentamos as seções de choque para o espalhamento elástico de elétrons de baixa energia por moléculas de nitrobenzeno ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$ ) calculadas utilizando-se o método multicanal de Schwinger (SMC) [3, 4] implementado com pseudopotenciais de Bachlet, Hamann e Schlüter (SMCPP) [5] dentro das aproximações estático-troca (SE) e estático-troca mais polarização (SEP).



**Figura 1.** Estrutura geométrica da molécula de nitrobenzeno.

A figura 1 representa a estrutura geométrica do nitrobenzeno, que surge da substituição de um hidrogênio do benzeno pelo radical  $\text{NO}_2$  resultando assim na quebra tanto da simetria do benzeno quanto da dupla degenerescência de seu orbital  $e_{2u}$ . Portanto, o nitrobenzeno pertence ao

grupo pontual  $C_{2v}$  e, quando realizada a decomposição da seção de choque integral por simetria, verifica-se duas ressonâncias de forma  $\pi^*$  pertencentes as simetrias  $A_2$  e  $B_1$  localizadas em 0,975 eV e 2,065 eV, respectivamente, de acordo com o cálculo na aproximação SEP. A primeira ressonância é associada a componente do orbital  $\pi^*$  ( $e_{2u}$ ) do benzeno nesta simetria e a segunda relacionada a mistura da componente do LUMO do benzeno com o orbital  $\pi^*$  do  $\text{NO}_2$  [1].

O LUMO do nitrobenzeno é composto pela mistura do orbital  $\pi^*$  ( $b_1$ ) do radical  $\text{NO}_2$  e a componente do orbital  $\pi^*$  ( $e_{2u}$ ) do benzeno. Sendo este responsável pela ressonância que identificamos na seção de choque dentro da aproximação estático-troca, porém no momento em que a polarizamos esta ressonância se torna um estado ligado.

Com o fato de não haver seções de choque elástica para o nitrobenzeno na literatura, há somente a possibilidade de comparação das posições em energia das ressonâncias obtidas por outros métodos [1].

## Referências

- [1] A. Modelli, M. Venuti. *Int. J. Mass Spectrom.* **205**, 7 (2001).
- [2] T. B. Brill, K. J. James. *Chem. Rev.* **93**, 2667 (1993).
- [3] K. Takatsuka, V. McKoy. *Phys. Rev. A* **24**, 2473 (1981).
- [4] K. Takatsuka, V. McKoy. *Phys. Rev. A* **30**, 1734 (1984).
- [5] M. H. F. Bettega, L. G. Ferreira, M. A. P. Lima. *Phys. Rev. A* **47**, 1111 (1993).

<sup>1</sup>E-mail: [lsm10@fisica.ufpr.br](mailto:lsm10@fisica.ufpr.br)

<sup>2</sup>E-mail: [bettega@fisica.ufpr.br](mailto:bettega@fisica.ufpr.br)