

Espalhamento elástico de elétrons de baixa energia por moléculas de CH₃CN

Leticia S. Maioli¹, Márcio H. F. Bettega²

Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Caixa Postal 19044, 81531-990, Curitiba, Paraná, Brasil

Sinopse Neste trabalho apresentamos as seções de choque calculadas para o espalhamento elástico de elétrons de baixa energia por moléculas de CH₃CN. Comparamos nossas seções de choque com resultados teóricos recentes, obtidos pelo método da matriz-R [1].

Com a descoberta de moléculas de cianetos em meio interestelar temos um indício de que a vida pode ter se originado nele e não nos planetas em si, pois acredita-se que os cianetos são precursores dos amino ácidos e estes, por sua vez, são elementos cruciais ao suporte de vida [2, 3].

Portanto, neste trabalho apresentamos as seções de choque calculadas para o espalhamento elástico de elétrons de baixa energia por moléculas do cianeto de metila (CH₃CN). Utilizamos o Método Multicanal de Schwinger (SMC) [4, 5] implementado com pseupotenciais de Bachlet, Hamann e Schlüter (SMCPP) [6] para o cálculo das seções de choque, a qual foi descrita nas aproximações estático-troca (SE) e estático-troca mais polarização (SEP).

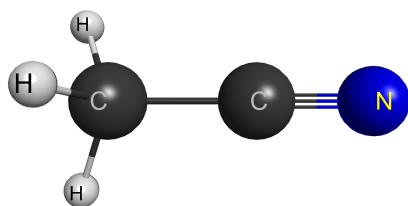


Figura 1. Estrutura geométrica da molécula de CH₃CN.

A figura 1 representa a estrutura geométrica otimizada do CH₃CN – pertencente ao grupo pontual C_{3v}, calculada utilizando-se o pacote GAMESS [7] e teoria de perturbação de Møller-Plesset de segunda ordem (MP2) empregando o conjunto de base ACCD. Em decorrência da ligação tripla entre o carbono e nitrogênio, esta apresenta uma ressonância de forma π^* local-

izada na simetria E, envolvendo orbitais duplamente degenerados. No entanto, como consequência da implementação do código do SMC, a molécula deve ser representada por um grupo abeliano. Logo, efetuamos os cálculos dentro do grupo pontual C_s e nota-se a presença de componentes da mesma ressonância π^* em ambas simetrias, A' e A''. Identifica-se então a posição, em energia, desta ressonância nas seções de choque na aproximação estático-troca girando em torno de 4,6 eV, porém passa à aproximadamente 2,6 eV quando adicionamos a polarização nos cálculos.

Para efeitos de comparação, encontra-se na literatura seções de choque elástica integral e diferencial para o CH₃CN, obtidas teoricamente através do método da matriz-R [1], onde os autores localizam a ressonância π^* em torno de 2,4 eV.

Referências

- [1] M. M. Fujimoto, E. V. R. de Lima, J. Tennyson. *Eur. Phys. J. D* **69**, 153 (2015).
- [2] R. J. Habing, G. H. Macdonald. *AA* **252**, 705 (1991).
- [3] A. Brack. *Molecular Origins of Life*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [4] K. Takatsuka, V. McKoy. *Phys. Rev. A* **24**, 2473 (1981).
- [5] K. Takatsuka, V. McKoy. *Phys. Rev. A* **30**, 1734 (1984).
- [6] M. H. F. Bettega, L. G. Ferreira, M. A. P. Lima. *Phys. Rev. A* **47**, 1111 (1993).
- [7] M. W. Schmidt, K. K. Baldridge, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. H. Jensen, S. Kos- eski, N. Matsunaga, K. A. Nguyen, S. J. Su, T. L. Windus, M. Dupuis, J. A. Montgomery. *Journal of Computational Chemistry* **14**, 1347 (1993).

¹E-mail: lsm10@fisica.ufpr.br

²E-mail: bettega@fisica.ufpr.br