

# Estudo Teórico-Experimental da seção de choque de fotoionização e fotoabsoção do Pirrol na região do ultravioleta de vácuo

Josenilton do Nascimento Sousa<sup>1\*</sup>, Frederico Vasconcellos Prudente<sup>1†</sup>, Milton Massumi Fujimoto<sup>2†</sup>,  
Manoel G. P. Homem<sup>3†</sup>, Helder Kenji Tanaka<sup>1†</sup>, Ricardo dos Reis Teixeira<sup>1†</sup>, Bruno Cecilio Credidio<sup>1†</sup>,  
Luiz E. Machado<sup>4†</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador, BA, Brasil.

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, Brasil.

<sup>3</sup> Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP, Brasil.

<sup>4</sup> Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP, Brasil.

**Sinopse.** Neste trabalho será apresentado um estudo teórico-experimental da seção de choque de fotoionização e fotoabsorção do Pirrol na região do ultravioleta de vácuo.

O espaço compreendido entre estrelas, os meios interestelares, são uma vasta fonte de matéria-prima para origem de estrelas e sistemas planetários e também servem como ‘depósito’ para partículas remanescentes de sistemas estelares extintos. Nos primeiros modelos apresentados, por van de Hulst em 1943, os átomos mais abundantes nos meios interestelares (O, C, N), após o hidrogênio, se fixariam na superfície de grãos interestelares – cuja temperatura está na ordem 10K – e se combinariam com átomos de hidrogênio ali presentes, formando moléculas de água (H<sub>2</sub>O), amônia (NH<sub>3</sub>) e metano (CH<sub>4</sub>). Nesse contexto, o estudo da seção de choque de fotoabsorção e fotoionização de espécies moleculares tem fundamental importância em quantificar processos fotoquímicos em ambientes como a atmosfera terrestre superior e o meio interestelar, onde densidades significativas de fótons de ultravioleta e ultravioleta de vácuo estão presentes. E, particularmente, o conhecimento da seção de choque de ionização absoluta para espécies poliatômicas complexas perpassa, em geral, por uma determinação experimental.

Em astrobiologia acredita-se que compostos orgânicos cíclicos podem ter desempenhado um importante papel na evolução da vida na terra, tendo importantes funções pré-bióticas. Especificamente, estamos interessados em estudar as moléculas orgânicas heterocíclicas fundamentais mais simples de 5 e 6 membros pela importância delas na compreensão da síntese de espécies cíclicas mais complexas do meio interestelar.

Nesse contexto, o presente trabalho consiste no estudo teórico-experimental da fotoestabilidade da molécula heterocíclica do Pirrol, por meio da medida da seção de choque de fotoabsorção e fotoionização. Do ponto de vista experimental usamos a radiação síncrotron na região de ultravioleta de vá-

cuo (energia entre 8 e 21 eV), para medida da seção de choque de fotoabsorção e fotoionização utilizando uma câmara dupla de ionização. O estudo teórico consiste no uso do método teórico-computacional de Schwinger, isto é, do Método Variacional Iterativo de Schwinger (SVIM), adaptado para interação da molécula com fótons.

Agradecimentos: CAPES, LNLS

## Referências

- [1] F. V. Prudente, Estudo do Processo de Fotodissociação de Moléculas, Dissertação de Mestrado, Universidade de Brasília, (1996).
- [2] G. Cooper, J. E. Anderson, C. E. Brion, Chem. Phys. 209 (1996) 61-77.
- [3] H. K. Tanaka, Fotoionização de Moléculas de Interesse Biológico na Região do Ultravioleta de Vácuo, Dissertação de mestrado, Salvador (2012).
- [4] J. A. Samson and D. L. Ederer, Vacuum Ultraviolet Spectroscopy, Ed. Elsevier, (1999).
- [5] M. G. P. Homem, P. Iza, L. S. Farenzena, R. L. Cavasso-Filho, M. T. Lee, I. IGA, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 42, (2009).
- [6] R. R. Lucchese, G. Raseev, and V. McKoy, Phys. Rev. A 25, 2572 (1982).
- [7] R. R. Lucchese, G. Raseev, and V. McKoy, Phys. Rev. A 21, (1980).

---

<sup>1\*</sup> E-mail: niltinhonc@gmail.com