

ENERGIAS DE APARECIMENTO E EXPOENTES WANNIER DE FRAGMENTOS IÔNICOS DO SEC-BUTANOL

O. L. Oliveira Junior¹, A. C. Diniz¹, M. C. A. Lopes¹, R. A. A. Amorim¹, C. B. Oliveira¹, D. B. Jones², F. Blanco³, G. García⁴, M. J. Brunger^{2, 5, †}. † Em memória.

¹Departamento de Física, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, MG 36936-900, Brazil

²College of Science and Engineering, Flinders University, GPO Box 2100, Adelaide, SA 5001, Australia

³Departamento de Estructura de la Materia, Física Térmica y Electrónica e IPARCOS, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain

⁴Instituto de Física Fundamental, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Serrano 113-Bis, 28006 Madrid, Spain

⁵Department of Actuarial Science and Applied Statistics, Faculty of Business and Information Science, UCSI University, 56000 Kuala Lumpur, Malaysia

Neste trabalho, os valores do Espectro de Massa (EM) e da Energia de Aparecimento (AE – *Appearance Energy*) dos fragmentos iônicos formados em colisões de elétrons com moléculas do sec-butanol (ou 2-butanol) foram estudados usando um Espectrômetro de Massa HIDEN EPIC300. O EM foi adquirido para energia de impacto de elétrons de 70 eV, com resolução de massa de 1 u.m.a.. Os AE's foram determinados a partir da aquisição de curvas de fragmentação iônica do sec-butanol para as energias de impacto de elétrons cobrindo a região do fragmento iônico, limiar de formação até cerca de dez eV acima deste valor. A Lei de Wannier estendida convoluída com a dispersão gaussiana da energia dos elétrons incidentes no secbutanol foi aplicada para obter a função de fragmentação iônica, que foi ajustada para a dados experimentais para obtenção dos AE's. O Espectrômetro de Massa registrou 54 fragmentos iônicos, distribuídos em 6 grupos de picos, 30 deles com abundâncias acima de 1% e apenas o pico base com abundância superior a 50%. A intensidade do espectro foi normalizada tomando como referência o pico base, atribuído à formação do íon $C_2H_5O^+$, observado em 45 u.m.a.. O pico responsável pela formação do sec-butanol monocarregado ($C_4H_{10}O^+$) tem uma baixa abundância, indicando sua alta instabilidade. A resolução do EM obtida neste trabalho e o número de picos observados é muito maior do que os dados relatados na literatura, provavelmente devido à alta resolução do aparelho utilizado. A atribuição dos picos observados no EM aos cátions formados na colisão de elétrons com sec-butanol é relatado, e para alguns deles, apresentamos uma atribuição provisória, uma vez que suas relações massa/carga pode corresponder à formação de diferentes cátions. Os coeficientes AE e Wannier (p) dos fragmentos registrados no EM com intensidades relativas superiores a 5 u.m.a. foram determinados, totalizando 16 fragmentos, 12 dos quais foram relatados pela primeira vez na literatura.