

ESPECTRO DE MASSA E ENERGIA DE APARECIMENTO DE FRAGMENTOS CATIÔNICOS PELA IONIZAÇÃO DE ELÉTRONS DO 2-BUTANOL

O. L. Oliveira Junior^{1*}, R. A. A. Amorim¹, A. C. Diniz¹, C. B. Oliveira¹, D. B. Jones², F. Blanco³, G. Garcia⁴, M. J. Brunger^{2,5†}, M. C. A. Lopes¹. †*Em memória.*

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

² *College of Science and Engineering, Flinders University, GPO Box 2100, Adelaide, AS 5001, Australia.*

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

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

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

O presente trabalho tem como principal motivação a busca de biocombustíveis alternativos, sendo o 2-butanol o álcool escolhido para ser estudado devido às suas vantagens, como por exemplo sua alta densidade energética, o que lhe confere uma ótima eficiência. Os resultados previstos deste trabalho contribuem com os avanços no conhecimento científico das propriedades desta biomolécula. Foram coletados dados das colisões de elétrons com o 2-butanol utilizando o HIDEN-EPIC300 *Mass Spectrometer*, seguimos com tratamento dos dados para obtenção do MS (Espectro de Massas) e também foram obtidas as curvas do EA (*Appearance Energy*) de determinados fragmentos catiônicos. O MS foi obtido para elétrons com energia de impacto de 70 eV, na região de massa de 1-75 amu com resolução de 1 amu, foram observados a formação de 51 fragmentos catiônicos. As Abundâncias Relativas dos picos registrados no MS foram comparadas com os valores disponíveis relatados na literatura com excelente concordância. Os EAs foram determinados a partir da fragmentação do 2-butanol para as energias de impacto de elétrons cobrindo a região de formação do fragmento iônico. Aplicamos a lei de Wannier para obter os EAs e o expoentes (p) dos fragmentos registrados no MS com intensidades relativas tipicamente maior que 0,5% dos fragmentos mais intensos, obtendo assim, dados para 22 fragmentos, dos quais 19 foram relatados pela primeira vez na literatura.