

# Estudo dos mecanismos de dissociação iônica da molécula de 2-Imidazolidinona através da técnica TOF-MS (PEPICO) na região do VUV

Alexandre F. Lago<sup>1\*</sup> (PQ), Leandro C. R. dos Santos<sup>1\*</sup> (IC), Juan Z. Dávalos<sup>2</sup>(PQ), Arminda Tirado<sup>3</sup> (PQ)

E-mail: alexandre.lago@ufabc.edu.br, leandro\_rsantos08@hotmail.com

<sup>1</sup> Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, Santo André –SP, 09090-400, Brasil

<sup>2</sup> Instituto de Química-Física “Rocasolano”, CSIC, Serrano 119, 28006, Madri, Espanha.

<sup>3</sup> Universidad Nacional Federico Villarreal, Facultad de Ciencias Naturales y Matematica, Lima, Peru.

Palavras Chave: Fotoionização, TOF-MS, fragmentação iônica, Radiação síncrotron, moléculas.

## Introdução

O conhecimento dos mecanismos de interação de fótons e elétrons com átomos e moléculas tem sido de fundamental importância para várias áreas do conhecimento humano, tais como química, física, biologia, astrofísica, e medicina, dentre outros, e têm levado a avanços científicos e tecnológicos sem precedentes.

O estudo da fragmentação iônica, realizado por meio do uso de técnicas modernas de espectrometria de massa por tempo de voo e métodos de coincidência elétron-íon, revela as possíveis rotas de dissociação molecular bem como possibilita a identificação e caracterização dos fragmentos iônicos e radicais gerados no processo dissociativo, além de proporcionar informações importantes sobre a dinâmica e energética de tais processos.

Neste trabalho são apresentados resultados recentes do estudo da excitação eletrônica, fotoionização e dissociação iônica em fase gasosa, para a molécula de 2-Imidazolidinona ( $C_3H_6N_2O$ ).

Para tais estudos, utilizamos a técnica experimental de espectrometria de massas por tempo de voo, no modo de coincidência fotoelétrion-fotoíon (PEPICO) e radiação síncrotron na faixa de energia cobrindo as regiões do ultravioleta de vácuo (VUV) e raios-x moles.

## Resultados e Discussão

A excitação eletrônica e fotodissociação deste composto, a nível de camada de valência interna e externa, foi realizada na linha TGM do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), localizada em Campinas, SP. Radiação síncrotron, foi utilizada para excitar e ionizar as moléculas de 2-Imidazolidinona na faixa de energia de 11,2 – 250 eV.

Empregou-se um espectrômetro de massa por tempo de voo (TOF-MS). Este espectrometro foi construído usando as condições de focalização espacial descritas por Wiley e McLaren [1]. Este utiliza os fotoelétrons gerados no processo de

fotoionização como sinal de inicialização e os íons resultantes como sinal de término para obtenção dos espectros de correlação elétron-íon (espectros de massa).

Foram obtidos tanto espectros de massa convencionais quanto de coincidência elétron-íon-íon (PEPICO e PEPIPICO). Esta última técnica possibilita inclusive a caracterização de fragmentos dupla e triplamente carregados, em geral de natureza instável.

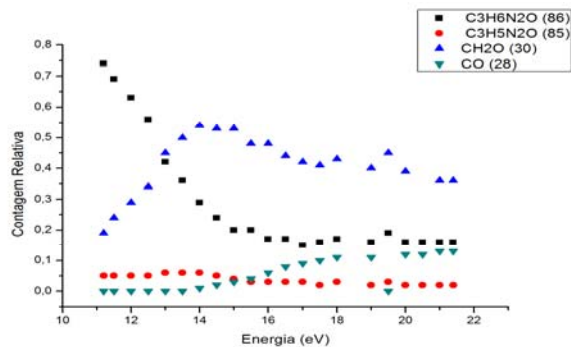


Figura 1. Diagrama de dissociação, e rendimentos iônicos parciais dos fragmentos formados.

## Conclusões

Observa-se que o íon molecular ( $C_3H_6N_2O^+$ ) aparece no espectro com sua intensidade relativa muito alta em baixa energia (aproximadamente 12eV), comparado aos outros fragmentos iônicos, e a medida que a energia dos fótons é aumentada, percebemos um decréscimo em sua intensidade relativa do íon molecular, com um conseqüente aumento relativo das contribuições dos outros fragmentos iônicos.

Quanto maior é a energia incidida, entretanto, observa-se um maior grau de fragmentação, passando o espectro a ser dominado por íons de baixa relação massa/carga. Isto porque a probabilidade de interações entre diferentes orbitais e níveis de energia aumenta significativamente.

Além do íon molecular, o fragmento iônico mais importante em baixa energia é o  $CH_2O$  (formado a partir da quebra sucessiva de ligações de duas

aminas) que foi inversamente proporcional à intensidade do íon molecular,

Os fragmentos iônicos formados e suas abundâncias relativas foram determinadas a partir da análise dos picos nos espectros de coincidência elétron-íon.

O uso da luz síncrotron e o correspondente poder de excitar moléculas tanto em nível de valência quanto de camadas internas abre interessante perspectiva para o estudo da estrutura eletrônica, energética e mecanismos de fragmentação iônica de moléculas.

## Agradecimentos

UFABC, CNPq, FAPESP e LNLS

- 
- 1- Wiley, W. C.; McLaren, I. H.; *Rev. Sci. Instrum.* 1955, 26, 1150.
  - 2- Lago, A.F.; Coutinho, L.H.; Marinho, R.R.T.; Naves de Brito, A.; de Souza, G.G.B., *Chem. Phys.* 2004, 307, 9.
  - 3 - Pilling, S.; Lago, A.F.; Coutinho L. H.; Castilho, R.B.; de Souza, G.G.B.; Naves de Brito, A. *Rapid Comm. Mass Spectr.* 2007, 21, 3646.