III Escola de Verão de Física de Curitiba – PPGF/UFPR

Fotoionização do Benzeno: distribuição angular do fotoelétron

Milton M Fujimoto
Universidade Federal do Paraná, Departamento de Física.

A molécula de benzeno é um sistema interessante por si só porque é um bom modelo para entender mais compostos aromáticos complexos, além de sua importância econômica na industria química como precursor de inúmeros compostos. A fotoionização de moléculas é um fenômeno que gera inúmeros processos físico-químicos, que podem produzir fragmentos menores ou mesmo a formação de moléculas mais complexas. Neste trabalho vamos estudar a fotoionização de moléculas de benzeno em fase gasosa. Estamos interessados na distribuição angular do fotoelétron e na seção de choque (SC) de fotoionização. A metodologia empregada será o método variacional iterativo de Schwinger, com a utilização do pacote computacional ePolyScat-E para a solução das equações das funções do fotoelétron. Serão apresentados os resultados para a SC e para o parâmetro de assimetria dos 8 orbitais moleculares mais externos do benzeno. Os nossos resultados serão comparados com os dados disponíveis na literatura e será apresentada um análise.