

## 4

### Objetivos e Motivações

Esta dissertação teve como objetivo demonstrar a formação das espécies nitreto de fósforo (PN) e sulfeto de nitrogênio (NS) partindo das reações  $\text{PH}_x + \text{NH}_y$ , onde  $[x \text{ e } y] = 0-3$  e  $\text{NH}_x + \text{SH}_y$ , onde  $[x] = 0-3$  e  $[y] = 0-2$ , para o PN e NS, respectivamente. Pouco foi feito sobre essas classes de reações usando cálculos teóricos e métodos experimentais, o que serve de motivação. Em vista da falta de informações e investigações desses sistemas químicos, a proposta desse trabalho também foi apresentar um alto nível teórico de caracterização desses sistemas reacionais. Aqui será fornecida uma melhor descrição desses sistemas importantes, incluindo estados de transição (TS) e intermediários das reações propostas.

Neste estudo são descritos cálculos químicos *ab initio* de alto nível para a otimização de geometrias, cálculo de frequências e energias para as espécies  $\text{PH}_3$ ,  $\text{PH}_2$ ,  $\text{PH}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{NH}_2$ ,  $\text{NH}$ ,  $\text{H}_4\text{NP}$ ,  $\text{H}_3\text{NP}$ ,  $\text{H}_2\text{NP}$ ,  $\text{HNP}$ ,  $\text{NP}$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{SH}$ ,  $\text{H}_3\text{NS}$ ,  $\text{H}_2\text{NS}$ ,  $\text{HNS}$  e  $\text{NS}$ .