

Conclusões

O método CCSD descreveu de forma correta as estruturas propostas, que concordaram satisfatoriamente com os dados da literatura. As energias *single-point*, calculadas com o CCSD(T) também permitiram a construção de diagramas de energia coerentes para os sistemas em estudo.

Para o cálculo do acoplamento spin-órbita, os resultados obtidos pelo MRCI foram diferentes dos obtidos com o CASSCF, e devido ao MRCI ser uma metodologia mais acurada para tratar estados excitados e ao espaço ativo que foi maior do que o utilizado no CASSCF.

De acordo com os diagramas de energia propostos, a molécula ^1PN pode ser formada pelas reações $^3\text{NH} + ^3\text{PH}$ (Figura 5), $^4\text{N} + \text{PH}_3$ (Figuras 6 e 7), $^4\text{N} + ^3\text{PH}$ (Figura 7), $^4\text{P} + ^3\text{NH}$ (Figura 7) e $^4\text{P} + ^2\text{NH}_2$ (Figura 9). A reação $^4\text{N} + \text{PH}_3$ é proibida por spin e a probabilidade dela ocorrer é praticamente zero. Então, a espécie PN existente no meio interestelar e no meio planetário deve ter sua origem a partir de reações que comecem com os reagentes $\text{NH} + \text{PH}$, $\text{NH}_2 + \text{PH}$, $\text{P} + \text{NH}$ e $\text{P} + \text{NH}_2$. Porém, isso também irá depender da abundância destas espécies nesses meios.

Em relação à formação do ^2NS , as reações mais favoráveis de acontecer são: $^1\text{NH} + ^2\text{SH}$ (Figura 20), $^1\text{NH} + ^1\text{H}_2\text{S}$ (Figuras 22 e 23) e $^4\text{N} + ^2\text{SH}$ (Figura 23). A reação $^4\text{N} + ^2\text{SH} \rightarrow ^1\text{NSH}$ é proibida por spin e sua probabilidade de ocorrer é zero. Os outros caminhos propostos: $^4\text{N} + ^1\text{H}_2\text{S}$, $^2\text{NH}_2 + ^2\text{SH}$, $^3\text{S} + ^1\text{NH}_3$ e $^1\text{NH} + ^1\text{H}_2\text{S}$ não são energeticamente favoráveis. Reafirmando, essas reações prováveis também dependerão da abundância das espécies reagentes no meio interestelar, planetário e na atmosfera de cometas.

O mecanismo químico para a formação das espécies ^1PN e ^2NS foi apresentado em detalhes, o que é de grande importância para o entendimento de sua química do meio interestelar e em atmosferas planetárias. De acordo com os resultados encontrados, a formação dessas espécies pode ocorrer via algumas rotas

de reação. Porém esse é somente um estudo da energia desses sistemas, faltando, ainda, complementar esse com a parte cinética dessas reações, para assim, poder ser dito que realmente essas espécies podem ser formadas a partir dos reagentes propostos.