

8

Trabalhos futuros

Para trabalhos futuros pretende-se fazer os cálculos utilizando MRCI para todas as espécies químicas e para estados de transição, pois essa é uma metodologia que descreve bem estados de mais alta energia. Pretende-se também uma melhor descrição dos pontos de cruzamento de energia mínima, usando cálculos que também façam a otimização da estrutura localizada nesse ponto.

Para essa próxima etapa será feito o estudo da cinética química destas reações utilizando teorias cinéticas apropriadas para esse tipo de reação nas condições de pressão e temperatura encontradas em meios interestelares, cometas e atmosferas planetárias. Um estudo cinético é de grande importância para obtermos mais informações a respeito das reações.

Outras espécies também encontradas no meio interestelar, em cometas e em atmosferas planetárias serão estudadas a fim de obter maiores informações a respeito de sua formação. As espécies que podem ser estudadas são CP, CN, CS, CO, NO, PO, SO, SiC, SiN, SiO e SiS.

Outros trabalhos futuros envolvem os cálculos das reações de captura de átomos de hidrogênio das reações $\text{NH}_2 + \text{PH}_2 + \text{NH}_3 + \text{PH}$, $\text{NH} + \text{PH}$, $\text{N} + \text{PH}_3$, $\text{NH}_2 + \text{PH}$, $\text{P} + \text{NH}_3$, $\text{N} + \text{PH}_2$, $\text{P} + \text{NH}_2$, $\text{NH} + \text{SH}$, $\text{S} + \text{NH}_2$, $\text{N} + \text{H}_2\text{S}$, $\text{NH}_2 + \text{SH}$, $\text{S} + \text{NH}_3$, $\text{NH} + \text{H}_2\text{S}$.