INVESTIGAÇÃO DE UMA ROTA DE DESTRUIÇÃO PARA A MOLÉCULA DE MONONITRETO DE FÓSFORO (PN) NO MEIO INTERESTELAR

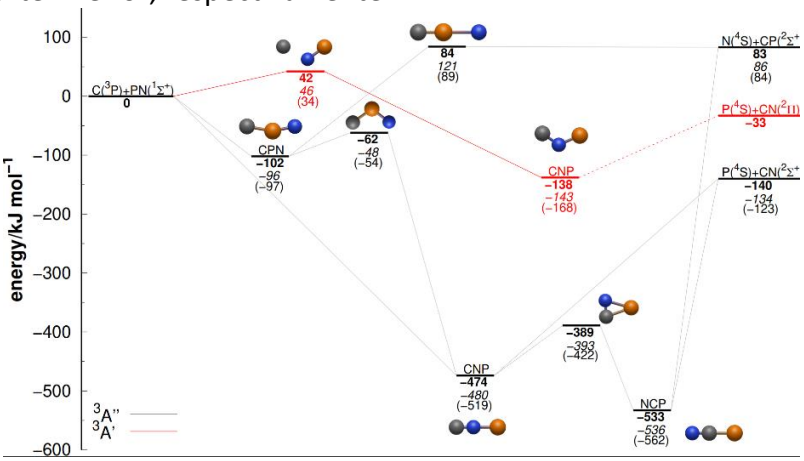
Fábio S. L. Ferreira[1*], Alexandre G. R. Gomes[1], Mateus X. Silva[2], Breno R.L. Galvão[1]

[1] *Departamento de Química, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG, 30.421-169, Belo Horizonte, MG, Brasil*
[2] *Departamento de Física, Universidade Federal do Espírito Santo, UFES, 29.075-910, Vitória, ES, Brasil*

***e-mail:** fabiosilmarovi@hotmail.com

O fósforo (P) é um elemento que desempenha um papel vital para a vida na Terra, estando presente em várias biomoléculas, como DNA, RNA e o ATP.[1] O fósforo também é um importante elemento para a química prebiótica, investigado para compreender como se tornou abundante no planeta Terra.[1,2] Já no meio interestelar (ISM), a abundância do fósforo se dá principalmente nas moléculas de mononitreto de fósforo (PN) e monóxido de fósforo (PO), apresentando uma distribuição quase que semelhante.[1,3,4] O presente trabalho visa a investigação teórica e computacional da destruição da molécula de PN em ambientes interestelares ricos de carbono atômico, explorando o mecanismo da reação $C(^3P) + PN(^1\Sigma^+)$. Para esse propósito, foram empregadas as metodologias DFT (M06-2X/AVTZ+d); CCSD(T)-F12/VTZ-F12 e MRCI-F12+d/CASSCF/AVTZ+d, empregando o software MOLPRO. Tal mecanismo de reação apresentou uma possível rota termodinamicamente favorável para a destruição da molécula de PN, apresentando a existência de três mínimos no diagrama de energía potencial, CNP, CPN e NCP. Também foi possível identificar a presença de estados de transição ao longo do mecanismo da reação, que pode ser conferida na Figura 1. Já a parte cinética, evidencia que a reação pode ocorrer sem a necessidade de temperaturas muito elevadas, visto que não há barreiras para que o choque inicial da molécula de PN com o carbono ocorra.

Figura 1: Diagrama de Energia Potencial da reação $C(^3P) + PN(^1\Sigma^+)$ com as energias MRCI-F12 representadas na parte superior, enquanto as energias CCSD(T) e M06-2X ao meio em itálico e entre parênteses e na parte inferior, respectivamente.



Agradecimentos: CNPq (projeto 405524-2021-8), FAPEMIG e CEFET-MG

[1] RIVILLA, V. M.; et.al.. The First Detections of the Ket Prebiotic Molecule PO in Star-Forming Regions. v. 826. 2016. p. 161.
[2] YAMAMOTO, S. Introduction to Astochemistry: Chemical Evolution from Interstellar Clouds and Planet Formation. Springer Japan. 2017. Japan.
[3] CONCEPCUÓN, G.; et.al.. Formation of Phosphorus Monoxide (PO) in the Interstellar Medium: Insights from Quantum-Chemical and Kinetic Calculations. v. 922. 2021. p. 169.
[4] FONTANI, F.; et.al.. Origin of the PN Molecule in Star-Forming Regions: the enlarged sample. V. 489. 2019. p. 4530