

Estudo de Caminhos Reacionais para a Formação de Glicina e sua Viabilidade em Meio Interestelar.

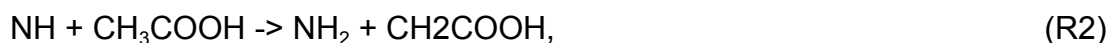
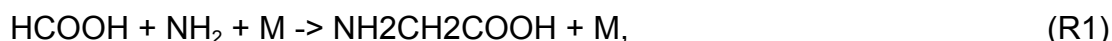
C. H. Pinto, Rene F. K. SPada*

Departamento de Física, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, 12228-900, SP, Brazil.

*email: rfkspada@ita.br

Neste trabalho será apresentado um estudo preliminar da formação de Glicina ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$). Nosso interesse nessa molécula se deve à sua relevância no mecanismo de formação de moléculas orgânicas complexas que deram origem à vida. Já foi proposto na literatura a produção dessa molécula em meio interestelar por reações ocorrendo em fase gasosa.^{1,2}

Para esse estudo, foram investigados em detalhes dois possíveis caminhos reacionais, o primeiro (R1) ocorrendo em apenas uma etapa elementar e o segundo ocorrendo em duas etapas elementares (R2 e R3),



Em R1 e R3, M representa um corpo inerte para termalizar o produto.

Os pontos estacionários (reagentes, produtos e pontos de sela) foram identificados com três aproximações (funcionais) para a teoria do funcional de densidade (DFT) (M06-2X, wb97X e wb97X-D3), e as propriedades termoquímicas também foram obtidas com a metodologia coupled cluster considerando excitações simples, duplas e triplas conectadas (CCSD(T)). Os coeficientes de velocidade foram calculados pela teoria variacional do estado de transição (CVT) com correções para efeitos não clássicos pela abordagem de tunelamento de pequena curvatura (SCT).

Dos resultados preliminares foi observado que as etapas R1 e R2 apresentam barreiras eletrônicas iguais a 17,9 e 18,4 kcal/mol, respectivamente, enquanto R3 não apresenta barreiras. Os coeficientes de velocidade a 200 K são iguais a $3,64 \times 10^{-31} \text{ cm}^3 \text{ molecular}^{-1} \text{ s}^{-1}$ para R1 e $1,6 \times 10^{-21} \text{ cm}^3 \text{ molécula}^{-1} \text{ s}^{-1}$ para R2. Esses resultados indicam que esses caminhos reacionais são viáveis para a formação de glicina em meio interestelar por reações ocorrendo em fase gasosa, sendo que o caminho composto pelas etapas R2 e R3 apresenta as menores barreiras energéticas.

Referências

1. V. Blagojevic, S. Petrie and D. K. Bohme, *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 339, L7–L11 (2003).
2. J. L. Snow, G. Orlova, V. Blagojevic, and D. K. Bohme, *J. Am. Chem. Soc.*, 129, 9910-9917 (2007).