

## Propriedades eletrônicas e vibracionais do cristal anidro de L-ácido aspártico

Agmael M. Silva<sup>1</sup> (PG), Stefane N. Costa<sup>1\*</sup> (IC), Francisco A. M. Sales<sup>1</sup> (PQ), Valder N. Freire<sup>1</sup> (PQ), Bruno P. Silva<sup>1</sup> (PG), Umberto L. Fulco<sup>2</sup> (PQ), Eudenilson L. Albuquerque<sup>2</sup> (PQ), Everton W. S. Caetano<sup>3</sup> (PQ), F. F. Maia Jr.<sup>4</sup> (PQ)  
\*stefanenunescosta@gmail.com

<sup>1</sup> Departamento de Física, UFC, Campus do Pici, 60455-960 Fortaleza, CE

<sup>2</sup> Departamento de Biofísica e Farmacologia, UFRN, 59072-970 Natal, RN

<sup>3</sup> Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará, 60040-531 Fortaleza, CE

<sup>4</sup> Universidade Federal Rural do Semi-Árido, Campus Angicos, 59515-000 Angicos, RN

Palavras Chave: Ácido aspártico, DFT e infravermelho.

### Introdução

O ácido aspártico (Asp, D, e fórmula química  $C_4H_7NO_4$ ) é um dos 20 aminoácidos cuja polimerização dá origem as proteínas. Cálculos *ab initio* em fase gasosa do ácido aspártico revelaram um total de 139 confôrmeros, sendo não estáveis a sua estrutura zwitteriônica<sup>1</sup>.

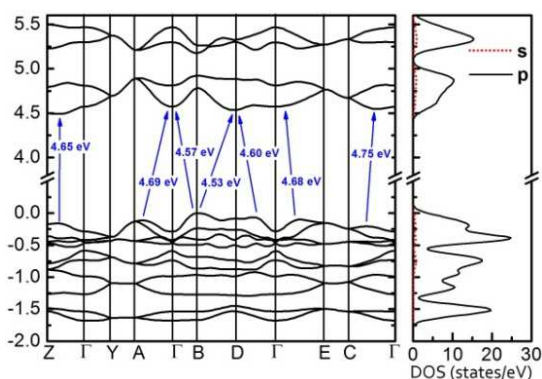
Recentemente, demonstrou-se que cristais anidros de bases do DNA são semicondutores de gap largo<sup>4</sup>. No caso de cristais de aminoácidos, estudos sugerem que a alanina, leucina e glicina<sup>2,3</sup> são semicondutores de gap largo, enquanto valina e cisteína possuem energia de gap estreito<sup>5</sup>.

Neste trabalho, foi realizado um estudo computacional e experimental das propriedades eletrônicas e vibracionais do cristal anidro de L-ácido aspártico.

### Resultados e Discussão

Foi utilizada a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) com aproximação da densidade local (LDA) e do gradiente generalizado com correção de dispersão (GGA+TS) para cálculos computacionais de otimização, propriedades eletrônicas (estrutura de bandas e densidade de estados), ópticas e vibracionais do cristal anidro de L-ácido aspártico. Foram realizadas medidas de espectroscopia no UV/VIS, IR e Raman para comparação com os cálculos DFT.

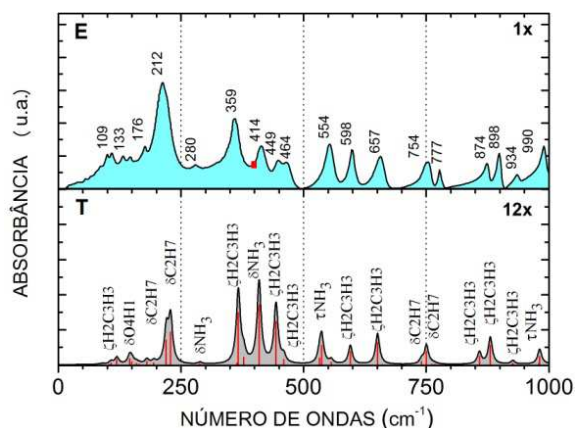
Observa-se grande concordância entre os parâmetros de rede calculados com o funcional GGA+TS para a estrutura cristalina otimizada e os parâmetros experimentais, com desvios ( $\Delta a$ ,  $\Delta b$ ,  $\Delta c$ ) de (0,029Å, -0,023Å, -0,024Å).



**Figure 1.** Estrutura de bandas e DOS na região do gap do cristal anidro de L-ácido aspártico.

Os picos de absorção óptica (que estão relacionados com energia mínima necessária para transição entre a banda de valência e a banda de condução), envolveram o estado de valência  $O2p$  e os de condução  $C1p$  e  $O2p$ . Entre as bandas calculadas, o menor valor da energia de transição usando o funcional GGA+TS foi 4,49 eV ( $S \rightarrow \Gamma$ ). Esta energia é menor do que o valor experimental estimado de 5,02 eV, obtido por absorção óptica (Fig. 1). A comparação das massas efetivas dos portadores nas direções paralelas e perpendiculares revelou que o transporte de carga deve ser favorecido na direção paralela.

Os espectros teóricos (GGA+TS) no IR e RAMAN apresentaram uma boa concordância com os experimentais (Figura 2).



**Figura 2.** Espectros IR experimental (E) e teórico (T) na região de 0 à  $1000\text{ cm}^{-1}$ .

### Conclusões

A energia de bandas de gap largo e os valores das massas efetivas permitem sugerir que o cristal anidro de L-ácido aspártico pode comportar-se como um semicondutor. Os cálculos DFT descreveram satisfatoriamente os espectros experimentais.

### Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq e FUNCAP os financiamentos.

<sup>1</sup> M. C. Chen and Z. Lin, J. Chem. Phys. 127, 154314(2007).

<sup>2</sup> P. R. Tulip and S. J. Clark, Phys. Rev. B **71**, 195117 (2005).

<sup>3</sup> M. Z. S. Flores, et. al, Phys. Rev. B **77**, 115104 (2008).

<sup>4</sup> F. F. Maia Jr., et. al, J. Chem. Phys. **134**, 175101(2011).

<sup>5</sup> J. R. Cândido Jr., et. al, Chem. Phys. Lett. **512**, 208(2011).