

Cisteína Monoclínica: propriedades estruturais, eletrônicas e óptica

José R. Cândido Júnior (PG)^{1*}, Glaydson L. F. Mendonça (PG)¹, Pedro de Lima Neto (PQ)¹, Adriana N. Correia (PQ)¹, Valder N. Freire (PQ)² e David L. Azevedo (PQ)³. Email: jjunior84@yahoo.com.br

¹ Departamento de Química Analítica e Físico-Química – Campus do Pici, Bloco 940 CEP 60455-960 Fortaleza – CE.

² Departamento de Física – UFC – Campus do Pici, Bloco 922 CEP 60455-960 Fortaleza – CE.

³ Departamento de Física - UFMA - Campus do Bacanga, 65080-040 São Luis - MA.

Palavras Chave: Cisteína, Cristal, Aminoácido, DFT.

Introdução

A cisteína é um aminoácido polar portador de grupo tiol que apresenta duas estruturas cristalinas principais: ortorrômbica e monoclínica. Neste trabalho estudamos a forma monoclínica utilizando a Teoria do Funcional Densidade (DFT). A célula unitária foi construída a partir de dados de Raios-X¹ e otimizada pelo programa DMOL³ utilizando cinco funcionais diferentes: dois que empregam a Aproximação da Densidade Local (LDA) – VWN e PWC; dois que empregam a Aproximação do Gradiente Generalizado (GGA) – BLYP e PBE; e o funcional híbrido – HCTH.

Resultados e Discussão

O funcional GGA-PBE foi o que apresentou menores desvios dos comprimentos de ligação, ângulos e torsões em relação aos dados experimentais¹. A partir dos parâmetros da célula otimizada, variou-se uma das dimensões em 5%, mantendo as outras constantes, confirmando a estrutura como a de menor energia.

Tabela 1. Parâmetros de rede obtidos para o cristal monoclínico da cisteína.

	EXP. ⁽¹⁾	PBE	BLYP	HCTH
a (Å)	9,441	9,5703	9,6893	9,7213
b (Å)	5,222	5,2993	5,3960	5,5111
c (Å)	11,337	11,8256	12,2173	12,4563
β	109,00	107,375	105,578	105,556
V (Å ³)	528,5	572,379	615,299	642,901

A estrutura de bandas eletrônicas calculada do cristal (Figura 1) utilizando pseudopotenciais *ultramacios* e energia de corte ultrafina através do programa CASTEP mostra o valor de 4,231 eV para o mínimo da banda de condução. Foram encontrados 4 valores de máximo para a banda de valência. Os valores de gap indireto correspondem à: 4,245 eV ([Γ ,Y] \rightarrow min), 4,241 eV ([A,B] \rightarrow min), 4,231 eV ([D,E] \rightarrow min) e 4,233 eV ([C,Z] \rightarrow min). Através do cálculo da densidade de estados eletrônicos, observou-se que o mínimo da banda de condução é composto principalmente de orbitais 2p do C do grupo carboxilato e o máximo da banda de valência é de orbitais 3p do enxofre do grupo tiol e, principalmente de orbitais 2p do oxigênio do grupo carboxilato.

33^ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

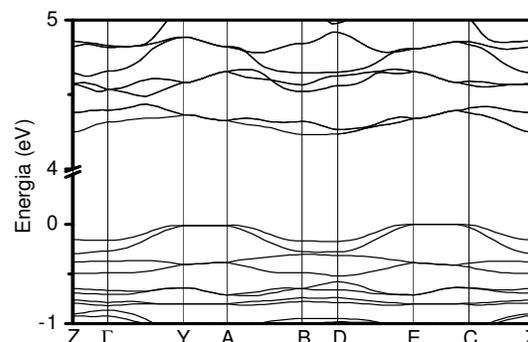


Figura 1. Estrutura de Bandas do Cristal Monoclínico da Cisteína de -1 a 6 eV.

Na absorção óptica, observa-se absorção intensa em 6,20 eV, onde há predominância da luz plano polarizada na direção [010] e em 8,67 eV, onde a maior absorção situa-se na região [100] (Figura 2).

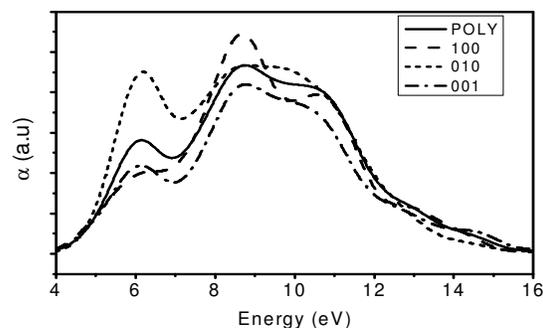


Figura 2. Absorção Óptica do Cristal calculada para os diferentes planos de polarização

Conclusões

O Funcional GGA-PBE mostrou ser o mais eficiente para a otimização da estrutura cristalográfica do cristal de cisteína. O gap indireto calculado é de $4,238 \pm 0,007$ eV, tendo como maiores contribuintes os orbitais 2p e S 3p para o máximo da banda de valência, e 2p do carbono para a banda de condução.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FUNCAP, FINEP.

¹ Görbitz, C. H., Dalhus, B. *Acta Cryst. Sec.C.* **1996**, C52, p.1756-1759.