

MceMef26-001

Nova rota de síntese, estudo teórico e experimental das propriedades vibracionais do cristal de L-triptofano com ácido fumárico

Ribeiro, F.D.C.(1); Rodrigues, F.W.S.(1); Carvalho, J.O.(2); Façanha Filho, P.F.(1);
(1) UFMA; (2) IFMA;

A cristalografia e a ciência de materiais encontram-se firmemente interligadas enquanto agentes de pesquisa científica, uma vez que se dedicam ao estudo e ao desenvolvimento de materiais orgânicos como biomoléculas, no caso, aminoácidos, os quais podem apresentar diferentes formas de aplicação, conforme a técnica utilizada. Neste sentido, a pesquisa experimental de novas fontes de materiais específicos com foco em um determinado conjunto de finalidades tem sido uma consequência direta de estudos vinculados à síntese de agrupamentos moleculares com arranjos estruturais únicos e propriedades físico-químicas que lhes possam atribuir a possibilidade de aplicação em óptica não linear (nonlinear optical properties – NLO). Assim, este trabalho objetiva mostrar uma nova rota de síntese para o composto de L-triptofano-ácido fumárico-água (TAF), comparando-a com a técnica de evaporação lenta do solvente, bem como trazer um estudo teórico e experimental de suas propriedades vibracionais. A síntese dos cristais se deu por meio de evaporação lenta do solvente e através do processo de mecanossíntese, utilizando uma mistura equimolar de L-triptofano, ácido fumárico e água deionizada, sob moagem de alta energia. Medidas de DRX foram propostas nos materiais obtidos nas duas rotas de síntese. As medidas de FTIR e Raman experimentais foram comparadas às teóricas, as quais foram realizadas utilizando o arquivo de informações cristalográficas (CIF) do material por meio do Estudo do Funcional de Densidade (DFT), através do software Gaussian® 16, aplicando o funcional híbrido B3LYP com funções de polarização def2-TZVP, simulando condições de vácuo e solvatação contínua no material em água por meio do modelo IEFPCM. Os refinamentos de Rietveld propostos foram bem sucedidos, revelando a compatibilidade estrutural dos materiais sintetizados em cada uma das rotas propostas. O grau de rendimento obtido no processo de mecanossíntese foi de 94% (tendo como base a massa dos reagentes utilizados para a realização da síntese), bem superior à rota de síntese convencional por evaporação lenta do solvente, que apresenta em média 52% de rendimento depois de aproximadamente 6 dias de descanso da solução para o surgimento dos cristais. Os espectros FTIR e Raman teóricos e experimentais do material foram observados, sendo que os respectivos espectros comparativos demonstraram uma boa compatibilidade de bandas, cujas atribuições estão em concordância com os desvios das bandas teóricas, relacionando os mesmos grupos funcionais presentes no material e indicados nas medidas experimentais. Seguindo uma perspectiva futura, serão propostas novas análises relacionadas às propriedades dos cristais de TAF, objetivando a melhor compreensão da natureza óptica do composto.