

ABORDAGENS DFT PARA ESPECTROS DE ABSORÇÃO UV-VIS: EXPLORANDO SEMELHANÇAS E DIFERENÇAS EM COMPOSTOS ORGÂNICO E DE COORDENAÇÃO



Vania Martins
Ramos



Bruno Campana
Severino



Ana Paula de
Lima Batista

O artigo selecionado para capa nesta edição é do grupo da Profa. Ana Paula de Lima Batista da Universidade Federal de São Carlos - UFSCar, Campus de São Carlos. A arte da capa ilustra o contraste entre compostos orgânicos e complexos metálicos na investigação teórica de propriedades eletrônicas e espectroscópicas por meio da Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Os elementos que compõem a imagem são visualizados em uma tela de computador, o principal instrumento de pesquisa dos teóricos. À esquerda, o *trans*-azobenzeno é o composto orgânico tratado, enquanto à direita, temos o 3-ferrocenil-*trans*-azobenzeno, o sistema de coordenação. As lupas destacam as geometrias otimizadas sob a ótica da DFT; o gráfico central faz referência ao equilíbrio entre custo computacional e acurácia, o chamado “ponto de Pauling”; e, na parte inferior da tela, os espectros UV-Vis de cada um desses sistemas são representados. Veja o artigo na íntegra em (<http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20250179>).

Qual é a principal contribuição deste artigo?

Fornecer um guia prático que contrasta a escolha de metodologias DFT/TD-DFT eficientes e confiáveis na descrição de propriedades espectroscópicas de compostos orgânicos e de coordenação. O trabalho

destaca que a seleção adequada das metodologias depende tanto do sistema em estudo quanto das propriedades de interesse. Assim, reforça-se a importância de testar e validar as abordagens teóricas para cada caso específico.

Como foi idealizada a arte da capa?

A concepção da arte partiu da ideia de traduzir visualmente a comparação entre dois mundos: o orgânico e o de coordenação, sob a lente da DFT. As duas lupas representam a investigação detalhada das propriedades moleculares via DFT, simbolizada pelos funcionais gravados em suas bordas, enquanto o fundo dividido em tons de azul e laranja expressa as diferenças eletrônicas e espectroscópicas entre os sistemas. A fusão dessas cores ao centro representa o encontro entre esses mundos, evidenciando as semelhanças que também os aproximam. O gráfico central sintetiza o equilíbrio entre acurácia e custo computacional, refletindo a busca por metodologias que conciliem desempenho e confiabilidade nos estudos teóricos.

Como a ideia desta revisão surgiu?

O Grupo de Catálise Computacional e Espectroscopia (GCCE, <https://www.gcce.ufscar.br>) ainda está em seu estágio inicial. Este artigo surgiu como um material de apoio para auxiliar novos integrantes do grupo a se familiarizarem com as linhas de pesquisa atuais. No decorrer da elaboração, percebemos que o conteúdo também poderia servir como um guia acessível a um público mais amplo de interessados em DFT.

Quais são as perspectivas futuras para a linha de pesquisa?

Empregar diferentes abordagens da química quântica computacional para investigar processos e sistemas relacionados à conversão de energia, ampliando a compreensão de suas propriedades fotofísicas e reativas.