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

Vania Martins Ramos^a, Bruno Campana Severino^a e Ana Paula de Lima Batista^{a,*} 

^aGrupo Computacional de Catálise e Espectroscopia, Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, 13565-905 São Carlos – SP, Brasil

Recebido: 02/04/2025; aceito: 16/06/2025; publicado online: 18/07/2025

*e-mail: aplbatista@ufscar.br

Detalhes dos cálculos

Os cálculos foram realizados em *workstations* pertencentes ao grupo de pesquisa, cada uma equipada com 20 processadores e 128 GB de memória RAM (memória de acesso aleatório). Os cálculos foram executados utilizando 8 processadores em paralelo, alocando-se 5 GB de memória por processador para as etapas de otimização de geometria e cálculo de frequências vibracionais, e 6 GB de memória por processador para os cálculos de espectros eletrônicos via TD-DFT. O tempo médio de processamento, considerando todos os funcionais, bases e meios testados, foi de 1 h 20 min para as otimizações de geometria e cálculos de frequência do *trans*-AB, e de 15 h 53 min para o 3-FCAB. Para os cálculos TD-DFT, o tempo médio foi de 8 min para o *trans*-AB e de 1 h 3 min para o 3-FCAB.

```
! M06L def2-TZVP def2/J slowconv verytightscf verytightopt freq
! defgrid3
! CPCM(HEXENE) #Para realizar o cálculo em solvente

%scf
MaxIter 1500
end

%maxcore 5000

%pal
nprocs 8
end

*xyz 0 1 #carga e multiplicidade da molécula
#Coordenadas da geometria inicial
*
```

Figura 1S. Exemplo de input usado para obtenção das geometrias otimizadas. Nesse exemplo, com a incorporação implícita do solvente, no caso de cálculo na ausência de solvente, basta remover a terceira linha

```

! 03LYP Keepdens slowconv def2-tzvp def2/J defgrid3 TightSCF RIJCOSX

%tddft
nroots 30 #números de EE que serão obtidos
maxdim 5
DoNTO true #Para pedir os NTOs
NTOTresh 1e-4
end

%pal
nprocs 8
end

%maxcore 6000

%scf
maxiter 800
print[p_mos] 1
end

* xyz 0 1
#Coordenadas da geometria obtida pela otimização do EF
*

```

Figura 2S. Exemplo de input usado para a realização dos cálculos TD-DFT com o cálculo dos NTOs

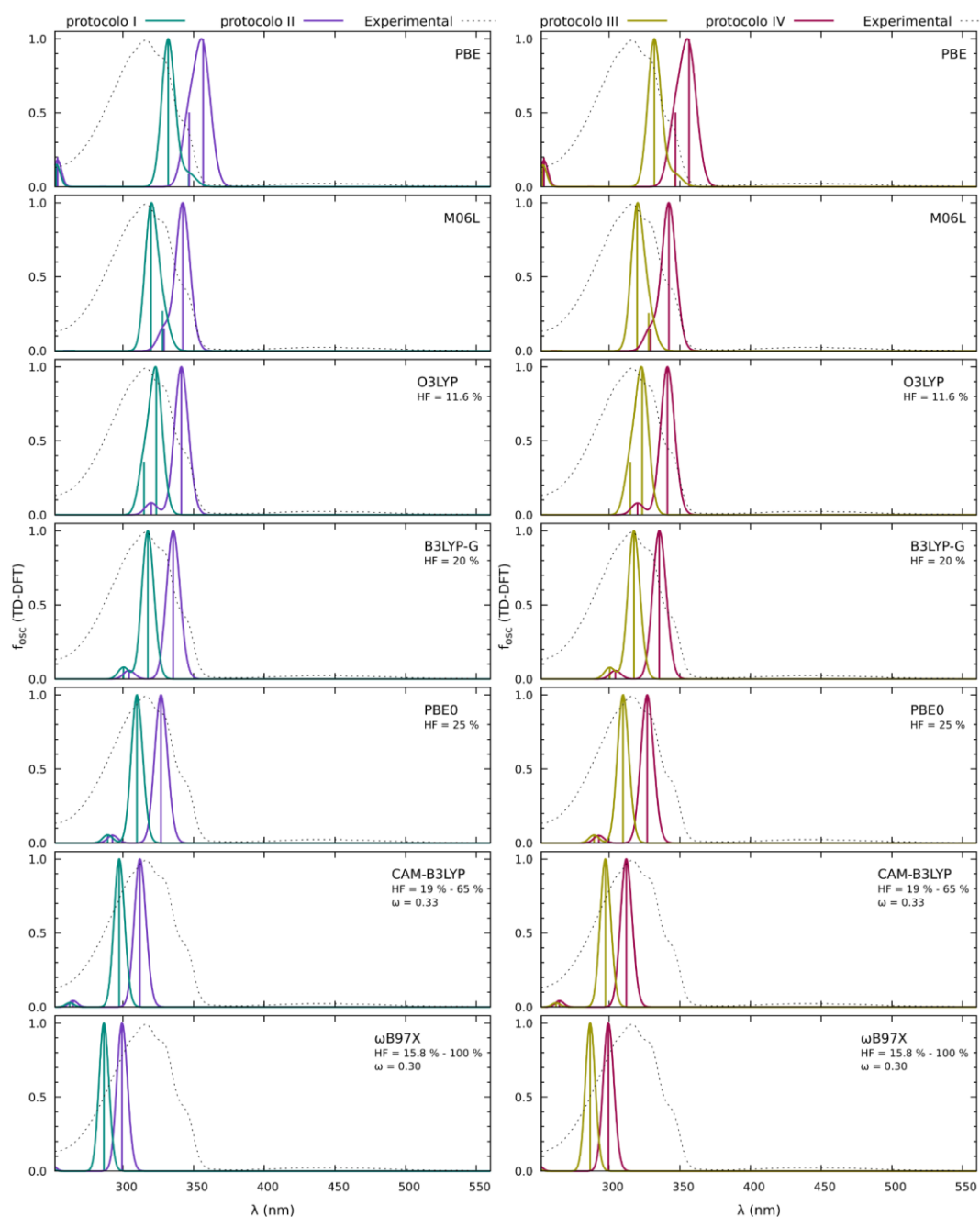


Figura 3S. Espectros de absorção UV-Vis calculados para o *trans*-AB utilizando os protocolos I (azul turquesa), II (roxo), III (amarelo) e IV (vermelho) com a base def2-TZVP e os funcionais descritos. A curva pontilhada representa o espectro experimental. Para os funcionais híbridos, as porcentagens de troca de Hartree-Fock (HF) estão indicadas. No caso dos funcionais híbridos de longo alcance, o primeiro valor corresponde à fração de troca exata em curto alcance, enquanto o segundo valor representa a fração de troca exata em longo alcance. O parâmetro de separação de longo alcance (ω) também está identificado para esses funcionais

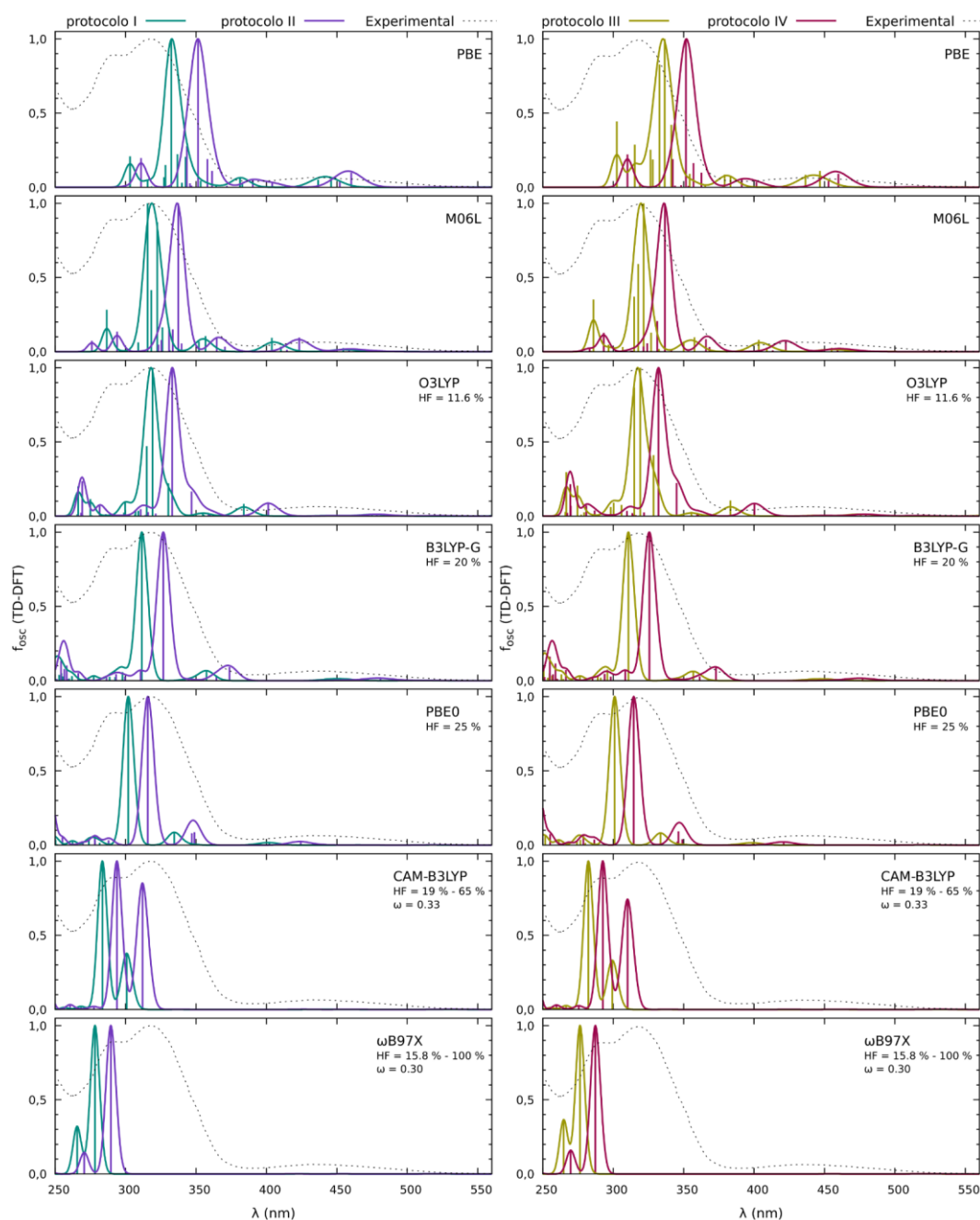


Figura 4S. Espectros de absorção UV-Vis calculados para o 3-FCAB utilizando os protocolos I (azul turquesa), II (roxo), III (amarelo) e IV (vermelho) com a base def2-TZVP e os funcionais descritos. A curva pontilhada representa o espectro experimental. Para os funcionais híbridos, as porcentagens de troca de Hartree-Fock (HF) estão indicadas. No caso dos funcionais híbridos de longo alcance, o primeiro valor corresponde à fração de troca exata em curto alcance, enquanto o segundo valor representa a fração de troca exata em longo alcance. O parâmetro de separação de longo alcance (ω) também está identificado para esses funcionais