

A absorção de luz visível por pigmentos fotossintéticos é o primeiro passo essencial para a fotossíntese, que é um dos mais importantes mecanismos da natureza. Por essa razão existe um extraordinário interesse na compreensão do seu espectro e estudos experimentais demonstram que os tratamentos teóricos são capazes de uma descrição qualitativa razoável, mas relativamente pobres quantitativamente. Isso decorre, em grande parte, devido à inexistência de estudos teóricos com inclusão dos efeitos do meio. Nesse colóquio chamaremos a atenção para a contribuição explícita do meio e consideraremos como exemplo de trabalho o espectro de absorção da clorofila-c2 em metanol. Através de simulações computacionais híbridas (tratamento estatístico clássico combinado com mecânica quântica) analisaremos a coordenação do Mg, a importância das ligações de hidrogênio, as limitações do modelo de orbitais de Gouterman e daremos também atenção à existência e localização de estados escuros que, possivelmente são importantes em mecanismos de transferência e dissipação de energia.

(Lembramos a todos que, devido às obras no Auditório do DF, as palestras iniciais deste semestre serão realizadas no auditório do Departamento de Química Fundamental )