

Análisis de átomos cuánticos interactuantes en distintos estados electrónicos.

Tomás Rocha Rinza

3 de marzo de 2021

Las propiedades moleculares pueden cambiar drásticamente en estados excitados con respecto al estado fundamental. Por otro lado, el uso de técnicas basadas en la examinación de distintos campos escalares derivados de la función de onda, presenta una alternativa a los análisis basados en orbitales. Dentro de estas herramientas se encuentra la división de la energía electrónica de átomos cuánticos interactuantes (IQA, por sus siglas en inglés). En este trabajo se propone el uso del método de ecuación de movimiento de cúmulos acoplados (EOM-CCSD, por sus iniciales en inglés) para la partición de la energía de excitación mediante el enfoque de IQA. El análisis IQA/EOM-CCSD permite establecer cuales son los átomos y los enlaces químicos mayormente afectados como consecuencia de una excitación electrónica. Como ejemplo representativo, consideramos la aplicación de este método al dímero de agua con la intención de entender las bases del solvatocromismo debido al enlace de hidrógeno.



- A. Fernández Alarcón *et al.* “Partition of electronic excitation energies: the IQA/EOM-CCSD method”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 13428 (2019).
- A. Fernández Alarcón *et al.* “Photochemistry in real space: batho- and hypsochromism in the water dimer”, *Chem. Eur. J.* **26**, 17035 (2020).