



Prueba de métodos teóricos en parámetros moleculares inerciales de estados electrónicos excitados respecto a base de datos experimental conformada por 15 moléculas orgánicas.

América Torres-Boy^{1, a}, Leonardo Álvarez-Valtierra¹, Tomás Santillán²

¹División de Ciencias e Ingenierías, Universidad de Guanajuato; Lomas del Bosque No. 103; Col. Lomas del Campestre; C.P. 37150; León, Gto. México

²Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas; Calzada Solidaridad, Hidráulica, 98068 Zacatecas, Zac. México

^ae-mail: torresba2014@licifug.ugto.mx

Los cálculos Ab Initio son ampliamente utilizados como un recurso teórico para optimizar las geometrías de distintas moléculas. Es bien conocido cuáles son los métodos más certeros al momento de realizar dichos cálculos para el estado basal, ya que los resultados que éstos revelan suelen estar menos alejados de los parámetros inerciales reales (experimentales); sin embargo, cuando se trata de estados electrónicos excitados aún es difícil saber qué método teórico es más eficaz.

En el presente estudio se realizaron cálculos Ab Initio utilizando diferentes métodos y bases numéricas para calcular parámetros inerciales de estados electrónicos excitados en quince distintas moléculas orgánicas. Estos resultados fueron comparados con los parámetros experimentales reportados en previas investigaciones (1,2,3). Se efectuó un análisis estadístico para conocer qué tipo de método y qué base numérica coincide mejor con los parámetros reportados en la literatura. Se tomaron en cuenta factores como la geometría, distribución de carga y número de confórmeros relativamente estables para ser estudiados experimentalmente, así como los detalles de la metodología teórica involucrada. Con esto se pretende tener una base de datos que sirva de referencia para elegir el método más certero para realizar este tipo de cálculos. Se discutirán los resultados obtenidos y se definirá qué metodología es más adecuada para obtener parámetros inerciales de estados electrónicos excitados, de acuerdo a las características del sistema molecular a estudiar.

(1) Gmerek F.; Stuhl B; Álvarez-Valtierra L; Pratt D.W.; Schmitt M. *J. Chem. Phys.* **2016**, 144, 084304 (and references therein)

(2) Yi JT; Alvarez-Valtierra L; Pratt DW. *J Chem Phys.* **2006**; 124(24), 244302. (and references therein)

(3) Miller DM, Young JW, Morgan PJ, Pratt DW. *J Chem Phys.* **2010**; 133(12), 124312 (and references therein)