



Comportamiento sistemático de funcionales de la densidad en la predicción del espectro electrónico del pigmento Ru535 utilizando TDDFT

Paulino Zerón¹, Javier Carmona Espíndola², Martha M. Flores Leonar¹, José Luis Gázquez Mateos², Carlos Amador Bedolla¹, Ignacio González², Víctor Manuel Ugalde Saldívar¹

¹Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Av. Universidad 3000, Ciudad Universitaria, Coyoacán 04510, Ciudad de México, México.

²Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, Iztapalapa 09340, Ciudad de México, México
e-mail: gmozn@gmail.com

El estudio predictivo del espectro electrónico es de gran utilidad para conocer la capacidad de los compuestos para absorber luz, así mismo el espectro es útil para la caracterización espectroscópica de especies en disolución. En las celdas solares, las características mencionadas del pigmento se asocian con la eficiencia del sistema¹. El presente trabajo tiene como objetivo realizar un estudio comparativo entre diferentes funcionales utilizando la teoría del funcional dependiente del tiempo (TDDFT), para obtener el espectro electrónico de absorción del pigmento Ru535 en acetonitrilo. Como resultado del estudio con 10 funcionales —pertenecientes a tres escalones de Jacob—, se lograron asignar transiciones electrónicas entre diferentes orbitales a 4 máximos de absorción que presenta el compuesto en el espectro experimental². Los funcionales utilizados para describir los primeros máximos de absorción ("d-d" y "metal-ligante") del complejo presentan la siguiente tendencia: la energía de las transiciones aumenta cuando se cambia de funcionales semilocales a híbridos globales y a híbridos locales.

Los espectros electrónicos obtenidos a partir de los funcionales híbridos globales son muy semejantes al experimental. En particular, PBE0 es el funcional más adecuado para estimar la energía asociada ya que difiere 4 y 38 nm en los dos primeros máximos de absorción, respectivamente. Por lo que se sugiere su uso para sistemas con rutenio en estado de oxidación (II).

(1) Du, W.; Li, H.-B.; Gu, D.-M.; Wu, Y.; Sun, G.-Y.; Geng, Y.; Su, Z.-M. *RSC Advances* **2015**, *5*, 100169.

(2) Monat, J. E.; Rodriguez, J. H.; McCusker, J. K. *The Journal of Physical Chemistry A* **2002**, *106*, 7399.