



Predicción de energías de excitación vertical mediante TD-DFT usando potenciales centrados en el átomo

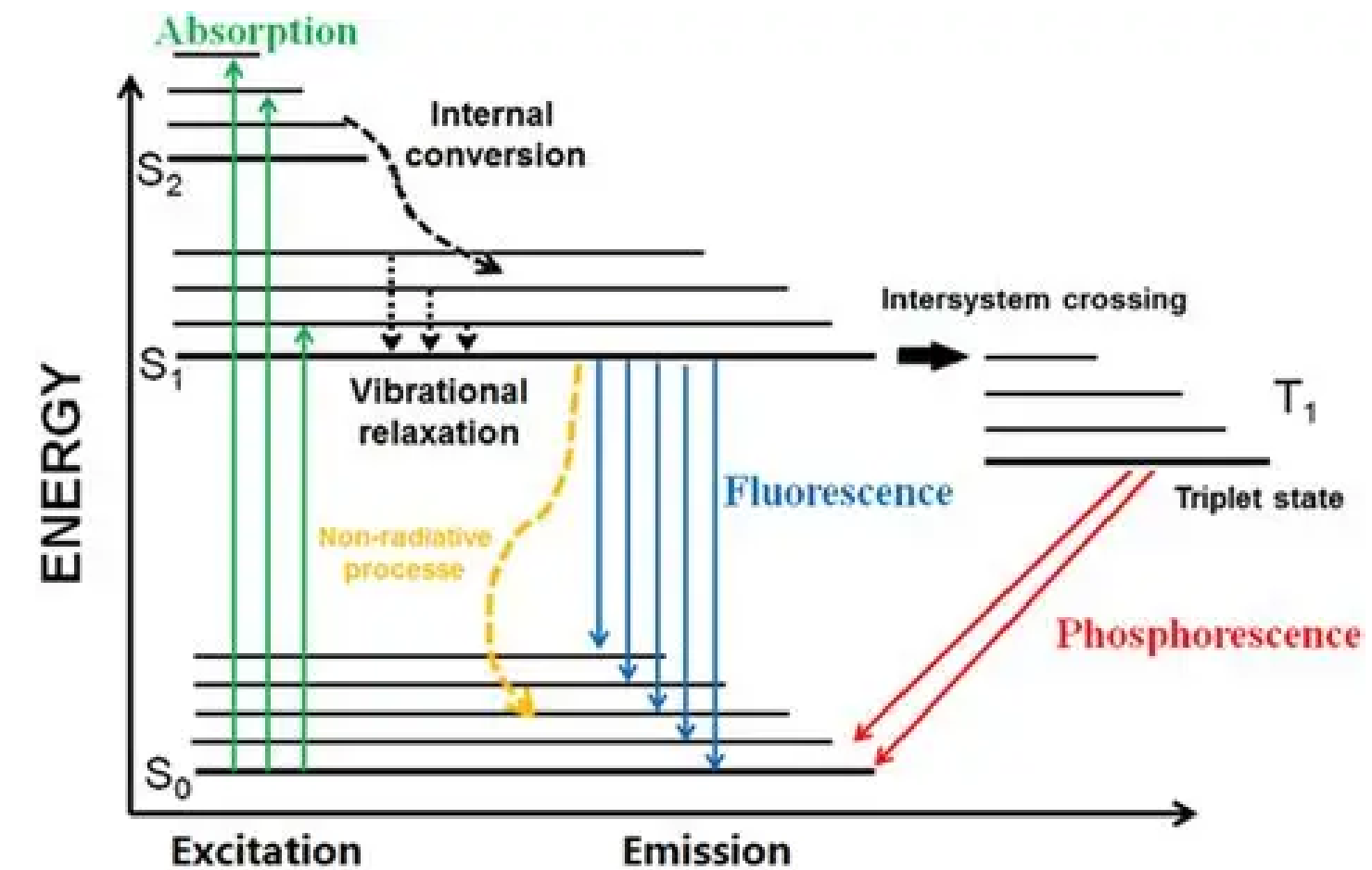
Yanira Suárez González

Escuela Altas Presiones Mieres 2026

El reto de la TDDFT

Cálculo de excitaciones singlete-singlete como primera aproximación de los espectros UV-Vis y propiedades optoelectrónicas moleculares.

Metodología	Ventajas	Limitaciones
Funcionales híbridos y GGA	Bajo coste computacional	Errores en transferencia de carga, subestimación de energía y estados "fantasma".
Funcionales doble híbridos	Precisión más alta	Alto coste computacional. No permite la relajación de la geometría en el estado excitado.
Propuesta: Funcionales híbridos + ACP	Alta precisión en excitaciones verticales sin aumentar el coste.	Fase de desarrollo/Validación



ACP

Potencial de un solo electrón que se incluye para mitigar errores en los cálculos de química cuántica

$$H_{operador} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Operador asociado con la energía cinética Energía potencial

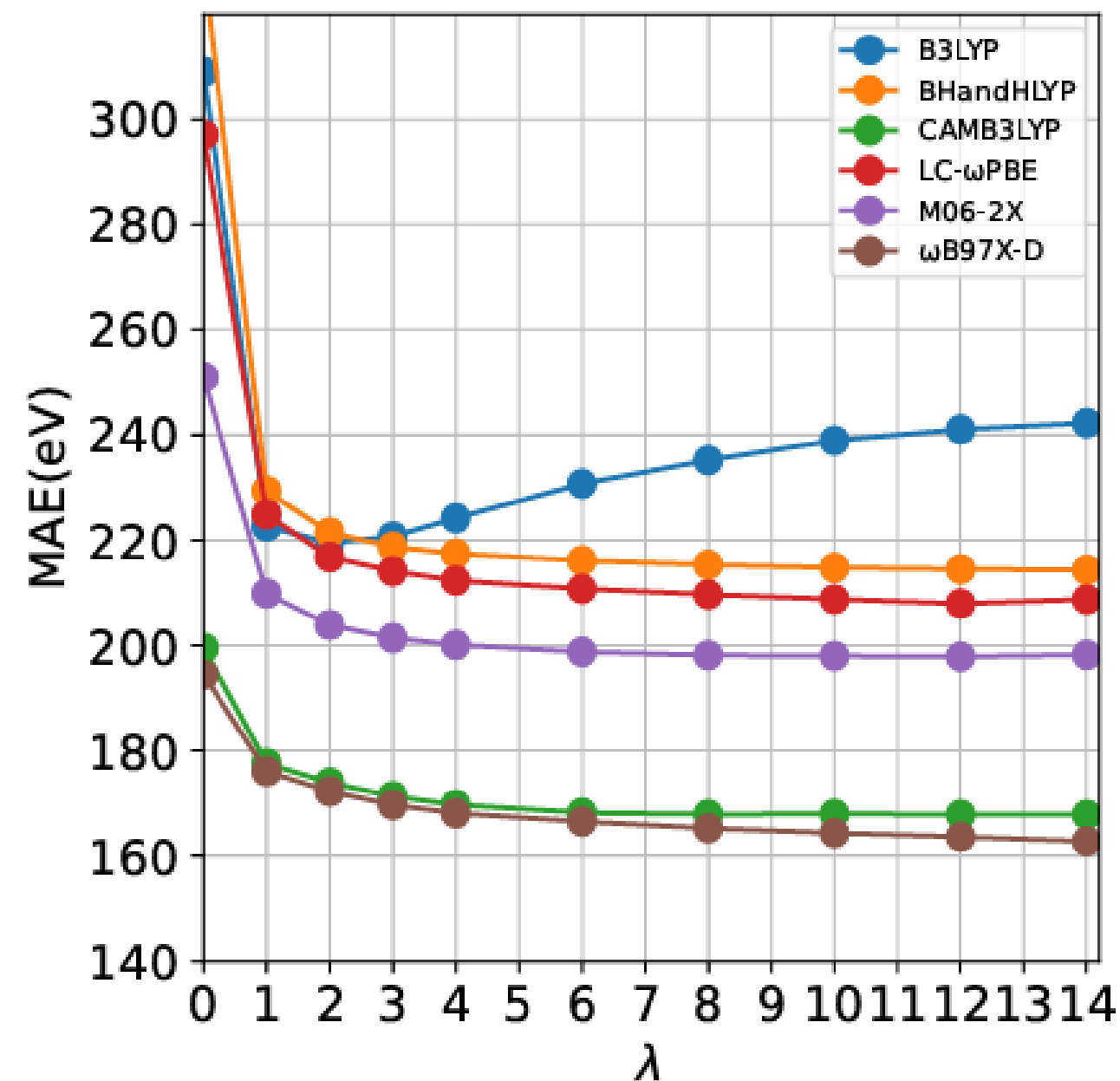
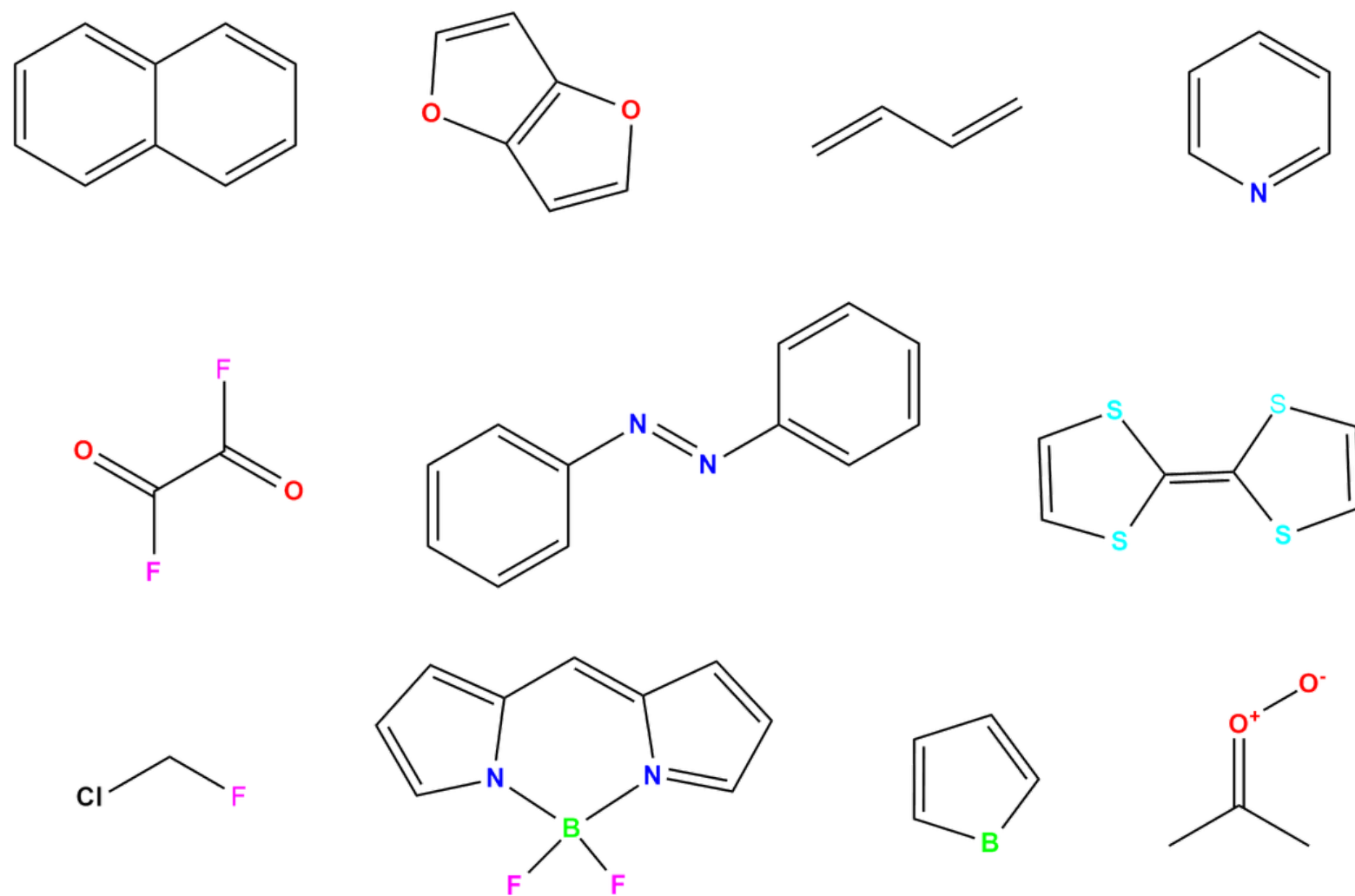
$$V_{ACP}(\mathbf{r}) = \sum_k c_{lk}^A - e^{-\zeta_{lk}^A r^2}$$

$$E_{ref} - E_{base} \approx E_{ACP} = \sum_{lkA} c_{lk}^A \Delta E_{lk}^A$$



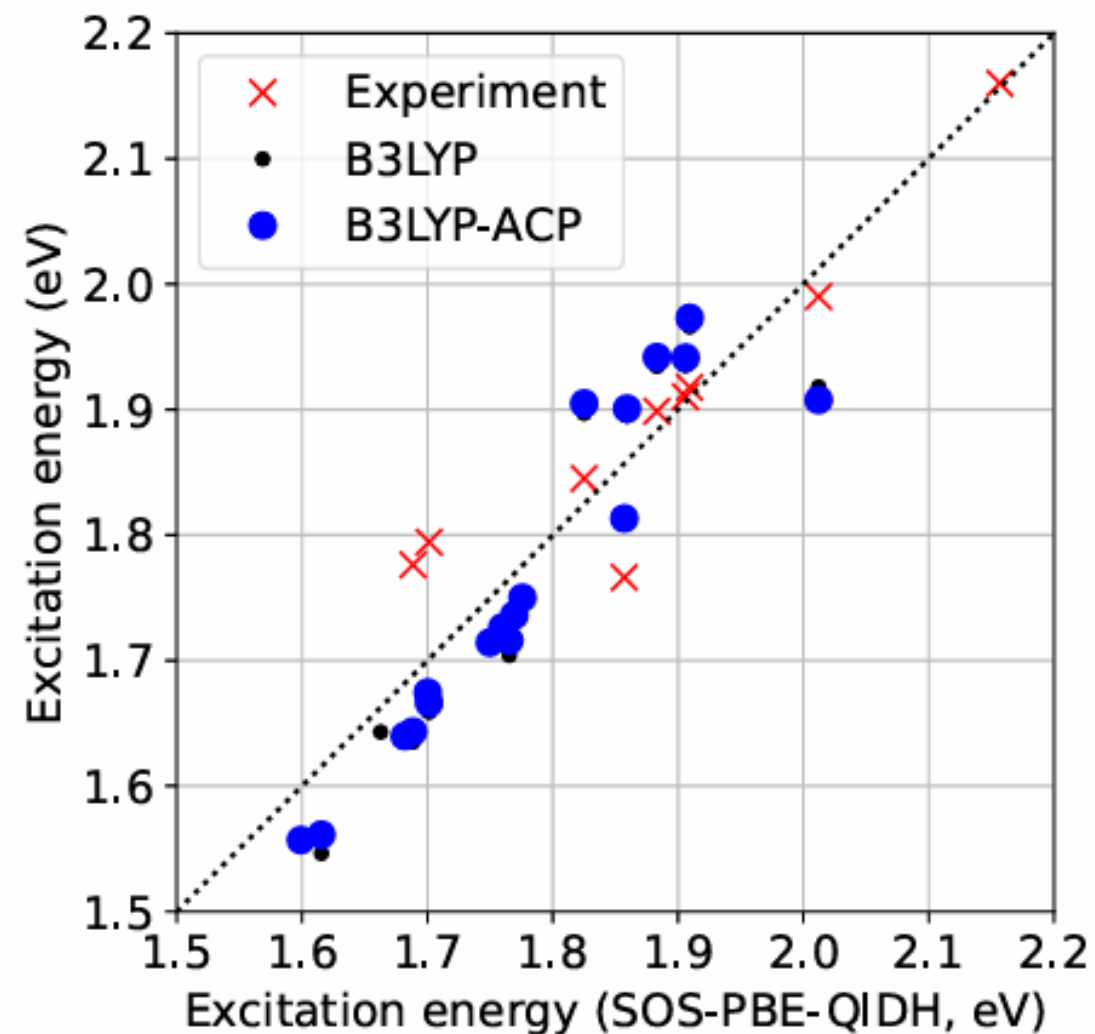
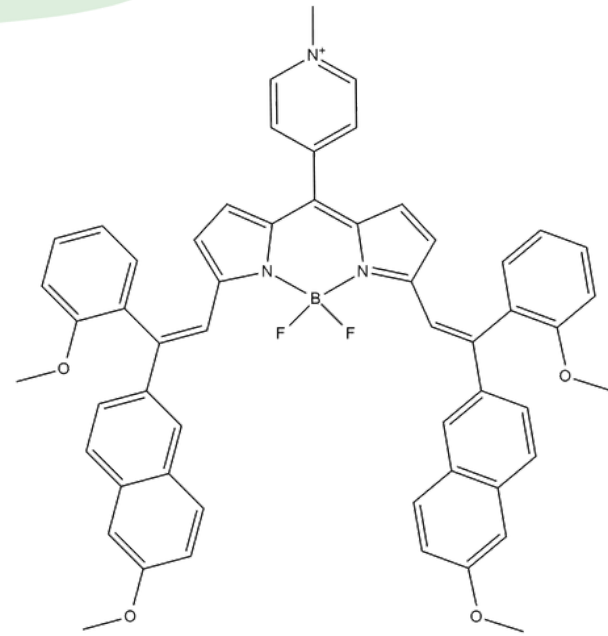
AJUSTE LASSO

Training set

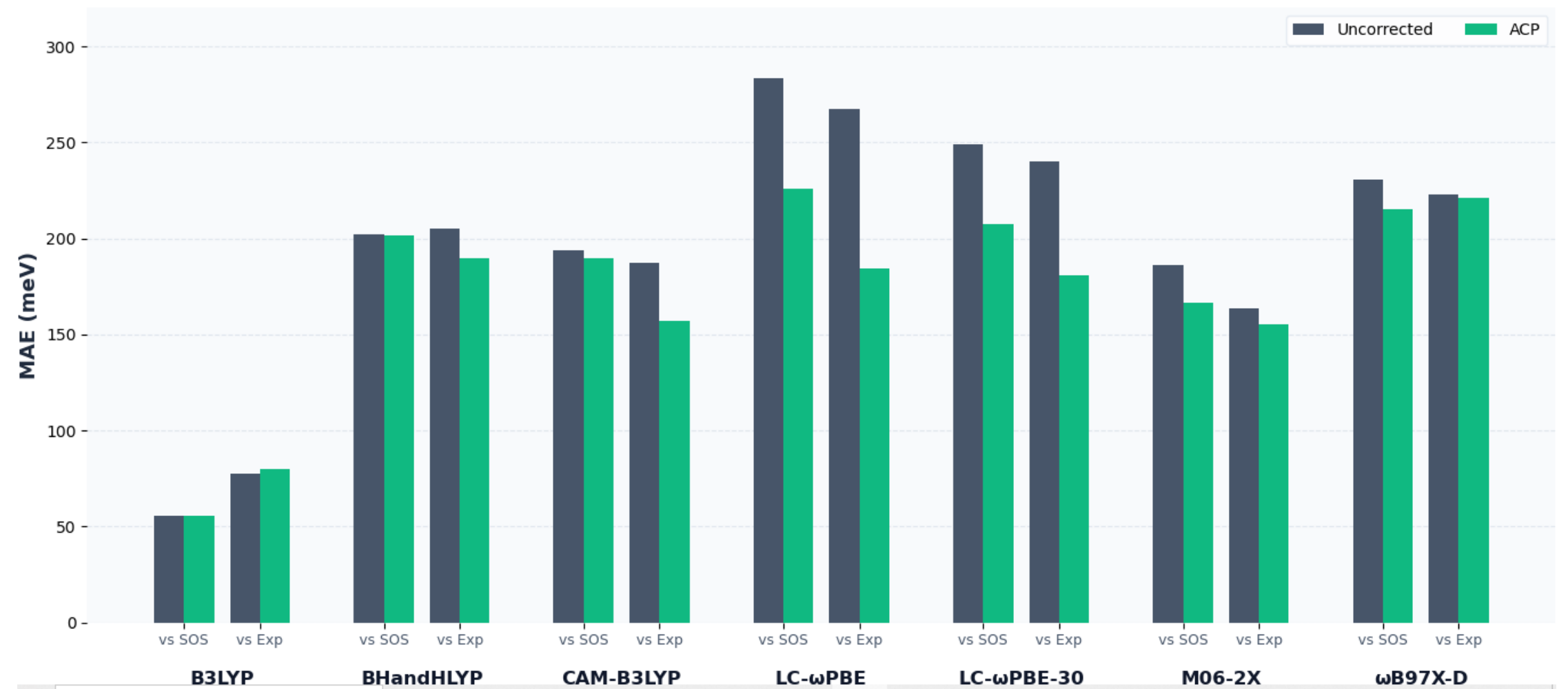


La aplicación del ACP mejora significativamente el rendimiento de los funcionales híbridos para las energías de excitación.

Validación en BODIPYs



Comparativa frente a SOS-PBE-QIDH y a datos experimentales)



Los ACPs reducen el MAE tanto frente a SOS-PBE-QIDH como frente a los valores experimentales, especialmente para las excitaciones de transferencia de carga

Conclusiones

- **Mejora predictiva:** Los ACP optimizan las energías de excitación vertical, reduciendo drásticamente el MAE
- **Generalización en BODIPYs:** mejora el rendimiento para excitaciones de transferencia de carga
- **Menor coste computacional**

Futuras investigaciones

- Optimizar optimizando el parámetro de separación de rango en los funcionales híbridos de rango separado (CAM-B3LYP, ω B97X-D y LC- ω PBE)
- Validación en moléculas con un gran carácter de transferencia de carga