

# ¿Cómo son los modelos de excitones moleculares y qué podemos aprender de la representación de sus mapas electrónicos?

**Luis Alberto Montero Cabrera**

Universidad de la Habana, Cuba

La teoría para la modelación cuántica de sistemas moleculares y poliatómicos en general se aplica hoy en día a través de dos procedimientos principales: los del campo autoconcordado (SCF-MO) y los de la Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT). Se exponen las características principales de ambos enfoques y de sus formas de implementación contemporáneas a través de funciones de un solo electrón, de la interacción de configuraciones (CI) y las teorías dependientes del tiempo (TD). Se aborda la deficiencia de excitones moleculares como una adecuación de los excitones de Frenckel de sistemas cristalinos para moléculas y agregados moleculares. Se discute la necesidad de un enfoque más cercano a la realidad física con la consideración de al menos todos los electrones de valencia o atados con menor energía a los sistemas. Así se desarrolla la gráfica de los mapas de cargas en diversos estados electrónicos y la del uso de un término de interacción electrónica como el de Coulomb – intercambio para la descripción de las características de los excitones y de las posibilidades de estos cálculos para ayudar al diseño de sistemas fotovoltaicos moleculares eficientes y baratos. Se exponen varios ejemplos y aplicaciones tales como la de la fisión de singletes.