
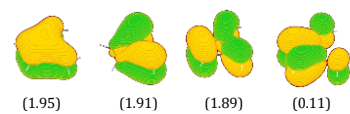




POLISH NATIONAL AGENCY
FOR ACADEMIC EXCHANGE



STER
PROGRAMME

nazwa jednostki: ZESPÓŁ CHEMII KWANTOWEJ Instytut Fizyki Politechniki Łódzkiej		symbol: I-71 https://fizyka.p.lodz.pl/
kierownik: prof. dr hab. inż. Katarzyna Pernal	potencjalni promotorzy: prof. dr hab. inż. Katarzyna Pernal	osoba do kontaktu: dr inż. Ewa Pastorczak tel: 42-631-39-29 ewa.pastorczak@p.lodz.pl
zakres działalności: Opracowujemy teorie chemii kwantowej, metody i algorytmy obliczeniowe do przewidywania struktury elektronowej atomów i cząsteczek. Są one implementowane w programach chemii kwantowej, w tym w naszym autorskim oprogramowaniu GammCor. Obszar naszych zainteresowań obejmuje: <ul style="list-style-type: none">• problem korelacji elektronowej,• teorię funkcjonału gęstości elektronowej,• teorię funkcjonału macierzy gęstości elektronowej,• teorię oddziaływań molekularnych. Interesują nas również rzeczywiste problemy, w rozwiązaniu których mogłyby pomóc kwantowe metody obliczeniowe. Jednym z takich problemów jest działanie fotoprzełączników – molekuł, które ulegają odwracalnym zmianom strukturalnym pod wpływem naświetlenia światłem o określonej barwie. Wykorzystując zarówno wyniki obliczeń, jak i eksperymenty naszych współpracowników, staramy się ustalić, które z własności fotoprzełączników decydują o istotnych parametrach ich działania.		$\begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^v \\ Y^v \end{pmatrix} = \omega^v \begin{pmatrix} -\mathcal{N} & 0 \\ 0 & \mathcal{N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^v \\ Y^v \end{pmatrix}$ <p>Extended Random Phase Approximation equation</p>  <p>Wizualizacja gęstości energii dyspersji dla dimeru wody.</p> $E_{corr}^{ACM_{max}} = \frac{4}{\pi} \text{Tr} \left[\left(\int_0^\infty d\omega \sum_{n=1}^{n_{max}} \frac{\bar{C}(\omega)^{(n)}}{n!(n+1)} \right) \mathbf{D}^2 \right]$ <p>Wyrażenie na energię korelacji stosowane do układów silnie skorelowanych wyprowadzone z teorii połączenia adiabaticznego</p>  <p>Silnie skorelowane orbitale birodnika C₄H₂-1,2-(CH₂)₂</p>
działalność obecna: Nasza obecna działalność koncentruje się na metodach korelacji elektronowej opartych na teoriach połączenia adiabaticznego (adiabatic connection) i przybliżenia fal przypadkowych (random phase approximation). Naszym celem jest opracowanie dokładnego i wydajnego podejścia do obliczania energii korelacji w silnie skorelowanych cząsteczkach. Drugi nurt prac badawczych dotyczy oddziaływań molekularnych w układach multireferencyjnych, w tym elektronowo wzbudzonych dimerach. W tym celu została opracowana i zaimplementowana nowatorska metoda SAPT (symmetry adapted perturbation theory). W naszej grupie aktywnie rozwijane są również metody łączące teorię funkcjonału gęstości elektronowej z teorią funkcji falowej poprzez rozdział zasięgowy operatora oddziaływania elektronowego lub użycie funkcjonału gęstości on-top par elektronowych.		
przyszłe działania: Badanie układów z silną korelacją i rozwijanie algorytmów do obliczania energii korelacji.		
publikacje/patenty/nagrody/granty: <ul style="list-style-type: none">• M. Hapka, M. Przybytek, K. Pernal: Symmetry-adapted perturbation theory based on multiconfigurational wave function description of monomers, Journal of Chemical Theory and Computation 17, 5538 (2021).		



POLISH NATIONAL AGENCY
FOR ACADEMIC EXCHANGE



STER
PROGRAMME

- O. V. Gritsenko, R. van Meer, K. Pernal: Efficient evaluation of electron correlation along the bond-dissociation coordinate in the ground and excited ionic states with dynamic correlation suppression and enhancement functions of the on-top pair density, *Physical Review A* 98, 062510 (2018).
- E. Pastorczak, K. Pernal: Correlation energy from the adiabatic connection formalism for complete active space wave functions, *Journal of Chemical Theory and Computation* 14, 3493 (2018).
- **K. Pernal**: Electron correlation from the adiabatic connection for multireference wave functions, *Physical Review Letters* 120, 013001 (2018).

[słowa kluczowe:](#)

korelacja elektronowa, metody struktury elektronowej, teoria funkcjonału gęstości, silna korelacja

[lista propozycji staży w danej grupie badawczej:](#)

Teoria pp-RPA dla układów silnie skorelowanych.

Funkcjonały gęstości on-top par elektronowych.