

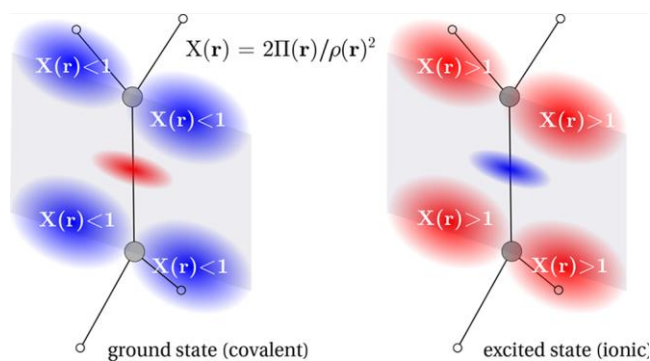
## Gęstość elektronowa i zredukowane macierze gęstości jako narzędzia opisu i przewidywania właściwości cząsteczek

Katarzyna Pernal  
Instytut Fizyki, Politechnika Łódzka

Dokładny opis układów wieloelektronowych w chemii kwantowej wymaga w zasadzie rozwiązania równania Równanie Schrödingera i wyznaczenia pełnej funkcji falowej. Jest to jednak obiekt bardzo złożony, trudny zarówno do obliczenia, jak i do interpretacji. Od dawna jednak wiadomo, że wiele kluczowych informacji o materii elektronowej, w szczególności o cząsteczkach, można uzyskać, posługując się znacznie prostszymi wielkościami: gęstością elektronową oraz jedno- i dwu-elektronowymi zredukowanymi macierzami gęstości.

W pierwszej części seminarium zostaną wprowadzone te pojęcia oraz pokazany ich związek z pełną funkcją falową. Omówione zostaną również współczesne metody obliczeniowe, które pozwalają przewidywać strukturę elektronową cząsteczek bez bezpośredniego odwoływania się do funkcji falowej, wykorzystując jedynie wspomniane wielkości zredukowane.

W drugiej części przedstawione zostaną deskryptory wiązań chemicznych i korelacji elektronowej, konstruowane w przestrzeni rzeczywistej na podstawie tych funkcji. Pokazane zostanie, w jaki sposób umożliwiają one interpretację charakteru stanu elektronowego (np. jonowego i kowalencyjnego), a także przewidywanie energii stanów wzbudzonych oraz różnych własności cząsteczek, takich jak polaryzowalność elektryczna.



### Nota Biograficzna

Katarzyna Pernal jest chemiczką teoretyczną specjalizującą się w rozwoju metod opisu struktury elektronowej cząsteczek, ze szczególnym uwzględnieniem podejść opartych na gęstości elektronowej oraz zredukowanych macierzach gęstości. Jej zainteresowania badawcze obejmują również badanie stanów spinowych w silnie skorelowanych układach molekularnych oraz opis oddziaływań molekularnych w układach poza równowagą i w stanach wzbudzonych.

Ukończyła studia magisterskie z chemii na Politechnice Łódzkiej w 1998 roku, a stopień doktora uzyskała w 2002 roku na Florida State University w Stanach Zjednoczonych. Następnie odbyła dwuletni staż podoktorski na Vrije Universiteit Amsterdam w Holandii i kilkumiesięczny staż na Uniwersytecie Delaware. Od 2008 roku związana jest z Politechniką Łódzką i pracuje w Instytucie Fizyki. W 2018 roku uzyskała tytuł profesora.

Za swoją działalność naukową została uhonorowana m.in. nagrodą International Academy of Quantum Molecular Science.

Aktywnie uczestniczy w działalności wydawniczej wiodących czasopism naukowych. Od 2024 roku pełni funkcję redaktora w Physical Review Letters. Była także edytorem w The Journal of Physical Chemistry Letters, a od wielu lat jest członkinią zespołu redakcyjnego Scientific Reports.