

## **Funkcjonał gęstości par i gęstości elektronowej dla efektywnego opisu powierzchni energii potencjalnej stanów wzbudzonych cząsteczek**

Prawdziwym „koniem pociagowym” szybko rozwijającego się świata inteligentnych technologii jest maleńka, naładowana ujemnie cząstka, czyli elektron. Włączając nasze smartfony i laptopy zaprzęgamy do pracy roje elektronów. Mimo, że nie możemy elektronów zobaczyć ani dotknąć, możemy kontrolować ich zachowanie i zmuszać do przejścia w „stan pracy” działając na materię sygnałem świetlnym powodującym przejście cząsteczek w stany wzbudzone. Opis teoretyczny wzbudzeń elektronowych jest możliwy dzięki mechanice kwantowej pozwalającej przewidywać zachowanie mikromaterii. W praktyce obliczenia kwantowe dla stanów wzbudzonych pozostają wyzwaniem, gdyż istniejące metody przybliżone albo wymagają niedostępnych obecnie mocy obliczeniowych albo nie prowadzą do poprawnych (zgodnych z doświadczeniem) wyników.

W ramach projektu proponujemy nową metodę obliczania wzbudzonych stanów elektronowych cząsteczek. Będzie ona łączyć silne strony modeli wykorzystujących opis układu za pomocą wieloelektronowej funkcji falowej z teorią funkcyjną gęstości (DFT). Teoria funkcyjną gęstości elektronowej pozwala na zastąpienie skomplikowanego obrazu sprzężeń (korelacji) w ruchu elektronów obrazem indywidualnego elektronu poruszającego się w uśrednionym polu innych elektronów. Zaproponowana metoda umożliwi teoretykom badanie wzbudzeń elektronowych w cząsteczkach odpowiednio dokładnie i efektywnie. Realizacja projektu ma doprowadzić do powstania narzędzia teoretycznego służącego do symulacji i przewidywania optymalnych sposobów kontrolowania zachowania elektronów w urządzeniach elektronicznych czy optoelektronicznych.