



**ÉVA ZSUZSANNA  
MIHÁLKA**

Prírodovedecká fakulta  
Univerzita Komenského

Číslo projektu  
3154/01/02

Trvanie projektu  
10/2021 - 9/2025  
Prerušenie projektu  
5/2022 - 5/2023

Študovala som matematiku a chémiu na Univerzite Eötvösa Loránda (ELTE), Budapešť, Maďarsko. Po magisterskom štúdiu som v roku 2021 získala titul PhD v Laboratóriu teoretickej chémie na ELTE pod vedením Pétera. R. Surjána a Ágnes Szabadosovej.

*"Program SASPRO 2 bol príležitosťou s perfektným načasovaním, pretože ponúkal vynikajúcu postdoktorandskú kariéru hneď po mojom doktorandskom štúdiu. Pracovná pozícia na Univerzite Komenského je mojím prvým postdoktorandským pracovným pobytom a hlavnými dôvodmi podať prihlášku bola možnosť učiť sa a spolupracovať s mojím budúcim školiteľom SASPRO 2, prof. Jozefom Nogom, ako aj prestížny charakter pracovného pobytu, ktorý otvára nové dvere v mojej vedeckej kariére. Poskytol mi príležitosť uviesť poznatky, ktoré som nadobudla počas doktorandského štúdia, do inej perspektívy a využiť svoje schopnosti v novom kontexte a zároveň sa rozvíjať v príslušnej oblasti výskumu.*

*V súlade s tým očakávam, že sa počas tohto obdobia budem môcť rozvíjať ako individuálna výskumníčka, viac sa ponoriť do medzinárodnej komunity vo svojom odbore, získať nové zručnosti súvisiace s vedou a rozšíriť svoju zájmovú skupinu vedeckých pracovníkov vďaka stabilnému zázemiu, ktoré ponúka tento program a hostiteľská organizácia. S podporou programu SASPRO 2 môžem vykonávať svoj výskum vo veľmi inšpiratívnom vedeckom prostredí, čo mi zase pomôže stať sa skúsenejšou vedkyňou a posunúť moje budúce kariérne vyhliadky."*

## ZHRNUTIE PROJEKTU

### **Referenčné funkcie založené na gemináloch v rámci prístupov s explicitne korelovanými elektrónmi**

Poznanie elektrónovej štruktúry atómov a molekúl nám pomáha pochopiť a dokonca i predpovedať chemické a fyzikálne javy okolo nás. Správne vyvázenie kvalitatívnej a kvantitatívnej presnosti s počítačovými nárokmi je i dnes výzvou. Podstatou tohto projektu je skĺbenie dvoch súčasných metodológií pre riešenie problému elektrónovej korelácie, s cieľom vyvinúť nové, efektívnejšie prístupy. Navrhovaný model kombinuje metódy s explicitným zahrnutím elektrónovej korelácie (označované ako F12) s referenčnými funkciami na báze elektrónových párov. F12 metodológia je známa tým, že explicitným zahrnutím medzielektrónovej koordináty do vlnovej funkcie sa výrazne zvyšuje numerická presnosť výsledkov. Dôsledkom takéhoto vylepšenia kvality vlnovej funkcie je dosahovanie vysokej presnosti významnou úsporou strojového času oproti štandardným metodológiám založeným na rozvojom v báze jedoelektrónových funkcií. F12 prístupom sa efektívne popíše tzv. dynamická časť elektrónovej korelácie. Na druhej strane modely založené na párových funkciách (gemináloch) umožňujú efektívne popísať „statický“ príspevok do elektrónovej korelácie. Referenčné funkcie, ktoré sa získajú ako antisymetrizované produkty geminálov, presne popisujú medzi-párovú koreláciu. Predkladaný projekt má za cieľ zaviesť a vyšetriť výhody spomenutého zjednoteného prístupu, pričom sa predpokladá synergický efekt zo skúseností tútora v oblasti vývoja metód s explicitným zahrnutím elektrónovej korelácie s vedomosťami a skúsenosťami postdoktorantky v oblasti teórií založených na báze geminálov.



**ÉVA ZSUZSANNA  
MIHALKA**

Prírodovedecká fakulta  
Univerzita Komenského

Číslo projektu  
3154/01/02

Trvanie projektu  
10/2021 - 9/2025  
Prerušenie projektu  
5/2022 - 5/2023

## PUBLIKÁCIE

1. J. Chem. Theory Comput. 17, 4122 (2021) <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jctc.1c00305>
2. J. Chem. Theory Comput. 16, 892 (2020) <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jctc.9b00858>
3. J. Chem. Phys. 150, 031101 (2019) <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.5083191>