



BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM  
VEGYÉSZMÉRNÖKI ÉS BIOMÉRNÖKI KAR

**Fém-halogenid molekulák szerkezetvizsgálata**  
**A kísérleti meghatározás számításos kémiai támogatása**

Tézisfüzet

**Varga Zoltán**

Témavezető: Dr. Hargittai Magdolna  
kutatóprofesszor  
az MTA rendes tagja

MTA-BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport  
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék  
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2010

## I. Bevezetés

A fém-halogenidek általában egyszerű, néhány atomot tartalmazó, rendszerint szimmetrikus rendszerek. Szimbolikus kötésekkel felrajzolt egyszerűségük ellenére a fémek elektronszerkezetének nagy változatosságából adódóan még sok újdonságot tartogatnak a szerkezeti kémikusok számára. Ez a változatosság nemcsak a periódusos rendszerben lévő fémek nagy számából adódik, az oxidációs és elektronállapotok is újabb változókat jelentenek, ami növeli a lehetőségek számát. Különösen a d és f elektronhéjak betöltöttségének lehetőségei fontosak, itt gyakran találkozunk olyan kombinációkkal, amelyek az általánosan várható molekuláris tulajdonságoktól eltérő jellemzőket eredményezhetnek.

A fém-halogenid molekulák, mint célcsoport vizsgálata nem egyszerű feladat, aminek egyik oka, hogy normál körülmények között jellemzően szilárd halmazállapotúak, kristályként léteznek, és molekuláris állapot csak gázfázisban érhető el. Kristályaik elpárologtatásához rendszerint magas, gyakran 1000 K feletti hőmérsékletre van szükség. Ilyen körülmények között a termikus hatások nem elhanyagolhatóak, azokat figyelembe kell venni a kísérleti adatok kiértékelése során.

Csoportunk és annak elődje a gázfázisú elektrondiffrakciós technikával határozott meg molekulászerkezeteket. Ennek egy speciálisabb ága a Hargittai Magdolna nevéhez fűződő fém-halogenid rendszerek kutatása. Fontos megemlítenem, hogy maguk a kísérletek közel egy évtizede befejeződtek, és azóta a korábban még ki nem értékelt vizsgálati anyagok feldolgozása folyik. Jellemzően olyan bonyolult rendszerek maradtak erre az időszakra, amelyekre az elektrondiffrakciós technikából származó információk alapján a megbízható szerkezetanalízis egyedül a kísérleti adatokra támaszkodva nem megoldható. A szerkezetfelderítés szempontjából fontos, elsősorban spektroszkópiai eredmények felhasználása eddig is megtörtént, azonban a térbeli szerkezetet meghatározó egyes paraméterek gyakran egyik mérési technikából sem határozhatóak meg elfogadható pontossággal.

A kísérleti technikák mellé érkezett a kvantumkémia, mint elméleti szerkezet-meghatározó módszer. Rohamos fejlődésének köszönhetően az elért eredményekre egyre nagyobb mértékben támaszkodhatunk. Jelenleg, megfelelő módszer/báziskészlet

kombinációkkal képesek vagyunk a kísérletileg meghatározott paraméterek hibahatárán belül eső eredményeket számolni. Ehhez azonban kísérleti adatok szükségesek viszonyítási alapnak, mivel önmagukban a számítások megbízhatósága nem dönthető el. Amennyiben lehetőségünk van erre, célszerű a kísérleti és számítási technikákat együtt alkalmazni, mivel ezzel megbízhatóbb eredményeket érhetünk el.

Elsődleges célunk minden esetben a vizsgált molekulák szerkezetmeghatározása volt, azonban nem álltunk meg ennél a pontnál. Az elért eredmények értelmezéséhez, mélyebb megismeréséhez az elmélet oldaláról lehetőségünk van az elektronszerkezet és a molekulaserkezet kapcsolatát és a halogének sorában jelentkező tendenciát vizsgálni, amit rendszerint meg is tettünk.

A három és négyatomos fém-halogenidek vizsgálata során az egyik legfontosabb kérdés, hogy azok lineáris/sík, vagy hajlított/piramisos szerkezettel rendelkeznek-e. A molekulák szerkezetéről 2000-ben jelent meg egy részletes összefoglaló dolgozat.<sup>1</sup> Azonban, azóta is évről évre jelennek meg publikációk eddig nem vizsgált molekulák szerkezetéről. Meg kell említenem, hogy az utóbbi években is jelennek meg olyan publikációk, amelyekben a korábbi eredményeket figyelmen kívül hagyva, akár egy mérési technika felhasználása alapján próbálják általánosítani az elgondolásaikat egész vegyületesaládokra a szerzők. Nemrég jelent meg az irodalomban egy cikksorozat, amelyben a szerzők a kötések hőmérsékleti megnyúlását elhanyagolhatónak találták.

A főcsoportbeli és a d-mezőbe tartozó fém-halogenidek szerkezetére vonatkozóan már rendelkezünk egy átfogó képpel. Az elmúlt években ezen a területen is jelentek meg újabb, pontosabb leírású báziskészletek, amelyek segítségével megbízhatóbb eredményeket kaphatunk a még nem vizsgált vagy felülvizsgálandó rendszerekre.

Az alumínium-monohalogenideket (AlX, X = F, Cl, Br és I) az AlX<sub>3</sub> molekulák elektrondiffrakciós kiértékeléséhez szükséges kötésaszimmetria paraméter meghatározásához kezdtük el vizsgálni.

A vas-triklorid ismertsége és jelentős mértékű felhasználása (például nyomtatott áramkörök gyártása során) ellenére molekulaserkezete eddig „ismeretlen” volt. A vas-trihalogenidek (FeX<sub>3</sub>, X = F, Cl, Br és I) sorában megfigyelhető stabilitáscsökkenésre sem találtunk magyarázatot az irodalomban.

<sup>1</sup> Hargittai, M., *Chem. Rev.* **2000**, *100* (6), 2233-2301.

A vanádium-halogenidek (VCl<sub>2</sub> és VCl<sub>3</sub>) esetében a korábbi kiértékelést pontosítottuk tömegspektrometriás adatok és az elvégzett kvantumkémiaili számítások alapján.

Viszonylag új terület a lantanida-halogenidek vizsgálata. Gyakorlati szempontból találkozhatunk velük a lantanida fémek magas hőmérsékletű extrakciója és elválasztási folyamatai, nukleáris hulladékok tisztítása vagy a fém-halogenid lámpák gyártása során, de úgy is ismertek, mint szerves kémiai katalizátorok, nagy üreggel rendelkező kalitka-szerű komplexek komponensei. Az általunk is vizsgált diszprórium-trihalogenideknek (DyX<sub>3</sub>, X = Cl, Br és I), és azok más, elsősorban alkálifém-halogenidekkel alkotott komplexek a lámpaiparban van kiemelt jelentősége.<sup>2</sup> A nehézfém-vegyületek kvantumkémiaili kutatása az elmúlt két évtizedben indult el és az f-elemekre kidolgozott báziskészleteket eleinte úgy építették fel, hogy az f elektronokat a törzspotenciálba helyezték. Ez a vegyérték — törzs pályafelosztás mind kísérletileg, mind számítások alapján indokolható volt a pályák inertsége miatt és a kor számítástechnikai szintjén lehetővé tette a munkát. A lantanida-trihalogenidekről 2004-ben jelent meg összefoglaló cikk,<sup>3</sup> azonban a számítások színvonala messze elmaradt a kísérleti adatokétól. Csupán néhány éve jelentek meg olyan báziskészletek, amelyek lehetővé teszik a 4f héj elektronszerkezetének vizsgálatát és a számítógépek kapacitása az ilyen jellegű munkákat ma már képes kiszolgálni. Röviden, most jött el az ideje ennek a területnek.

## II. Kísérleti és számítási módszerek

Kutatásainkat elsősorban a magas hőmérsékletű gázfázisú elektrondiffrakció és kvantumkémiaili számítások eszköztárára alapoztuk, ez két esetben kiegészült rezgési spektroszkópiaili módszerekkel, amelyeknél a kísérleteket a kooperáló partner végezte.

Az elektrondiffrakció gyakorlatilag az egyetlen olyan kísérleti módszer, amely alapján a fém-halogenid molekulák szerkezete meghatározható. A mérések (már korábban) a kombinált ED-kvadrupol tömegspektrométeres berendezéssel történtek.

A kvantumkémiaili számítások oldaláról a nyílt héjú rendszerek számítása nagy körültekintést igényel. A részlegesen betöltött d és f alhéjak lehetséges

<sup>2</sup> Haverlag, M., *Phys. Scripta* **2005**, *T119*, 67-70.

<sup>3</sup> Kovács, A.; Konings, R. J. M., *J. Phys. Chem. Ref. Data* **2004**, *33* (1), 377-404.

elektronkonfigurációinak és azok energiasorrendjének meghatározásához elengedhetetlen a többdeterminánsos módszerek használata (CASSCF, MRCI és CASPT2), azonban ezek nem alkalmazhatóak költséghatékonyan olyan számítási szinteken, amelyek a kísérlettel összevethető geometriai adatokat biztosítanak. Ilyen jellegű számítások esetében visszatértünk az egydeterminánsos (MP2, CCSD(T) és DFT) módszerekhez, igazodva a többdeterminánsos számítások alapján meghatározott elektronkonfigurációhoz.

Az alkalmazott módszer mellett a másik jelentős kvantumkémiai paraméter a molekulát alkotó atomokat leíró báziskészlet minősége. A sokelektronos atomokat leíró báziskészletek kidolgozása nyilvánvalóan nehéz, ezért egy-egy atomhoz csupán néhány báziskészlet érhető el, és azok igen gyakran csak több-kevesebb sikerrel vesznek figyelembe relativisztikus hatásokat, ami viszont ilyen jellegű rendszerek leírásához nélkülözhetetlen. Arra törekedtünk, hogy a sorozatos kompromisszum-kényszerek mellett olyan módszer/báziskészlet kombinációkat használjunk, amelyek jól közelítik a kísérleti paraméterek szintjét.

A szerkezetek optimalálásához, ahol erre lehetőségünk volt, az analitikai gradiens technikát választottuk, a többi esetben manuálisan kerestük meg az egyensúlyi állapotokat. A különböző elektronállapotok egyensúlyi szerkezetének meghatározásához szükséges számításokba beleérttem a hullámfüggvények stabilitásvizsgálatát és a frekvenciaszámításokat is.

A hőhatások modellezéséhez a kérdéses normálrezgés mentén felvettük a potenciálfelületet, amely alapján vagy Boltzmann-eloszlást számoltunk a kísérleti hőmérsékletre, vagy úgynevezett dinamikus analízishez felhasználtuk a görbe adott diszkrét pontjaihoz tartozó szerkezeti változásokat.

Populációs, NBO és Mayer kötésindex analízist végeztünk a molekulák elektronszerkezetével kapcsolatos tulajdonságainak megismeréséhez.

A termodinamikai paraméterek meghatározásánál minden esetben jelöltük, hogy azok számítása során felhasználásra került-e a BSSE korrekció.

A kvantumkémiai számításokhoz a GAUSSIAN 98 és 03, a MOLPRO és a GAMESS programcsomagokat használtuk.

Az anharmonikus frekvencia-eltolódások meghatározása a normálrezgés potenciálgörbéje alapján történt egydimenziós Hamilton operátor segítségével (FGH1D program).

Két rendszer (DyBr<sub>3</sub> és DyI<sub>3</sub>) esetében gázfázisú infravörös, valamint mátrix-izolációs infravörös és Raman spektroszkópiai módszerekkel egészült ki a vizsgálat. A rezgési spektroszkópia elvileg alkalmas a molekulák szimmetriájának megállapítására és a meghatározható frekvenciaértékek alapján kiszámított rezgési amplitúdók fontos adatok az elektrondiffrakciós analízis szempontjából. A gázfázisú vizsgálatok magas hőmérsékleten történtek, ezért a termikus hatások az elektrondiffrakcióhoz hasonlóan ezekben az esetekben is fennállnak. A mátrix-izolációs technikában a magas hőmérsékleten elpárologtatható vizsgált anyag gőzét nagymennyiségű inert anyag – itt kripton és xenon nemesgázok – jelenlétében befagyasztyják, ezáltal azok egymástól elkülönített molekuláris állapotban maradnak.

Az elektrondiffrakciós vizsgálatokhoz a harmonikus rezgési amplitúdókat az ASYM és SHRINK programokkal határoztuk meg a geometria, a rezgési frekvenciák és a hozzájuk tartozó erőállandók alapján.

### III. Eredmények

Fém-halogenidek kvantumkémiai számításakor az eredmények erősen függenek a számítás körülményeinek helyes megválasztásától. A post-HF számításokra jellemző elektronkorrelációs szintek ellenőrzéséhez egy egyszerű molekulacsoportra (AIX, X = F, Cl, Br, I) végeztünk számításokat. Felhívtuk a figyelmet arra, hogy nem szabad nagyobb korrelációs teret alkalmazni a számításban, mint amilyenre az alkalmazott báziskészletet optimalták, mivel a gyengébb leírás törzspályák hatása kiszámíthatatlan. A fenti problémák 0.01 – 0.02 Å eltérést is okozhatnak a számított kötéhosszakban, ami egy nagyságrenddel nagyobb, mint az elvárható pontosság, továbbá kutatásaink során talákoztunk olyan példával, ahol erre vezethető vissza a molekula szerkezetének változása. Továbbá, olyan rendszerekben, ahol legalább egy atomra törzspotenciális báziskészletet használunk a különböző kvantumkémiai programokban javasolt ellenőrizni kell az alapbeállítás elektronkorreláció szintjét.

A kvantumkémiai számítások és elektrondiffrakciós adatok kombinált analizisével meghatároztuk a vas-triklorid magas (900 K) hőmérsékleten végzett kísérletének gőzösszetételét és a jelenlevő monomer és dimer molekulák szerkezetét. Ehhez felhasználtuk továbbá egy korábbi alacsony (460 K) hőmérsékleten végzett kísérlet újra-analizált eredményeit.

Összefüggést találtunk a molekulák stabilitása és a központi fématom 3d héjának betöltöttsége között a vas-trihalogenidek vizsgálata során. A nehezebb halogenidek esetében a kötés növekvő kovalens jellege annyira fokozza a 3d héj betöltöttségét, ami már inkább a kétértékű vasionra jellemző. Ezért ezek a trihalogenidek halogénvesztés mellett vas-dihalogenidekként stabilizálódnak.

Régóta ismert, hogy könnyebben elpárologtatható egy anyag, ha a kristályszerkezete és a gázfázisú molekulaszervezete között közvetlen kapcsolat van, ami a fázisváltáskor bekövetkező átrendeződés során energia megtakarítással jár. A vas-triklorid oligomerjeinek számításával olyan összefüggést tártunk fel, amely alapján a dimer és tetramer molekulák egyértelműen beilleszthetők a kristályrácsba, ezért feltehetően a kristályosodás folyamata során is fontos szerepük van.

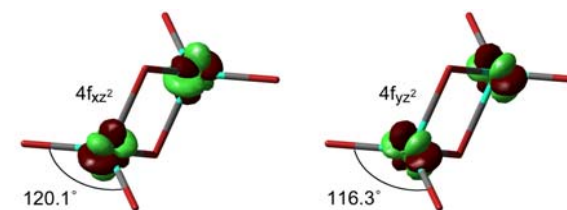
Kvantumkémiai számításokat végeztünk egy korábbi elektrondiffrakciós kísérlet további értelmezéséhez. Megállapítottuk, hogy a tömegspektrometriás eredményekkel összhangban a vanádium-diklorid párolgása során részben vanádium-trikloriddá alakul át. A több kémiai forma egyidejű megjelenése mellett a gőzfázis bonyolultságát fokozza, hogy a vanádium nyílt 3d héja miatt több alacsony energiájú gerjesztett elektronállapot is megjelenik. A kvantumkémiai számítások és elektrondiffrakciós adatok kombinált analizisével meghatároztuk a gőz összetételét és a jelenlevő összes molekulatípus szerkezetét.

A Jahn-Teller hatás kimutatása gázfázisú rendszerek geometriájában többféle nehézségbe ütközik. A vanádium-triklorid kvantumkémiai vizsgálatával egyértelműen bizonyítottuk, hogy a molekula egyensúlyi szerkezete a Jahn-Teller hatás következtében torzított alakú.

A diszprózium-trihalogenidek szerkezetét kombinált elektrondiffrakciós, rezgési spektroszkópiái és kvantumkémiai számítások analizisével határoztuk meg. Ennek során a számításokban megvizsgáltuk a különböző törzspotenciálok és csatolt báziskészletek

alkalmazhatóságát. A kísérleti elektrondiffrakciós kötéshosszak és spektroszkópiái rezgési frekvenciák fontos viszonyítási alapul szolgáltak. Megállapítottuk, hogy a korábbi ismereteknek megfelelően a 4f alhéj nem vesz részt közvetlenül a kémiai kötésekben, a nem-kötő pályák közé tartoznak. Ahhoz, hogy reális kötéshosszat kapjunk a számításban, a 4f alhéjat a vegyértékhéj részeként kell tekinteni.

Az általános elképzeléssel szemben kimutattuk a 4f pályák betöltöttségének szerepét a dimer molekulák szerkezetének kialakításában. A 1. ábrán a terminális vegyértékszögökben okozott változást mutatom be egy leegyszerűsített, ugyanakkor szemléletes módon. Ebből az a következtetés vonható le, hogy 4f pályák betöltöttségétől függő elektronállapotok elektronsűrűsége valójában hatással van a ligandumok térbeli helyzetére, függetlenül attól, hogy a kémiai kötések adó vegyértékhéj alatt helyezkednek el.



**1. ábra** A 4f pályák molekulageometriára gyakorolt hatásának szemléltetése.

Annak következtében, hogy a 4f elektronok viszonylag mélyen helyezkednek el az elektronsűrűségben, a két távolabb elhelyezkedő lantanida atom 4f pályája között ferro- és antiferromágneses kölcsönhatás is lehetséges. A kis és magas spinnel jellemzett elektronállapotok dimer szerkezete és energiája gyakran egybeesik.

Különböző módszerek gyakran eltérő szimmetriát állapítanak meg ugyanarra a molekulára. Így például a mátrix-izolációs spektroszkópiái vizsgálat alacsonyabb szimmetriát mutat ki egyes fém-halogenidek esetében, mert a mátrixban stabilis komplexek alakulnak ki a nemegáz mátrix atomjai és az azokat polarizálni képes, erősen ionos molekulák között. A diszprózium-trihalogenidek vizsgálata során azt tapasztaltuk, hogy a spektrumban a vártakon felül további sávok jelentek meg. Erre a jelenségre találtunk magyarázatot kvantumkémiai modellszámításainkkal. A stabilizációs energiák arra utalnak,

hogy a DyBr<sub>3</sub> molekula szerkezete egyértelműen piramisos és a DyI<sub>3</sub> molekula esetében többféle komplex-szerkezet képződik a mátrixban.

A nehézfém-halogenidekhez tartozik egy irodalomban megjelent tévedés korrigálása, ahol a szerzők elméleti számítások alapján elhanyagolhatónak találták a kötések hőmérsékleti megnyúlását. Az elméleti spektroszkópián alapuló számításokban megadták a rezgések okozta változásokat, azonban a rezgések csatolásának figyelembe vételére nem tértek ki. Ez utóbbiak nem elhanyagolhatóak, számításukkal a kísérletből meghatározható megnyúlás jól reprodukálható.

Összességében elmondható, annak ellenére, hogy a vizsgálati módszereinket végig ugyanazokra az elemekre építettük, szinte minden vizsgált rendszer egyedi megoldást igényelt. Az 1. táblázat illusztrálja, hogy kísérleti adatok és a magas szintű számítások együttes feldolgozása a szerkezetanalízisben nagy pontosságú geometriai paramétereket eredményez.

**1. táblázat** A vizsgált monomer molekulák elektrondiffrakciós (ED) kísérlete és számítások alapján meghatározott egyensúlyi kötőhosszainak (Å) összefoglalása.

	FeCl <sub>3</sub>	VCl <sub>2</sub>	VCl <sub>3</sub>	DyCl <sub>3</sub>	DyBr <sub>3</sub>	DyI <sub>3</sub>
	Fe–Cl	V–Cl	V–Cl	Dy–Cl	Dy–Br	Dy–I
ED, $r_e^M$	2.122(6)	2.185(21)	2.149(8)	2.443(14)	2.591(8)	2.808(7)
Szám., $r_e$	2.122	2.192	2.152	2.444	2.592	2.812

#### IV. Tézisek

1. Meghatároztuk kilenc fém-halogenid molekulászerkezetét (kötőhosszak, rezgési amplitúdók, vegyértékszögek) kísérleti és elméleti szerkezetvizsgálati módszerek együttes alkalmazásával. (2–6)
2. Szemben azzal az elgondolással, hogy az elektronkorrelációs szint növelésével javítjuk egy báziskészlet teljesítőképességét, megállapítottuk, hogy elsősorban nehézatomok esetében ennek az eljárásnak a megbízhatósága csökken, mivel a pontatlanabb leírású pályák hatása kiszámíthatatlan. (1, 4–5)

3. Számítási adatok alapján megállapítottuk, hogy a VCl<sub>3</sub> molekula szerkezetét a Jahn-Teller torzulás határozza meg, amelynek következtében az általánosan várható szimmetria csökken. (3)
4. Számítások alapján kimutattuk, hogy a 4f pályák betöltöttségétől függő elektronállapotok elektronsűrűsége hatással van a lantanida atom körüli ligandumok elhelyezkedésére, szemben azzal az általános elképzeléssel, hogy a 4f alhéj nem befolyásolja azt. (4–6)
5. Számítások alapján megállapítottuk, hogy a lantanida atomok vegyértékhéja alatt elhelyezkedő 4f alhéjak között ferro- és antiferromágneses kölcsönhatás is lehetséges az alhéjak egymástól való elszigeteltségének következtében. (4–6)
6. Kísérleti és elméleti módszerek együttes alkalmazásával meghatároztuk a diszporózium-tribromid és -trijodid molekulák rezgési frekvenciáit. (5, 6)
7. Megállapítottuk, hogy a mátrix-izolációs technikában az általában inertnek tekintett nemesgázatomok képesek kölcsönhatásba lépni a lantanida-trihalogenidek központi fématomjával, ezzel megváltoztatva a molekulászerkezetet. (5, 6)
8. Megállapítottuk, hogy a vas-trihalogenid molekulák sorában tapasztalt jelentős stabilitáscsökkenést a központi fématom 3d héjának betöltöttség-növekedése magyarázza, miáltal a vas-dihalogenidekéhez hasonló betöltöttség alakul ki és a rendszer halogénvesztéssel stabilizálódik. (2)
9. Kijavítottunk egy, a kötések hőmérsékleti megnyúlását megkérdőjelező téves irodalmi megállapítást; az eredeti szerzők által elhanyagolt rezgési csatolások figyelembevételével a vizsgált kötések hőmérsékleti megnyúlása megfelel a kísérletből meghatározható értéknek. (7)

#### V. Alkalmazás, vagy alkalmazási lehetőség

Az elvégzett munkáink az alap kutatások témakörébe tartoznak. Elsősorban a molekulászerkezet, a kémiai kötés és az elektronszerkezet összefüggéseinek megértésében fontosak. Ebből a szempontból a felhasználás kézi- és tankönyvek formájában történhet

meg. A meghatározott pontos kémiai és fizikai-kémiai paraméterek azonban a gyakorlati felhasználás során is előtérbe kerülnek, az ipari modellezésekhez használt termodinamikai függvények alkalmazása során.

## VI. Közlemények

Összesített hatástényező (IF): 52.998

Összesített idézettség (I): 115 ( 74 független) [2010. nov. 29.]

### A doktori értekezésben szereplő közlemények

1. Molecular constants of aluminum monohalides: Caveats for computations of simple inorganic molecules  
M Hargittai, **Z Varga**  
*J Phys Chem A* 2007, 111(1), 6-8 (IF: 2.918, I: 6)
2. Gas-Phase Structures of Iron Trihalides: A Computational Study of all Iron Trihalides and an Electron Diffraction Study of Iron Trichloride  
**Z Varga**, M Kolonits, M Hargittai  
*Inorg Chem* 2010, 49(3), 1039-1045 (IF: 4.657, I: 1)
3. Molecular geometry of vanadium dichloride and vanadium trichloride: A gas-phase electron diffraction and computational study  
**Z Varga**, B Vest, P Schwerdtfeger, M Hargittai  
*Inorg Chem* 2010, 49(6), 2816-2821 (IF: 4.657, I: 0)
4. On the effect of 4f electrons on the structural characteristic of lanthanide trihalides. Computational and electron diffraction study of dysprosium trichloride  
G Lanza, **Z Varga**, M Kolonits, M Hargittai  
*J Chem Phys* 2008 128(2) 074301 (IF: 3.149, I: 11)
5. Does the 4f Electron Configuration Affect Molecular Geometries? A Joint Computational, Vibrational Spectroscopic, and Electron Diffraction Study of Dysprosium Tribromide  
CP Groen, **Z Varga**, M Kolonits, KA Peterson, M Hargittai  
*Inorg Chem* 2009, 48(9), 4143-4153 (IF: 4.657, I: 4)

6. Curious matrix effects: a computational, electron diffraction, and vibrational spectroscopic study of dysprosium triiodide  
**Z Varga**, CP Groen, M Kolonits, M Hargittai  
*Dalton Trans* 2010, 39(27), 6221-6230 (IF: 4.081, I: 1)
7. On the thermal expansion of molecules  
**Z Varga**, M Hargittai, LS Bartell  
*Struct Chem* megjelenés alatt

### A doktori értekezés témájában megjelent további közlemények

8. The Elusive Structure of CrCl<sub>2</sub> - A Combined Computational and Gas Phase Electron Diffraction Study  
B Vest, **Z Varga**, M Hargittai, A Hermann, P Schwerdtfeger  
*Chem Eur J* 2008, 14(17), 5130-5143 (IF: 5.454, I: 10)
9. Structures and thermodynamic properties of aluminum oxyhalides: A computational study  
**Z Varga**, M Hargittai  
*Struct Chem* 2008, 19(4), 595-602 (IF: 1.433, I: 2)
10. Vapor phase tin diiodide: its structure and thermodynamics, a computational study  
Z Neizer, **Z Varga**, G Jancsó, M Hargittai  
*Struct Chem* 2007, 18(5), 641-648 (IF: 0.888, I: 4)
11. Chemistry, commentary and community: Discussion of "The NaDyBr<sub>4</sub> complex: its molecular structure and thermodynamic properties" by Varga and Hargittai  
JF Liebman, **Z Varga**, M Hargittai  
*Struct Chem* 2007, 18(3), 269-271 (IF: 0.888, I: 2)
12. Quasilinear molecule par excellence, SrCl<sub>2</sub>: structure from high-temperature gas-phase electron diffraction and quantum chemical calculations; Computed Structure of SrCl<sub>2</sub>.Argon complexes  
**Z Varga**, G Lanza, C Minichino, M Hargittai  
*Chem Eur J* 2006, 12(32), 8345-8357 (IF: 5.015, I: 12)
13. The NaDyBr<sub>4</sub> complex; its molecular structure and thermodynamic properties  
**Z Varga**, M Hargittai  
*Struct Chem* 2006, 17(2), 225-233 (IF: 1.510, I: 5)

#### Más témakörökben megjelent publikációk

14. Paradigms and paradoxes: the conformation of the fundamental unit of hyaluronic acid  
**Z Varga**, I Hargittai  
*Struct Chem* 10.1007/s11224-010-9662-2 (IF: 1.637, I: 0)
15. Halogen acceptors in hydrogen bonding  
A Kovács, **Z Varga**  
*Coordin Chem Rev* 2006, 250(5-6), 710-727 (IF: 8.815, I: 34)
16. Substituent effects on long-range interactions in the  $\beta$ -sheet structure of oligopeptides  
V Horváth, **Z Varga**, A Kovács  
*J Mol Struct (THEOCHEM)* 2005, 755(1-3), 247-251 (IF: 1.045, I: 3)
17. Hydrogen bonding in peptide secondary structure  
**Z Varga**, A Kovács  
*Int J Quantum Chem* 2005, 105(4), 302-312 (IF: 1.192, I: 8)
18. Long-range effects in oligopeptides. A theoretical study of the  $\beta$ -sheet structure of Gly<sub>n</sub> (n = 2-10)  
V Horváth, **Z Varga**, A Kovács  
*J Phys Chem A* 2004, 108(33), 6869-6873 (IF: 2.639, I: 12)
19. Structure analysis of oligopeptides by means of quantum chemical calculations  
**Z Varga**  
*Periodica Polytechnica Ser Chem Eng* 2003, 47(2), 153-154
20. Computed long-range effects in Gly<sub>n</sub> (n = 2-8) oligopeptides  
V Horváth, **Z Varga**, A Kovács, I Hargittai  
*Periodica Polytechnica Ser Chem Eng* 2003, 47(1), 86-87

#### Konferencia részvételek (e: előadás, p: poszter)

1. Iron trihalides: An electron diffraction and quantum chemical study (p)  
**Z Varga**, M Kolonits, M Hargittai  
13th European Symposium on Gas Electron Diffraction (*Blaubeuren, Németo.* 2009)
2. Vas-halogenidek szerkezeti jellegzetességei (e)  
**Z Varga**, M Kolonits, M Hargittai  
XII. Anyagszerkezet-kutatási Konferencia (*Mátrafüred, Magyaro.* 2009)

3. Diszprózium-trihalogenidek szerkezetvizsgálata (e)  
**Z Varga**, M Hargittai  
XIV. Nemzetközi Vegyészkonferencia (*Kolozsvár, Románia* 2008)
4. Heterocomplexes of DyBr<sub>3</sub> with Alkali Halides: A Computational Study of Their Structures and Relative Stabilities (p)  
Z Varga, M Hargittai  
15th Conference on Current Trends in Computational Chemistry (*Jackson, Mississippi, USA* 2006)
5. Alkálihalogenidek és lantanida-halogenidek gázfázisú komplexei: Az AlkDyBr<sub>4</sub> komplexek (e)  
**Z Varga**, M Hargittai  
XI. Anyagszerkezet-kutatási Konferencia (*Mátrafüred, Magyaro.* 2006)
6. Távolható kölcsönhatások az oligopeptidekben (e)  
KeMoMo-QSAR 4. miniszimpózium (*Szeged, Magyaro.* 2005)
7. Structure analysis of oligopeptides by means of quantum chemical calculations (p)  
**Z Varga**, A Kovács  
13th Conference on Current Trends in Computational Chemistry (*Jackson, Mississippi, USA* 2004)
8. Oligopeptidek szerkezetének analízise kvantumkémiai számítások segítségével (e)  
**Z Varga**, A Kovács  
Tudományos Diákköri Konferencia (*Budapest, Magyaro.* 2003)