



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar

Oláh György Doktori Iskola

**Hatékony kvantumkémiai módszerek
nagy molekulák gerjesztett állapotainak
számításához**

Tézisfüzet

Mester Dávid

Témavezető: Prof. Kállay Mihály

Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

MTA-BME Lendület Kvantumkémiai Kutatócsoport

2019

1. Bevezetés

A kvantumkémiai számítások során a Schrödinger-egyenlet minél pontosabb és gyorsabb numerikus megoldására törekszünk. Az elmúlt évtizeddel bezárólag a fejlesztések elsődleges célja az egyre pontosabb módszerek kidolgozása és a bonyolult egyenletek implementálása volt. Sikeresen fejlesztettek ki olyan nagy pontosságú kvantumkémiai módszereket, amelyekkel a molekulák kísérletileg is mérhető fizikai és kémiai tulajdonságainak elméleti számítása lehetséges. Az így kapott eredmények pontossága összemérhető a mérési eredmények pontosságával, néhány esetben meg is haladják azt.

Azonban a több milliárd ismeretlen változót tartalmazó egyenletrendszerek megoldása rendkívül számításigényes, emiatt a legpontosabb módszerek alkalmazhatóságának felső határa csupán néhány atom. Ennek megfelelően az elmúlt években a módszerfejlesztések elsődleges célja a már meglévő, megbízható módszerek számítási idejének csökkentése, illetve az elméletek módosításával vagy kombinálásával új eljárások kifejlesztése.

Külső perturbáció, jellemzően elektromágneses sugárzás hatására a molekula gerjesztett állapotba kerülhet. Számos, napjainkban aktívan kutatott jelenség kapcsolódik az elektronszerkezet gerjesztett állapotához, mint például a fotokróm anyagok viselkedése, a fény által inicializált reakciók lejátszódása, illetve az energiaátadás és -tárolás. A gerjesztett állapotú tulajdonságok vizsgálata elméleti módszerekkel mára a kutatások rutinszerű eszközévé vált többek között a spektroszkópia, az analitika és a biokémia területén, ahol gyakran kiterjedt rendszereket vizsgálunk. Szerencsére az alap- és a gerjesztett állapotú energiák hibái sok esetben kiejtik egymást, így már alacsonyabb számításigényű módszerekkel is megfelelően pontos eredményeket kaphatunk gerjesztett állapotú tulajdonságokra. Azonban az alkalmazhatóság felső határa még ezen alacsony skálázódású módszerek esetén is könnyen elérhető.

A célunk olyan megbízható és pontos módszerek kidolgozása, amelyekkel ez a felső határ a jelenlegi többszörösére kiterjeszhető, és számítások végezhetőek akkora rendszerekre, amelyek jelenleg számításigényük miatt nem kezelhetőek.

2. Áttekintés

Napjainkban az időfüggő sűrűségfunkcionál elmélet (TDDFT) a leggyakrabban alkalmazott módszer molekuláris rendszerek időfüggő tulajdonságainak vizsgálatára. Ilyen tulajdonság a gerjesztési spektrum, a polarizálhatóság, illetve egyéb kiroptikai tulajdonságok. A TDDFT a sűrűségfunkcionál elméletből (DFT) vezethető le a lineáris válaszelmélet segítségével. Amennyiben az alapállapotnak a Hartree–Fock (HF) megoldást választjuk, a TDDFT módszerrel megegyező eljárás az időfüggő Hartree–Fock (TDHF) elmélet. Másik kapcsolódó HF-alapú gerjesztett állapotú módszer az egy-szeres konfigurációs kölcsönhatás (CIS) eljárás. Ismert, hogy ezen módszerek közül hasonló számításigényük ellenére a legpontosabb eredményeket, legalábbis vegyérték gerjesztésekre, a TDDFT számítások szolgáltatják a dinamikus elektronkorreláció figyelembe vétele miatt.

A számításigény a CIS, TDHF és TDDFT módszerek esetén, amíg a DFT funkcionál tartalmaz HF kicserélődési járulékot, a rendszer méretének negyedik hatványával skálázódik. Ennek megfelelően az alkalmazhatóság felső határa, amennyiben közelítéseket nem alkalmazunk, hozzávetőlegesen 150 atom. Mivel a fontos kémiai rendszerek mérete sok esetben meghaladja ezt a határt, számos közelítést dolgoztak ki az elmúlt két évtizedben a számításokhoz szükséges idő és erőforrás csökkentésére. Ezen közelítéseknek több előnyös tulajdonsága van, azonban számos hiányossággal is rendelkeznek. Például, néhány esetén szükséges, hogy a felhasználó határozza meg a molekula egyes alrendszereit, így az eljárás nem alkalmazható automatikusan. Több módszer nem használható hibrid funkcionálok esetén, míg más közelítések csak periodikus rendszerek esetén alkalmazhatók. Továbbá, pontos eredmény a módszer nagy hibája miatt nem várható el, vagy az eredeti eljárással összehasonlítva nem növelhető jelentősen a vizsgálható rendszerek mérete. A hibrid funkcionált tartalmazó TDDFT módszerek gyorsítására a két legjelentősebb módszert Neese¹, illetve Kjærgaard² és

¹T. Petrenko, S. Kossmann, and F. Neese, *J. Chem. Phys.*, **2011**, 134:054116

²C. Kumar *et al.*, *Int. J. Quantum Chem.*, **2018**, 118:e25639

munkatársai dolgozták ki. Mindkét eljárás a sebességmeghatározó egzakt kicserélődési járulék számításához szükséges időt csökkenti és a járulék számításához szükséges idő aszimptotikusan lineárisan skálázódik a rendszer méretével.

Míg a hibrid TDDFT gerjesztési energiák és spektrális tulajdonságok meglehetősen pontosak vegyérték gerjesztések esetén, Rydberg és töltésátmenettel járó gerjesztések esetén, illetve kiterjedt π -elektronos rendszereknél már kevésbé kielégítőek. Ezen problémák mellett a TDDFT módszerek csak dominánsan egyszeres gerjesztéseket tartalmazó átmeneteket képesek megfelelően leírni.

Az alapállapotú DFT funkcionálok teljesítménye jelentősen javítható, amennyiben azokat hullámfüggvény-alapú módszerekkel kombináljuk. Manapság a legelterjedtebben alkalmazott kevert eljárások a kétszeres hibrid (DH) funkcionálok. Ezen módszerek használata jelenleg meglehetősen új terület gerjesztett állapotú számítások esetén. Az első kidolgozott DH funkcionál Grimme és Neese³ nevéhez fűződik. Módszerükben, mint minden további gerjesztett állapotú DH eljárásban, egy TDDFT számítást hajtanak végre, majd ezt követően a kétszeres gerjesztések hatását a gerjesztési energiához perturbatív módon adják hozzá a CIS(D) módszer másodrendű (D) korrekciójával a TDDFT gerjesztési amplitúdókat felhasználva. Az átmeneti momentumokat az általános, TDDFT módszerekre megadott összefüggéssel számítják és másodrendű korrekciót nem tartalmaz. További jelentős fejlesztés Schwabe és Goerigk⁴ munkája, amelyben sikeresen alkalmazták a spin skálázást DH TDDFT módszerekre.

Az egyik legpontosabb elektronszerkezet-számító elmélet a coupled-cluster (CC) módszer. A hierarchikus felépítésű CC módszerek a hullámfüggvény exponenciális parametrizációjának köszönhetően az elektronkorreláció tetszőleges pontosságú kezelését teszik lehetővé. A CC módszerek is a lineáris válaszelmélet segítségével általánosíthatóak gerjesztett állapotokra. A legegyszerűbb CC modell, a közelítő másodrendű CC (CC2) eljárás megfelelő pontosságú eredményeket szolgáltat gerjesztési energiákra és átmeneti momentumokra, legalábbis vegyérték gerjesztésekre, magasabb

³S. Grimme and F. Neese, *J. Chem. Phys.*, **2007**, 127:154116

⁴T. Schwabe and L. Goerigk, *J. Chem. Theory Comput.*, **2017**, 13:4307

rendű módszerekkel összehasonlítva. Mindezek mellett, a gerjesztett állapotú tulajdonságok számítására alkalmas elméletek közül az algebrai diagram felépítő (ADC) eljárás az egyik legígéretesebb. A hermitikus és méretkonzisztens módszert viszonylag könnyű implementálni. A másodrendű ADC [ADC(2)] módszer gyakorlatilag a CC2 eljárással megegyező pontosságú, illetve mind a két módszer a rendszer méretének ötödik hatványával skálázódik.

A kiváló numerikus eredmények ellenére a CC és ADC módszerek alkalmazhatósága korlátozott a meredek skálázódásuk miatt. Alternatív megoldás lehet a TDDFT módszerek használata helyett a CC2 és ADC(2) eljárások számításigényének csökkentése. Ezen hullámfüggvény-alapú módszerek konzisztensen pontosabb eredményeket szolgáltatnak, mint az általános TDDFT módszerek. A számítások gyorsítására elterjedt közelítés a sűrűségillesztés (DF) eljárás, amelyben a négyindexes kételektron tasztítási integrálokat közelítjük két- és háromindexes mennyiségek szorzatával. További hatékony módszerek dolgozhatóak ki, amennyiben meghatározzuk a gerjesztésben fontos szerepet játszó molekulapályákat (MO). Az egyik legelterjedtebb eljárás a természetes pálya (NO) közelítés, amely során az MO-k tere, amelyben az egyenleteket megoldjuk, hatékonyan csökkenthető. Az NO közelítésnél egy egyrészesceke sűrűségmátrixot építünk fel egy alacsonyabb rendű hullámfüggvény felhasználásával. A kapott mátrixot diagonalizáljuk, és a sajátértékek alapján az egyes pályák sorba rendezhetőek és kiválaszthatóak fontosságuk szerint. Még hatékonyabb módszerek fejleszthetőek, amennyiben kihasználjuk a molekulapályák lokalitásából származó előnyt. Ebben az esetben nem csak a számításokhoz szükséges idő, és így a változók száma, de az egyes módszerek skálázódása is csökkenthető. Ezen kísérletek közül az egyik legjelentősebb a Baudin and Kristensen⁵ által kifejlesztett eljárás, amelyben figyelemre méltó eredményeket érték el az NO és a lokális eljárások kombinálásával. Fontos összefoglaló tanulmányt jelentettek meg nemrégiben a csökkentett számításigényű és csökkentett skálázódású módszerekről Crawford, Kumar és munkatársai⁶.

⁵P. Baudin and K. Kristensen, *J. Chem. Phys.*, **2017**, 146:214114

⁶T. D. Crawford *et al.*, *WIREs Comput. Mol. Sci.*, **2019**, e1406

3. Eredmények

A disszertációban elsőként egy csökkentett számításigényű CC2 és ADC(2) módszer implementációját mutatjuk be, amelyben az NO és természetes kiegészítő függvény (NAF) közelítéseket alkalmazzuk. Az alapállapotú számításokhoz használt NO-k előállítására egyértelmű választás a másodrendű Møller–Plesset (MP2) sűrűségmátrix. Azonban a gerjesztett állapotú számításokhoz a megfelelő hullámfüggvény kiválasztása már kevésbé triviális. A CIS(D) módszer megfelelő választásnak tűnhet, hiszen az eljárás az MP2 módszer gerjesztett állapotú általánosításának tekinthető, illetve azonos mennyiségű korrelációt tartalmaz a gerjesztett állapotú számításokhoz, mint az MP2 módszer az alapállapotra. Annak érdekében, hogy az alap- és gerjesztett állapotú egyenleteket azonos bázisban oldjuk meg, egy darab, állapotspecifikus, úgynevezett „állapotátlagolt” sűrűségmátrixot használunk az NO-k számításához, minden egyes gerjesztett állapotra. Ennek megfelelően egyszerűen az MP2 és a CIS(D) sűrűségek átlagát vesszük. A változók száma tovább csökkenthető a NAF közelítés alkalmazásával, amely nagyon hasonló az NO közelítéshez, azonban fizikai vagy kémiai megfontolásokat nem tartalmaz. Számos lehetőséget megvizsgálunk, például, hogy az algoritmus mely lépésénél érdemes a NAF-okat számítani, illetve hogy az integrálista mely tömbjét alkalmazzuk a NAF-ok előállításához. Az egyes közelítésekből származó hibák vizsgálatára kiterjedt összehasonlító számításokat végzünk olyan rendszerek felhasználásával, amelyek minden fontosabb típusú gerjesztést tartalmaznak, illetve konzervatív küszöbértékeket határozunk meg a pályák elhanyagolásához, amelyekkel a kapott hibák egy nagyságrenddel kisebbek, mint a módszerek eredeti hibája. Összességében a számításokban egy nagyságrendnyi gyorsulás érhető el, miközben a gerjesztési energiák átlagos abszolút hibája 0.02 eV a CC2 és ADC(2) módszer esetén is, míg az oszcillátor erősségek hibája 0.001 az ADC(2) módszer esetén. A kidolgozott módszernek köszönhetően a számításokhoz szükséges műveletigény és tárolókapacitás jelentősen csökkenthető, így pontos számítások végezhetőek akár száz atomot meghaladó rendszerek vizsgálatára tripla- ζ minőségű bázis alkalmazásával.

Ezt követően a számításigény további redukálása érdekében csökkentett skálázódású algoritmusokat mutatunk be, amelyekben kihasználjuk a molekulapályák lokalitását. Elsőként egy olyan közelítést dolgozunk ki, amellyel hatékonyan csökkenthető a CIS és TDDFT, illetve a hozzájuk kapcsolódó TDHF és TDA-TDDFT módszerekhez szükséges számítási idő. Az eljárás az alapállapotú Hartree–Fock számításokhoz kifejlesztett lokális sűrűségillesztés közelítés adaptációja gerjesztett állapotú számításokhoz, amellyel a negyedik hatvány szerinti skálázódás köbösre csökkenthető. Részletesen bemutatunk egy algoritmust az egyes betöltött pályákhoz létrehozott lokális alter előállításához. Természetesen a készleteknek tartalmazniuk kell azon kiegészítő függvényeket, amelyek azokon az atomokon helyezkednek el, amelyeken az adott lokalizált MO található. Az atomok meghatározásához minden egyes MO-ra kiszámítjuk a Löwdin-féle atomtöltéseket, és amennyiben egy atom töltése nagyobb, mint egy előre meghatározott küszöbérték, az adott atomot kiválasztjuk a készletbe. Ezt követően az alteret kiegészítjük további atomokkal a gerjesztésre vonatkozó információk alapján. Ennek érdekében analizáljuk a megoldásvektort, amelyet az atompálya- és lokalizált MO-bázisba transzformálunk. A vektor elemeit fontosságuk szerint sorba rendezzük, és a legfontosabb elemeket addig választjuk ki, míg egy előre meghatározott küszöbértéket el nem érünk. Amennyiben egy elemet kiválasztunk, az adott atompályához tartozó atommal kiegészítjük a lokális készletet. Az összehasonlító számításaink eredménye alapján megállapíthatjuk, hogy átlagosan 2–4-szeres sebességgyorsulás érhető el már 50 és 100 atom közötti nagyságú rendszerekre is, míg a gerjesztési energiákban és oszcillátor erősségekben kapott hiba elhanyagolható. Az átlagos hiba gerjesztési energiák esetén 1 meV, míg oszcillátor erősségek esetén 0.001, miközben a maximális hiba egyetlen esetben sem haladja meg a 5 meV-et, illetve a 0.01-et. Nagyobb molekulákat tartalmazó rendszerek esetén még jelentősebb sebességgyorsulás várható.

Ezután bemutatunk egy keretrendszer gerjesztett állapotú korrelációs módszerek csökkentett skálázódású implementációjához. A kifejlesztett algoritmussal lehetséges olyan gerjesztésfüggő lokális alterek létrehozása, amelyek minden fontos MO-t tartalmaznak a gerjesztés, illetve az elektronkorreláció szempontjából is. A módszer alap-

feltételezése, hogy a gerjesztett állapotú hullámfüggvényhez csak a molekulapályák csekély hányada ad jelentős járulékot, illetve ezen pályák száma a molekula méretével nem növekszik. Annak érdekében, hogy meghatározzuk a gerjesztésben részt vevő MO-kat, elsőként a CIS sajátérték problémát oldjuk meg, majd a megoldást a lokális MO- és projektált atompálya bázisba transzformáljuk. A kiválasztott legfontosabb pályákat összegyűjtjük az altérbe, majd ezt követően az alteret kiegészítjük a kiválasztott pályák környezetével, hiszen a CIS hullámfüggvény akár pontatlan közelítése is lehet az adott állapotnak. Az így kapott végső altér feltételezhetően minden fontos pályát tartalmaz a gerjesztés pontos leírásához. A tömör altér mérete tovább csökkenthető a korábbiakban bemutatott NO és NAF közelítések alkalmazásával. További módszertani fejlesztéseket is bemutatunk a sűrűségmátrixok előállításához. Az ADC(2) szinten végzett összehasonlító számítások eredményei alapján megállapíthatjuk, hogy jelentős sebességgyorsulás érhető el már 100 atomnál kisebb rendszerek esetén is, míg a közelítés hibája nagyon alacsony. A kidolgozott csökkentett skálázódású eljárással lehetőségünk nyílik elektronkorrelációt tartalmazó gerjesztett állapotú számításokat végezni 400 atomot meghaladó rendszerekre diffúz függvényekkel kiegészített tripla- ζ minőségű báziskészletek alkalmazásával.

Végezetül egy újfajta TDDFT-ADC(2) kevert kétszeres hibrid módszert javasolunk molekuláris rendszeres spektrális tulajdonságainak számítására. Az új módszer a meglévő DH eljárások kiterjesztése, amelyben a CIS(D) perturbatív kétszeres gerjesztéseket tartalmazó korrekcióját egy iteratív módon kezelt, ADC(2)-alapú másodrendű járulékra cseréljük. Hasonlóan a CIS(D) módszerhez, az ADC(2) is az MP2 elmélet gerjesztett állapotú általánosításának tekinthető, így megalapozottnak tűnhet az ADC(2) módszer alkalmazása kevert DFT-hullámfüggvény alapú eljárások kidolgozásához gerjesztett állapotú számításokhoz. A kétszeres gerjesztések iteratív módon történő kezeléséből származó előny kétszeres. Először is, a gerjesztési energiákat vizsgálva az ADC(2) bár kismértékben, de konzisztensen jobb eredményeket szolgáltat. Így a gerjesztési energiákban javulás várható, különösen olyan gerjesztések esetén, amelyekben a kétszeres gerjesztések domináns súllyal szerepelnek. Másodsor, szemben

a CIS(D)-alapú funkcionálokkal, az általunk javasolt módszer az átmeneti momentumok magasabb szinten történő kezelését teszi lehetővé, amely jelentősen javíthatja a spektrális tulajdonságok pontosságát. Az elvégzett számítások alapján kijelenthetjük, hogy az ADC(2)-alapú módszer bár a Rydberg állapotok pontosságát nem növeli, de konzisztensen javítja a vegyérték gerjesztésekhez tartozó energiát, különösen a kétszeres gerjesztéseket tartalmazó átmenetek esetén. Az oszcillátor erősségekre kapott eredmények jelentősen javulnak a CIS(D)-alapú módszerekhez képest. Az egyes eljárások számításigényét részletesen összehasonlítjuk, és megállapítjuk, hogy az általunk kidolgozott módszer kifejezetten versenyképes, különösen ha a NAF közelítést is alkalmazzuk. A javasolt negyedik hatvány szerint skálázódó módszer átlagos abszolút hibája hozzávetőlegesen 0.15 eV gerjesztési energiák számításakor, és jobb eredményeket szolgáltat nemcsak a létező DH módszerekhez és ADC(2), illetve annak spin skálázott variánsaihoz képest, de még a számításigényesebb CC2 módszerhez képest is.

4. Alkalmazási lehetőségek

A kifejlesztett közelítések és implementált módszerek a tudományos közösség számára ingyenesen, nyílt forráskód formájában az MRCC programcsomagban érhetőek el. Az algoritmusok gerjesztési energiák, abszorpció- és cirkuláris dikroizmus spektrumok gyors és pontos számítására alkalmazhatóak. Ezen felül vizsgálható a gerjesztés következtében lejátszódó töltésátrendeződés, illetve azonosíthatóak a gerjesztésben dominánsan részt vevő molekulapályák. Ezek az eredmények hatással lehetnek a szerves-, biomolekuláris- és fotokémia területén végzett kutatásokra. Számításokkal bizonyítottuk, hogy az új eljárások lehetővé teszik 400 atomnál nagyobb rendszerek kezelését megbízható bázis alkalmazásával. Ennek megfelelően olyan új anyagok tervezhetőek elméleti módszerek alkalmazásával, amelyek eddig nem voltak kezelhetőek méretük miatt. Végezetül, a kialakított programkörnyezet meglehetősen általános és rugalmas, ennek megfelelően kisebb módosításokkal felhasználható számos új kvantumkémiai eljárás fejlesztéséhez.

5. Tézisek

1. Bemutattam a NAF közelítés hatékonyságát gerjesztett állapotú CC2, ADC(2) és kétszeres hibrid TDDFT számítások esetén. Bizonyítottam, hogy a kiegészítő bázis mérete jelentős hiba nélkül a felére csökkenthető függetlenül a vizsgált rendszer tulajdonságaitól [1,2,5].
2. Javasoltam egy úgynevezett állapotátlagolt sűrűségmátrixot, amelyből megfelelő minőségű virtuális NO-k állíthatóak elő gerjesztett állapotú CC2 és ADC(2) számításokhoz. Bizonyítottam, hogy a virtuális tér mérete a felére csökkenthető és az eljárás kombinálható a NAF közelítéssel. A végső algoritmussal átlagosan egy nagyságrendű sebességgyorsulás érhető el, míg a számított gerjesztési energiák és oszcillátor erősségek hibája mérsékelt [1,2].
3. Kiterjesztettem a lokális sűrűségillesztés közelítést CIS, TDHF és (TDA-)TDDFT módszerekre. Bevezettem egy algoritmust a kiegészítő függvényeket tartalmazó lokális alterek előállítására gerjesztett állapotú számításokhoz. A kifejlesztett közelítés gyakorlatilag hibamentes és köbösen skálázódik a rendszer méretével [3].
4. Kifejlesztettem egy algoritmust a gerjesztésfüggő lokális alterek előállítására gerjesztett állapotú korrelációs módszerekhez. Az eljárást hatékonyan kombináltam az NO és NAF közelítésekkel. Ennek köszönhetően elsőként nyílt lehetőségünk számításokat végezni 400 atomnál nagyobb rendszerekre diffúz függvényeket tartalmazó tripla-zéta minőségű bázis alkalmazásával [4].
5. Kidolgoztam egy ADC(2)-alapú kétszeres hibrid TDDFT módszert, amellyel a kétszeres gerjesztések hatását iteratív módon kezeljük. Bizonyítottam, hogy a javasolt, negyedik hatvány szerint skálázódó modell nemcsak a jelenlegi CIS(D)-alapú kétszeres hibrid módszereknél és az ADC(2) variánsoknál, de még a drágább coupled-cluster módszereknél is jobb eredményt szolgáltatathat [5].

6. Közlemények és előadások

6.1. A disszertációhoz kapcsolódó közlemények

1. Reduced-cost linear-response CC2 method based on natural orbitals and natural auxiliary functions, D. Mester, P. R. Nagy, and M. Kállay, *Journal of Chemical Physics*, **2017**, 146:194102
IF: 2.843, független hivatkozások: 8, társszerzői arány: 100%
2. Reduced-cost second-order algebraic-diagrammatic construction method for excitation energies and transition moments, D. Mester, P. R. Nagy, and M. Kállay, *Journal of Chemical Physics*, **2018**, 148:094111
IF: 2.997, független hivatkozások: 4, társszerzői arány: 100%
3. Reduced-scaling approach for configuration interaction singles and time-dependent density functional theory calculations using hybrid functionals, D. Mester and M. Kállay, *Journal Chemical Theory and Computation*, **2019**, 15:1690
IF: 5.313, független hivatkozások: 0, társszerzői arány: 100%
4. Combined density functional and algebraic-diagrammatic construction approach for accurate excitation energies and transition moments, D. Mester and M. Kállay, *Journal Chemical Theory and Computation*, **2019**, 15:4440
IF: 5.313, független hivatkozások: 0, társszerzői arány: 100%
5. Reduced-scaling correlation methods for the excited states of large molecules: implementation and benchmarks for the second-order algebraic-diagrammatic construction approach, D. Mester, P. R. Nagy, and M. Kállay, *Journal Chemical Theory and Computation*, **2019**, 15:6111
IF: 5.313, független hivatkozások: 0, társszerzői arány: 100%

6.2. Egyéb közlemények

- Unconventional bond functions for quantum chemical calculations, D. Mester, J. Csontos, and M. Kállay,
Theoretical Chemistry Accounts, **2015**, 134:74
IF: 1.806, független hivatkozások: 6
- A study on the optical resolution of 1-isopropyl-3-methyl-3-phospholene 1-oxide and its use in the synthesis of borane and platinum complexes, P. Bagi, K. Juhász, I. Tímári, K. E. Kövér, D. Mester, M. Kállay, M. Kubinyi, T. Szilvási, P. Pongrácz, L. Kollár, K. Karaghiosoff, M. Czugler, L. Drahos, E. Fogassy, and G. Keglevich,
Journal of Organometallic Chemistry, **2015**, 797:140
IF: 2.336, független hivatkozások: 2
- Adsorption of an active molecule on the surface of halloysite for controlled release application: interaction, orientation, consequence, J. Hári, P. Polyák, D. Mester, M. Micusik, M. Omastova, M. Kállay, and B. Pukánszky,
Applied Clay Science, **2016**, 132-133:167
IF: 3.101, független hivatkozások: 0
- Uracil-linked hydroxyflavone probe for the recognition of ATP, M. Bojtár, P. Z. Janzsó-Berend, D. Mester, D. Hessz, M. Kállay, M. Kubinyi, and I. Bitter,
Beilstein Journal of Organic Chemistry, **2018**, 14:747
IF: 2.595, független hivatkozások: 2
- Hydrogen bonding effects on the fluorescence properties of 4'-diethylamino-3-hydroxyflavone in water and water-acetone mixtures, D. Hessz, M. Bojtár, D. Mester, Z. Szakács, I. Bitter, M. Kállay, and M. Kubinyi,
Spectrochimica Acta Part A, **2018**, 203:96
IF: 2.931, független hivatkozások: 1

6.3. Előadások

- **Poszter: A Symposium in Honour of Jeppe Olsen on the Occasion of his 60th Birthday**, 2016, Oslo, Norvégia
Reduced-cost LR-CC2 method based on natural orbitals, D. Mester, P. R. Nagy, and M. Kállay
- **Szóbeli előadás: MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottsági Ülés**, 2017, Budapest, Magyarország
Lokális korrelációs módszerek fejlesztése gerjesztett állapotokra, Mester D., Nagy P. R. és Kállay M.
- **Poszter: 16th International Congress of Quantum Chemistry**, 2018, Menton, Franciaország
Reduced-cost ADC(2) method for excitation energies and transition moments, D. Mester, P. R. Nagy, and M. Kállay
- **Poszter: 10th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics**, 2019, Tromsø, Norvégia
Reduced-scaling correlation methods for the excited states of large molecules, D. Mester, P. R. Nagy, and M. Kállay
- **Szóbeli előadás: MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsági Ülés**, 2019, Mátrafüred, Hungary
Hatékony kvantumkémiai módszerek nagy molekulák gerjesztett állapotainak számításához, Mester D., Nagy P. R. és Kállay M.