

Válasz Dr. Legeza Örs, az MTA doktora opponensi véleményében megfogalmazott kérdéseire

Köszönöm opponensemnek a dolgozat részletes elemzését, a megjegyzéseket és a kiszűrt hibákat. A bírálatban feltett kérdésekre az alábbiakban válaszolok.

Megjegyzés

A sűrűségmátrixos renormálásicsoport (DMRG) algoritmus kidolgozása S. R. White nevéhez fűződik (Phys. Rev Lett, 69, 2863 – 2866, 1992) és annak kvantumkémiaiában való első alkalmazása szintúgy (S. R. White and R. Martin J. Chem. Phys. 110, 4127 – 4130, 1999), így ezen munkák meghivatkozása lenne ildomos a jövőre nézve.

Válasz

Köszönöm a helyesbítést. Valóban nem szép, hogy nem az eredeti referenciához nyúltam vissza. A sűrűségmátrix renormálási csoport (DMRG) alapú algoritmus megjelenését követően több elméleti kémiai kutatócsoport is belevágott a technika adta lehetőségek felderítésébe, DMRG alapú kvantumkémiai program fejlesztésébe. Az idézett közlemény ezen munkák között sem az első, hanem a területen aktív kutatócsoportok egyikének egy fontos közleménye. Mentségemre szóljon, hogy a hivatkozott műben S. R. White említett, 1992-es Phys. Rev. Lett. publikációja 1-es sorszámon szerepel.

Megjegyzés

A 6. táblázat utolsó két oszlopa tartalmazza a hibákra vonatkozó információkat. Hasznos lehetne a jövőben a hibák esetén az ún. Fidelity-hiba megadása is, ami a hullámfüggvény és a referencia hullámfüggvény átfedésének az egységtől való eltérését mutatja.

Válasz

A kérdés jogos. Valós elemű vektorok esetén ez a mennyiség a táblázatból lényegében kiolvasható. Az utolsó oszlopban feltüntetett értékek négyzetének felét kell venni, hiszen

$$\|\varphi(n) - \psi_{\text{full CI}}\|^2 = \langle \varphi(n) - \psi_{\text{full CI}} | \varphi(n) - \psi_{\text{full CI}} \rangle = 2 - \left(\langle \varphi(n) | \psi_{\text{full CI}} \rangle + \langle \psi_{\text{full CI}} | \varphi(n) \rangle \right),$$

tekintetbe véve, hogy $\varphi(n)$ és $\psi_{\text{full CI}}$ normált.

Kérdés

1. A 64. oldalon a szöveg és ábra kapcsolatából nem egyértelmű, hogy miért kell pivotot váltani? Ki tudná fejteni a szerző ezt egy kicsit részletesebben? Hogyan függ ez össze az ábrán látható töréssel?

Válasz

Ezen a ponton a 2.1. ill. 2.2. fejezetben bevezetett pMCPT és uMCPT módszerekkel kapott numerikus eredmények bemutatása és elemzése zajlik. Arról van szó, hogy a referencia függvény determináns alapú kifejtésében (38. oldal (84) képlet) szerepel egy kitüntetett determináns, a pivot. Ez mindkét említett MCPT korrekcióban megjelenik. A sor tagjai közül elvben bármelyik játszhatja a pivot szerepét, a gyakorlatban azonban a referenci függvényben legnagyobb abszolút értékű koefficiens adó determinánst választjuk pivotnak. Ez a szerep, a

legsúlyosabb determináns szerepe, változik a LiH molekula alap- és gerjesztett állapotának potenciális energia felülete mentén. A $2\sigma^2$ aktív pálya betöltéssel rendelkező determináns például kb. 3.5 \AA kötéshosszig az alapállapot legsúlyosabb determinánsa, míg 4.0 \AA környékén az első gerjesztett szinglet állapotban jelenik meg legnagyobb súllyal. Ebből fakadóan változik, a pivot a pMCPT és uMCPT módszerekben. A 64. oldalon szereplő ábrán két váltás is történik.

A pivot váltás a potenciális energia felületeken törést okoz, hiszen a számítás "bemenő paraméterei" nem folytonosan változnak ebben a pontban. Az említett ábrán az uMCPT módszerekkel kapott görbén feltűnő a folytonosság hiánya. A jelenség a pMCPT módszerben is fellép, de kisebb mértékű, az 5. ábra skáláján nem szembeötlő.

A görbéken mutatkozó törés elkerülhető, ha a vizsgált folyamatban végig ugyanazt a pivot determinánst használjuk, ilyenkor azonban a közelítés feltűnően rosszabb azon a tartományon, ahol a pivot relatíve kis súllyal járul hozzá a referencia függvényhez.

Egy másik mód az MCPT-vel számolt potenciális energia felületek folytonosságának biztosítására a 2.3. fejezetben bevezetett átlagolás. Ehhez tartozó numerikus példát a 66. oldalon látunk, a 7. és 8. ábrán lila színnel húzott uMCPT görbéket érdemes összevetni.

Kérdés

2. A 77. oldalon a szerző azt írja „Ezek általános tétel hiányában is sokszor alsó becslést adnak.” Ez az állítás milyen elemzésből adódik, miért igaz? Tudna a szerző erre példát adni?

Válasz

Ez a kijelentés a bracketing függvény (72. oldal, (141) képlet) tagjaira vonatkozik, melyet a rezolvens 75. oldal (146) sorfejtésével származtatunk, a partíciót a 76. oldal, (147) képlet szerint meghatározva. Az idézett mondat alapja kis molekulákon végzett numerikus vizsgálat. A tapasztalat nem volt meglepő annak fényében, hogy a referenciára merőleges térben a (147) képlet szerinti nulladrend választás Epstein-Nesbet partíciónak felel meg, amely gyakran eredményez alternáló előjelű tagokból álló PT sort[1].

Ugyanakkor fontos hangsúlyozni, hogy a kijelentés nem általános érvényű, a dolgozatban mutatott numerikus eredmények között is van ellenpélda. Ilyenek a csillaggal jelölt számok a 83. és 84. oldal, 6. és 7. táblázatának negyedik és ötödik oszlopában.

Kérdés

3. A 81. oldalon a szerző azt írja „a módszer pontosságára gyakorolt hatása várhatóan elhanyagolható.” Értelemszerűen a szerző arra utal, hogy a bal és jobb oldali reprezentáció nem szimmetrikus, de mégis a bal oldalon számoltat alkalmazzák a jobb oldalon is a számítási igény csökkentése érdekében. Miért igaz ez az állítás? Készült erre vonatkozóan részletes és pontos hibaanalízis?

Válasz

Ezt a megállapítást is numerikus stúdium támasztotta alá. Képlet szintű analízist nem végeztünk a módszer kidolgozása idején, de a vonatkozó publikációban[2] közölt formulákra támaszkodva ez utólag is megtehető. Az összehasonlítható kifejezések

$$T_{\text{ns}} = \langle \Phi | \hat{G}^{(0)} \hat{W} \hat{G}^{(0)} \hat{W} \hat{G}^{(0)} | \Phi \rangle$$

és

$$T_{\text{s}} = \langle \Phi | \hat{G}^{(0)\dagger} \hat{W}^\dagger \hat{G}^{(0)} \hat{W} \hat{G}^{(0)} | \Phi \rangle .$$

A [2] publikáció II. C. fejezetét véve alapul, a referencia függvény egzakt függvénytől való eltérését mérő paraméter, μ vezető rendjére szorítkozunk. Az idézett publikáció jelöléseit alkalmazva

$$T_{\text{ns}} = \mu^2 \sum_{i=1}^N \langle \tilde{\vartheta} | \xi_i - \psi_0 z_i \rangle \frac{\langle \xi_i - \frac{z_i}{z_0} \xi_0 | \vartheta \rangle}{p_i - \varepsilon} + \mathcal{O}(\mu^3),$$

$$T_s = \mu^2 \sum_{i=1}^N \langle \vartheta | \xi_i - \psi_0 z_i \rangle \frac{\langle \xi_i - \frac{z_i}{z_0} \xi_0 | \vartheta \rangle}{p_i - \varepsilon} + \mathcal{O}(\mu^3).$$

Látható, hogy az eltérés a $|\xi_i - \psi_0 z_i\rangle$ függvénnyel képezett skaláris szorzatban van, ami egyik esetben a $\langle \tilde{\vartheta} |$, másik esetben a $\langle \vartheta |$ függvénnyel számolandó. Ezeket részletesebben kiírva kapjuk

$$\langle \tilde{\vartheta} | \xi_i - \psi_0 z_i \rangle = \frac{1}{E_0 - \varepsilon} \left(\langle \chi | \hat{H} - E_0 | \xi_i \rangle - \sum_{j=1}^N \frac{h_j}{p_j - \varepsilon} \langle \xi_j - \frac{z_j}{z_0} \xi_0 | \hat{H} - \varepsilon | \xi_i \rangle \right), \quad (1)$$

$$\langle \vartheta | \xi_i - \psi_0 z_i \rangle = \frac{1}{E_0 - \varepsilon} \left(\langle \chi | \hat{H} - E_0 | \xi_i \rangle - \sum_{j=1}^N \frac{\tilde{h}_j}{p_j - \varepsilon} \langle \xi_j - z_j \psi_0 | \hat{H} - \varepsilon | \xi_i \rangle \right). \quad (2)$$

Tekintve, hogy $\tilde{h}_j = h_j^* - \frac{z_j}{z_0} \langle \xi_0 | \hat{H} - E_0 | \chi \rangle$, valós esetben írhatjuk

$$\langle \vartheta | \xi_i - \psi_0 z_i \rangle = \langle \tilde{\vartheta} | \xi_i - \psi_0 z_i \rangle - \frac{1}{E_0 - \varepsilon} \sum_{j=1}^N \frac{z_j}{p_j - \varepsilon} \left\{ h_j \langle \frac{\xi_0}{z_0} - \psi_0 | \hat{H} - \varepsilon | \xi_i \rangle - \langle \frac{\xi_0}{z_0} | \hat{H} - \varepsilon | \chi \rangle \langle \xi_j - z_j \psi_0 | \hat{H} - \varepsilon | \xi_i \rangle \right\}.$$

A két mátrixelem eltérését a fenti második sor adja. A cifra zárójelben álló mindkét tag eltűnik szimmetrikus esetben, u.i. ξ_0/z_0 a ψ_0 reciprok vektora. Így szimmetrikus esetben az első tag nulla, a második tagban pedig, ξ_0/z_0 helyett ψ_0 -t véve a $\langle \psi_0 | \hat{H} - \varepsilon | \chi \rangle$ integrál nulla volta miatt kapunk nullát. Az eltérés mértéke tehát a $(\hat{H} - \varepsilon)$ operátor egzakt megoldással, ψ_0 -lal ill. annak reciprok vektorával számolt mátrixelemei eltérésén múlik. Ezek a szimmetria sértést mérő integrálok egy másodrendű PT korrekció szerkezetű tagban jelennek meg, hasonlóan az (1) ill. (2) kifejezések kerek zárójelében álló második taghoz.

Ez az eredmény annyiban szolgáltatathat alapot T_{ns} és T_s eltérésére vonatkozóan, hogy az ezekhez járulékot adó $\langle \vartheta | \xi_i - \psi_0 z_i \rangle$ és $\langle \tilde{\vartheta} | \xi_i - \psi_0 z_i \rangle$ integrálok vezető tagja nem különbözik, c.f. (1) ill. (2). A két integrál eltérése egy másodrendű PT szerkezetű taggal fejezhető ki, ahol egy "igazi" kölcsönhatási mátrixelem helyett a szimmetria sértéssel arányos mátrixelem szerepel. Ezt nemcsak a vezető taggal, de az "igazi" kölcsönhatási mátrixelemeket tartalmazó korrekciós taggal összevetve is kisebbnek várjuk.

Ezt a kérdést külön köszönöm, mert felderített egy hibát a [2] publikációban és a dolgozat vonatkozó részeiben is, t.i. a T_{ns} -nek van μ^2 -tel arányos tagja, ellentétben a dolgozat (156) és a [2] publikáció (41) képletével. A bracketing függvény közelítő alakjára vonatkozó végső konklúziót nem érinti a változás, mert $f^{[2]}$ hibája nélkül is μ^2 -tel arányos.

Kérdés

4. A 82. oldalon a szerző azt írja, hogy „a feltűnően rossz közelítés vélhetően a hullámfüggvényben mutatkozó nagymértékű hiba következménye.” Ki tudná fejteni a szerző kicsit részletesebben, hogy milyen hibáról van szó, mi annak az eredete? Amennyiben ismert, hogy az alkalmazott referencia hullámfüggvény nem megfelelő, akkor milyen lehetőséget lát a szerző ennek javítására?

Válasz

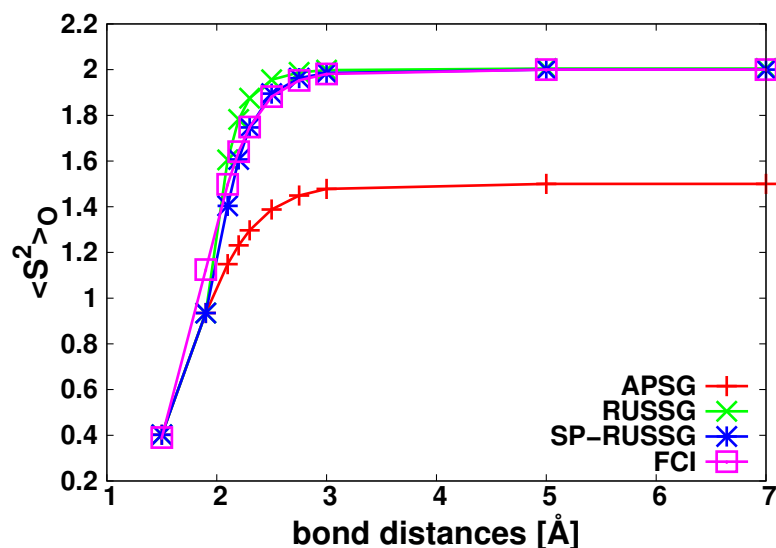
Az idézett mondat a 84. oldal 7. táblázatát elemző paragrafusból való. Ebben a példában a vízmolekula szimmetrikus nyújtását vizsgáljuk, a kötésszög egyensúlyi értéke mellett az OH kötések hossza az egyensúlyi érték négyszerese. Referenciaként APSG (Antisymmetrized Product of Strongly orthogonal Geminals) függvény szolgál, amiben csak a két OH kötéshez rendelt geminál korrelált, az alterek dimenziója kettő.

Ez a teszt rendszer egyfajta állatorvosi ló, a szinglet csatolt geminál hullámfüggvény egy ismert[3] hátulütőjét helyezi előtérbe. Míg az OH kötésekhez tartozó, szinglet geminálokkal szerkesztett APSG függvény jó közelítést jelent az egyensúlyi geometria környékén, nem ad helyes képet a hidrogén atomok távolítása nyomán megváltozott elektronszerkezetről. Amennyiben adekvát, geminál alapú leírást kívánunk szerkeszteni a 7. táblázatban alkalmazott geometriánál, a szinglet OH geminálok szorzata mellett a triplet OH geminálok szorzatát is tekinteni kell. A jelenség minden olyan esetben fellép, ahol többszörös kötés vagy ugyanahhoz az atomhoz kapcsolódó, több egyszeres kötés nyújtása történik. A jelenségre a vízmolekula példáján adtunk részletes elemzést[4].

A probléma orvoslásának egy lehetősége a triplet geminálokat is megengedő, erősen ortogonális geminál szorzat konstrukció. Ilyen módszert is vizsgáltunk az említett munkában. A probléma és a megoldás illusztrálására a [4] publikáció 2. (a) ábráját idézem, itt 1. számmal.

Az 1. ábrán látható, hogy az oxigén atomhoz rendelhető spin a disszociáció során fél atomi egység körüli, egyensúlyi értékről két atomi egységre nő, a folyamat határesetében triplet oxigén atomot kapunk. A kérdésben szereplő 7. táblázatban 3.8 Å körüli OH kötéshossznál vizsgáltunk, ami a végállapothoz hasonlít a lokális spint illetően. Az APSG hullámfüggvény két atomi egység helyett csak másfél körüli értéket eredményez, ami a triplet geminálok hiányára vezethető vissza. A szinglet-triplet keverék geminálokat megengedő RUSSG és SP-RUSSG módszerek lényegében helyes lokális spint adnak 3.8 Å OH kötéshossznál. Ez utóbbi módszerek esetében a köztes tartományban látunk lényeges eltérést a FCI értéktől, aminek további elemzésétől itt eltekintünk.

Visszatérve a kérdésben szereplő táblázatra, itt kifejezetten olyan helyzetben vizsgáltuk az alsó korlát közelítések teljesítőképességét, ami a referencia jóságát tekintve kihívást jelent. Az eredmények ennek megfelelően valamivel rosszabbak a 6. táblázatban mutatott értékeknél. Az $f_{OD}^{[2]}$ -vel kapható hibabecslés pl. 10 lépésben jut el a mikrohartree tartományba nyújtott geometriánál, míg ugyanehhez 7 iterációs lépés elegendő a 6. táblázatban mutatott egyensúlyi geometriánál.



1. ábra. A spin-négyzet várható értékének oxigén atomhoz rendelhető része a vízmolekula szimmetrikus disszociációjának példáján, 6-31G** bázisban. Az adott bázisban egzakt, FCI megoldás mellett erősen ortogonális geminál szorzat alapú modelleket vizsgálunk. Az APSG konstrukció szinglet geminálokra szorítkozik, míg az RUSSG megenged szinglet-triplet keverék geminálokat. A SP-RUSSG betűszó az RUSSG hullámfüggvény utólagos (variációt követő) spin-tisztítását takarja.

Kérdés

5. A 85. oldalon a szerző azt írja, hogy a hibák hibái összeadódnak. Nem fordulhat elő esetleg olyan helyzet, hogy a hibák éppen kioltják egymás járulékait?

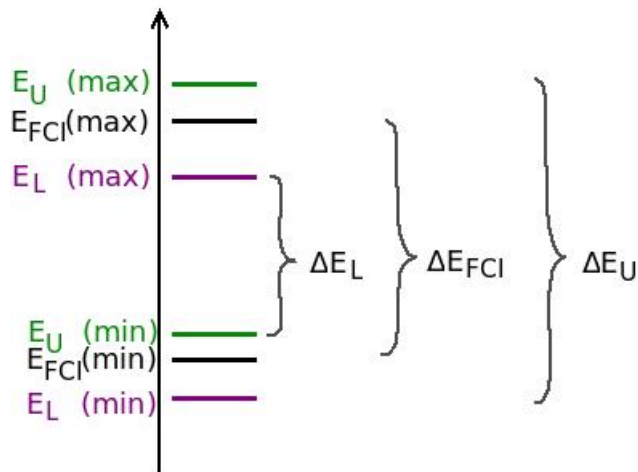
Válasz

Ebben az alkalmazásban az ammónia molekula inverziós gátjának magasságát becsljük alulról és felülről, egyedi energia értékek – a potenciálgát minimuma és maximuma – alsó és felső becsléseit használva. Amennyiben az egyedi értékekre szigorú alsó ill. felső korlátunk van, ezek hibája kifejezetten előnytelenül adódik össze, ahogy a 2. ábra szemlélteti.

A gátmagasság alsó és felső becslése is egy egyedi szint alsó és felső becsléséből adódik, megfelelő előjeles összegként. Hibakompensációra csak akkor van lehetőség, ha eltekintünk attól, hogy az egyedi energia értékeket szigorúan alulról ill. felülről becsljük. Ilyen esetben azonban nem lehetünk biztosak afelől, hogy a gát magasságát mely oldalról becsljük.

Kérdés

6. A 96. oldalon a szerző írja, van amikor MP2 a jobb közelítés, van amikor az MP3 jobb, van amikor a skálázott Grimme-módszer jobb vagy rosszabb eredményt ad. Általános esetben mi alapján lehet eldönteni, hogy melyik módszer mennyire jó?



2. ábra. Az egyedi energia értékek (pl. potenciálgát minimuma és maximuma) alsó (lila szín, L index) és felső (zöld szín, U index) becsléseiből generálható becslések a gát magasságára (ΔE). A gátmagasság alsó becslését L index, felső becslését U index jelöli.

Válasz

A kérdés a multireferencia alapú perturbációs eljárásban bevezetett spin komponens skálázás válfajainak numerikus illusztrációját adó táblázat diszkusszióját érinti. Ez a stúdium a numerikus alkalmazás szempontjából nem mondható sikeresnek, a skálázásra megfogalmazott lehetőségek egyike sem hozott szisztematikus javulást a skálázatlan értékekkel összevetve. A hol ilyen, hol olyan arcot mutató eredmények nem adnak lehetőséget határozott konklúzióra általános esetben, talán ez motiválta a kérdés konkrét példán túlmutató jellegét.

Elrugaszkodva az adott példától, azt mondhatjuk, hogy a nemrelativisztikus Hamilton-operátor stacionárius állapotainak számítását célzó alkalmazásainkban az adott bázisban egzakt megoldás (FCI) jelenti a legjobb viszonyítási alapot. Ennek ismeretében tudunk határozott megállapítást tenni egy módszer jóságáról. Amennyiben ez nem elérhető, igyekszünk az éppen tesztelt közelítésnél biztosan igényesebb elméleti módszerre támaszkodni összehasonlítás céljából.

Időről-időre felmerül kísérletileg meghatározott értékekkel való összevetés gondolata. Ez elsősorban olyankor indokolt, amikor a tesztelt módszernél igényesebb kvantumkémiai közelítés nem elérhető, pl. a vizsgált módszer túllép a FCI-ben is alkalmazott közelítéseken. A kísérleti eredményekkel való összevetés számos kérdést felvet, amely nem kerül terítékre az adott bázisban igényesebb elméleti módszerrel történő összevetéskor. Ilyen pl. a rendszer geometriája, hogy mely feltételek mellett származik a ténylegesen mért adatból az összevetésre alkalmas számérték, milyen effektusok játszhatnak szerepet, amelyek nem kerültek az elmélet szintjén figyelembevételre. Ide tartozó gondolat a focal point analysis[5], amely a kvantumkémiai bázis, az elektronkorreláció és a relativisztikus effektusok tekintetében a lehető legjobb értéket célozza, és lehetőleg ezt veti össze kísérletből származó adattal.

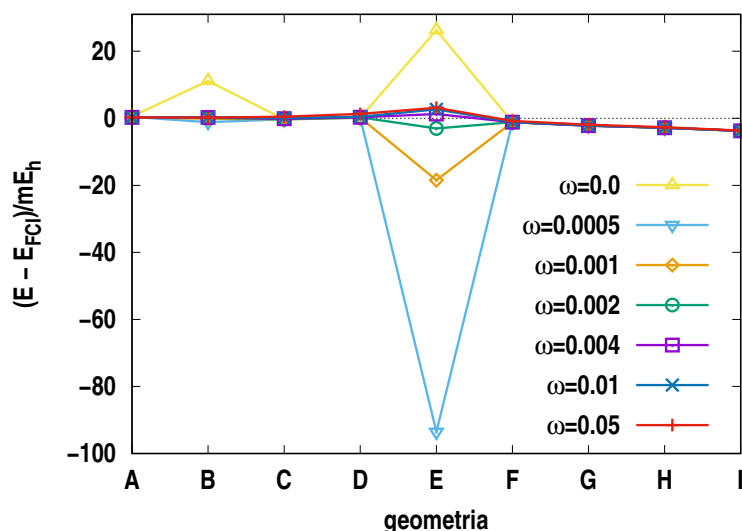
Amennyiben az elmélet és a kísérlet összehasonlítására vonatkozó körülmények eltérése a tesztelni kívánt elméleti közelítés nagyságrendjét érinti, a kísérlettel való összevetéssel nem arra kapunk választ, amit kérdezőnk.

Kérdés

7. A 106. oldalon a szerző bevezeti a csillapításra az ω paramétert, melynek értékét $\omega=0.003$ -nak választja. Mi alapján lett ez az érték meghatározva? Hogyan befolyásolja az ω paraméter a Tyihonov-csillapítás eredményét?

Válasz

A kérdés az SS-MRPT érzékenység analízisének eredményeit bemutató ábrákhoz kapcsolódik. Maga a stúdium a korábban hasznosnak bizonyult numerikus csillapítás szükségességét boncolgatta. A vizsgálat kiindulópontját az jelentette, hogy a numerikus csillapítás alkalmazását nem láttuk megalapozottnak elméleti oldalról.



3. ábra. Az SS-MRPT másodrendű energia korrekció értéke a Tyihonov-csillapításban szereplő ω paraméter különböző értékeinél, a BeH_2 molekula alapállapotában, DZ bázisban, EN partícióban, CAS(4,4) referencia függvényvel.

A másodrendű energia változását számítottuk a csillapító paraméter függvényében. Ilyen eredményt mutat a dolgozat 10. ábráján mutatott példával megegyező rendszerre az itt szereplő, 3. ábra. A 3. ábra skáláján szembeűnően változik az energia az E pontban, $\omega = 0.01$ érték alatt, míg $0.01 < \omega < 0.05$ tartományban nem tapasztalható érdemi változás. A dolgozatban alkalmazott $\omega = 0.003$ értékre azért esett a választás, mert így a FCI eredményhez közeli értéket kaptunk az E pontban. A FCI energia ismerete nélkül feltehetően az $0.01 < \omega < 0.05$ tartományban rögzítettük volna a csillapító paraméter értékét. Különösebb jelentőséget azonban nem tulajdonítottunk ennek a kérdésnek, mivel erőfeszítésünk épp a korábbi munkákban bevezetett csillapító paraméter száműzésére irányult.

Kérdés

8. A 206-os egyenletben hol szerepel a μ függés? Tekintettel arra, hogy C μ függő, így felső indexbe kellene írni μ -t és a szummában is fel kellene tüntetni. A szerző itt hivatkozik μ -re és ν -re, de az utóbbi csak a 208-as egyenletben jelenik meg. Javasolt lenne ezek javítása.

Válasz

Tényleg hiányzik a geminál koefficiens mátrix μ -függésének jelzése a (206) képletben. A fejezet további részében, az erős ortogonalitás bevezetését követően, a pályaindexekre vonatkozó szummák geminálra való megszorításával jeleztem a μ -függést. Ez azért volt praktikus, mert így ugyanazt a szimbólumot használhattam a teljes C mátrix, és annak egy geminálhoz rendelt blokkja esetén. Sajnos ebbe a jelölésbe is csúszott hiba, a (216) kifejezésekben lemaradt a megszorítás a szummáról.

Kérdés

9. Az 5.2 fejezetben a szerző a méretkonzisztenciát is vizsgálja. Kérdésem, hogy „direct spectator” esetén is megmarad-e a méretkonzisztencia?

Válasz

A kérdés az SS-MRPT redundancia szűrt változatát érinti és arra vonatkozik, hogy az alrendszerek keveredésének, pontosabban nem keveredésének megállapítása vajon a direct spectator gerjesztéseket is tartalmazó esetre érvényes. A dolgozat 112. oldalának tetején egy rövid bekezdés szól a méretkonzisztenciáról, ahol nem tértem ki erre a kérdésre. A [6] publikáció hatodik oldalán található egy bővebb elemzés, aminek alapjául az ott szereplő I. és III. táblázatokban sorolt átfedő alterek szolgálnak. Ezek tartalmazzák a direct spectator gerjesztésekkel generált függvényeket, a cikk 6. oldalán szereplő bővebb diszkusszió ezekre is kiterjed. Egészen röviden az áll a méretkonzisztencia őrzés háttérében, hogy az átfedésben érintett gerjesztések amplitúdói ugyanahhoz az alrendszerhez rendelhetők.

Budapest, 2021. november 2.



Szabados Ágnes

Hivatkozások

1. Murray, C. & Davidson, E. R. *Int. J. Quantum Chem.* 43. köt., 755–768. old. (1992).
2. Tóth, Zs. & Szabados, Á. *J. Chem. Phys.* 143. köt., 84112. old. (2015).
3. Schultz, P. A. & Messmer, R. P. *Journal of the American Chemical Society* 115. köt., 10938–10942. old. (1993).
4. Jeszenszki, P., Rassolov, V., Surján, P. R. & Szabados, Á. *Mol. Phys.* 113. köt., 249–251. old. (2015).
5. W. D. Allen, A. L. L. E. & Császár, A. G. in: *Structures and Conformations of Non-Rigid Molecules* 343. old. (Kluwer, Dordrecht, 1993).
6. Jeszenszki, P., Surján, P. R. & Szabados, Á. *J. Chem. Phys.* 138. köt., 124110. old. (2013).