

dc\_1955\_21

**Dr. Mátyus Edit**

TÉZISPONTOK

Molekulafizika és spektroszkópia

*From molecular spectroscopy  
to molecular physics*

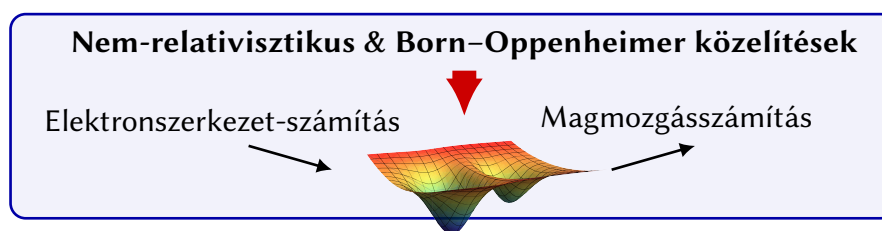
című MTA doktori értekezéshez

Budapest, 2022.11.11.

## I. BEVEZETÉS

Az anyag atomi-molekuláris tartománya nagy részletességgel tanulmányozható spektroszkópai mérések révén. Eddigi tudományos munkásságom során a spektroszkópai mérések elméleti értelmezésével, illetve számításos predikciójával, valamint az elmélet tesztelésével, továbbfejlesztésével foglalkoztam.

## II. MOLEKULASPEKTROSKÓPIAI KÍSÉRLETEK ÉRTELMEZÉSE ÉS PREDIKCIÓJA



1. ábra: A kvantumkémia alapvető közelítései és két nagy szakterülete.

Doktori (PhD) kutatásaim során a kvantumkémia (1. ábra) magmozgásokkal kapcsolatos területén végeztem módszertani fejlesztéseket. Egy molekuláris rendszer atommagjainak egy potenciális energia felületen (PES) történő kvantummechanikai leírásához fejlesztettem ki egy általánosan alkalmazható (kvázi)variációs módszert az atommagok (rezgési-forgási) Schrödinger-egyenletének megoldásához. A kifejlesztett számítógépes program(csomag) a GENIUSH (GENeral, Internal-coordinate, USer defined Hamiltonians) nevet kapta. A programmal az első, 2009-es megjelenése óta [1] számos alkalmazás és további fejlesztés történt.

Jómagam, főként a cambridge-i posztdoktori kutatásaim hatására, molekulakomplexek spektroszkópai vizsgálatával kapcsolatban kezdtem el alkalmazni a programot. Molekulakomplexek spektroszkópai vizsgálata a molekuláris kölcsönhatások vizsgálata miatt szélesebb érdeklődésre is számot tart.

Kezdetben (2014-15) nem volt teljesen nyilvánvaló, hogy a program valóban (a gyakorlatban is) jól vizsgálja a kinetikus energia operátor szingularitásai miatt, de a kezdeti sikerek (metán-víz dimer távoli infravörös nagyfelbontású spektrumának első elméleti értelmezése [2, 3]), majd a számítások konvergenciájának tökéletesítése [4] lendületet adott a további munkának. Végül is, munkatársaimmal azt találtuk, hogy egy apró módosítással [4] az eredeti 2009-es általánosított eljárás közel olyan hatékonyan alkalmazható, mint egy kifejezetten a metán-víz dimerre (a szakterület legkiválóbb kutatói által) kifejlesztett program.

A molekulakomplexek nagy-amplitúdójú mozgásai remek alkalmazási terepet jelentettek a GENIUSH program számára, különösen a szakirodalomban elterjedt normál-koordinátás (és esetleg

perturbatív) eljárásokhoz képest. Az alkalmazások során azonban az eredeti eljárás egy fontos hátránya is hamar nyilvánvalóvá vált: a számítások költsége exponenciálisan növekedett az aktív rezgési szabadsági fokok számával. Emiatt, vagy a legkisebb rendszerekre kellett szorítkoznunk, vagy kényszerű feltételezéseket kellett bevezetnünk az aktív rezgési koordinátákra vonatkozóan, a molekula többi részének rögzítése mellett [5]. Egy ilyen teljes rögzítés azonban gyakran túl durva közelítést jelent, és akkor juthatnánk a molekulamozgások igazán jó leírására, ha a teljes rendszer rezgési(-forgási) Schrödinger-egyenletét meg tudnánk oldani – természetesen a PES lehető legpontosabb függvény-ábrázolását használva.

Ennek érdekében megvizsgáltam az eredeti GENIUSH módszer rezgési skálázódásának tulajdonságait és az irodalomban fellelhető gondolatokat. Fontos szempont volt, hogy nem akartam *ad hoc* közelítéseket bevezetni a PES-sel kapcsolatban. Mind a báziskészlet, mind az integrálási grid exponenciálisan növekedett az aktív szabadsági fokok számával. Ezen dupla-exponenciális skálázódás polinomiálissá szelídítését végül is egy másik mátrix-ábrázolás (finite basis representation) és a Smolyak-féle integrálási kvadratura alkalmazásával sikerült elérni [6]. Az eljárás újdonsága az volt, hogy elsőként alkalmaztuk ezeket a módszereket görbevonaltú (belső) koordinátákkal leírható, nagy-amplitúdójú mozgást végző rendszerekben. Az egyszerű megfigyelésünk azon alapult, hogy az ilyen ‘floppy’ rendszerekben általában ‘kevés’ nagy-amplitúdójú mozgás van, ezért egy ilyen kis ‘aktív zsebre’ megengedhető az exponenciális skálázódás, míg a többi rezgési módusra – bár túl durva közelítés lenne egy geometriai megszorítás bevezetése (rögzítés) – mind a bázis-, mind a grid-méret hatékonyan ‘vágható’. Ezáltal a sok és gyorsan növekvő szabadsági fokszámmal rendelkező rész leírásának számítási költsége csak egy polinom-függvény szerint nő a szabadsági fokok számával. Az első numerikus alkalmazásokban a metán komplexeit,  $\text{CH}_4 \cdot \text{Ar}$  [6, 7] és  $\text{CH}_4 \cdot \text{F}^-$  [8, 9], vizsgáltuk. Jelenleg tervezzük az eljárás kiterjesztését és általánosítását.

Mindehhez közvetlen motivációt jelent kísérleti csoportok érdeklődése számításos eredményekkel kapcsolatban. Egy ilyen példa a hangyasav,  $\text{HCOOH}$  (kis és nagy-felbontású, cisz-transz izomerizációját is leíró) spektrumának vizsgálatával kapcsolatos, amelyben a félmerev rész esetén ‘optimális’ görbevonaltú normál-koordinátákat definiáltunk a hatékony bázis- és grid-levágós módszerek alkalmazásához [10]. Többek között a  $3 \cdot 10 - 6 = 24$ -dimenziós hangyasav dimer,  $(\text{HCOOH})_2$  [5] lehet egy további, a módszereink teszteléséhez és fejlesztéséhez kihívást jelentő alkalmazás.

### III. A MOLEKULÁRIS ANYAG ALAPVETŐ ELMÉLETÉNEK GYAKORLATI ALKALMAZÁSA ÉS TOVÁBBFEJLESZTÉSE

A szokásos kvantumkémiai keretek között (1. ábra) még a lehető legjobb módszerekkel számított molekulaszpektrumok esetén is mindig megfigyelhetők ‘kis tökéletlenségek’ (a legjobb) spektroszkópiai kísérletekhez képest. Ezen megfigyelések nyomán jutottam el az atomi-molekuláris anyag fundamentális elméletének teszteléséhez és továbbfejlesztéséhez. Ehhez a mai kvantumkémia alapjául szolgáló nem-relativisztikus és Born–Oppenheimer (BO) közelítéseken való túllépésre (1. ábra), ezek teljes kiküszöbölésére van szükség. Ezzel az iránnyal közvetlenül a doktori (PhD) fokozatom megszerzése után kezdtem el foglalkozni ETH Fellow-ként Zürichben. Mostanra azt gondolom, hogy már megerősödött ez a kutatási irányom is, és visszatekintve mondhatom, hogy az elmúlt évtizedben egy, az atomi-molekuláris rendszerek számításához hasznosnak látszó pre-Born–Oppenheimer, relativisztikus kvantumelektrodinamikai elmélet (alapegyenletek) formális megfogalmazása, és számításos-gyakorlati alkalmazása irányában sikerült előrelépéseket tenni, amely további munkával, remélhetőleg a nem túl távoli jövőben, olyan elméleti-számításos eredményeket fog szolgáltatni, amelyek közvetlenül összehasonlíthatóak lesznek a nagyfelbontású (precíziós) spektroszkópiai mérések eredményével.

Az ötletek kipróbálásához szükség volt egy molekulafizika platformra, amelyet egy saját fejlesztésű számítógépes program biztosít. Ennek a programnak a QUANTEN (QUANTum mechanical treatment of Electrons and atomic Nuclei) nevet adtam. A program magját képezi egy lineáris és nem-lineáris variációs eljárás, valamint egy viszonylag kiterjedt explicit-korrelált Gauss-függvényekre vonatkozó integrálgyűjtemény (Fortran implementációja).

A pre-Born–Oppenheimer (nem-relativisztikus) rész elvi szempontból kevesebb nehézséget jelentett, bár itt is adódtak érdekességek a molekulaszervezet [11–14] és az elektronikusan gerjesztett rovibronikus állapotok kapcsán [15–17], mégis a fő kihívás technikai jellegű volt, az integrálok levezetése, a komplikált kifejezések numerikusan stabil beprogramozása, és a numerikus eredmény (energia) megfelelő konvergenciájának biztosítása (véges számítási idő és véges számábrázolás mellett).

A nem-relativisztikus közelítés (korrekt) elkerülése sokkal nehezebbnek bizonyult. Évekig (látható eredmény nélkül) csak az ‘egyenletet’ kerestem, és gondolkodtam, hogy hogyan lenne érdemes elindulni. Eközben a kutatócsoportommal beletanultunk a szokásos, szinte receptszerűen alkalmazandó ‘relativisztikus’ és ‘QED’ korrekciók numerikus kiértékelésének módszertanába (az integrálok naív kiértékelése nem vezetne kellően pontos eredményre, bizonyos típusú operátorok esetén). Sokkal nehezebb volt azonban kideríteni, hogy egészen pontosan

honnan és hogyan származtathatóak ezek a korrekciók, és végül találni egy olyan referenciát (egyenletet, formalizmust), ahonnan elindulva érdemes lehet egy modern, számításos (BO vagy pre-BO) relativisztikus QED módszert felépíteni. A régi irodalom (1930–1960-as évek) látszólagos útvesztőjében végül is – hosszú évek alatt – sikerült eligazodni.

Most már van egy ígéretes kiindulópont és egy látható útvonal, valamint a kutatócsoportomban kellő numerikus tapasztalat. Az eddigi numerikus eredményeinket teszteltük – az elvileg különböző mennyiségek összehasonlításához kifejlesztettünk egy alkalmas módszertant – és kiváló egyezést kapunk az ismert és elérhető perturbatív formulákból számítható korrekciók pontos értékével, amelyek jelenleg a precíziós spektroszkópiai mérések ‘arany-standardjaként’ használatosak.

#### IV. TÉZISPONTOK

Az értekezésben bemutatott kutatási eredményeken alapuló, tényszerűen felsorolható eredmények:

**I. a GENIUSH rezgési-forgási (kvázi)variációs kvantumkémiai program alkalmazása és továbbfejlesztése molekuláris rendszerek mozgásának kvantummechanikai leírására, különös tekintettel a nagyamplitúdójú mozgásokkal rendelkező rendszerekre (például molekulakomplexek) [2–9], részletesen:**

- I.1. a metán-víz dimer nagyfelbontású távoli infravörös kísérleti spektrumának első értelmezése (a mérés után 20 évvel) [2–4];
- I.2. a hangyasav-dimer rezgési spektroszkópiájának vizsgálata a távoli infravörös ‘ujjlenyomat’ tartományban [5];
- I.3. bázis- és grid-levágási módszerek alkalmazása a számítási költségek dupla-exponenciális skálázódásának polinomiálissá szelídítésére [6] és első alkalmazások metán-atom/ion komplexek rezgéseinek teljes dimenziós leírására [7–9];
- I.4. a hangyasav monomer esetén közel optimális görbevonalú normál-koordináták definíciója a polinom-skálázódású bázis- és grid-levágáshoz annak érdekében, hogy lehetséges legyen a rezgési állapotokat kiszámítani a cisz-transz izomerizációs gátig és azon túl [10];

**II. a QUANTEN algoritmus és explicit korrelált variációs számítógépes program, egy molekulafizika platform, létrehozása az atomi-molekuláris anyag kvantumelméletének fejlesztéséhez a Born–Oppenheimer és nem-relativisztikus közelítések nélkül, precíziós spektroszkópiai alkalmazásokhoz [13, 15–24], részletesen:**

- II.1. variációs pre-Born–Oppenheimer eljárás implementációja [15–18], és alkalmazásai (perturbatív relativisztikus korrekciókkal együtt) a  $H_2$   $EF$   $^1\Sigma_g^+$  és  $B$   $^1\Sigma_u^+$  rovibronikus állapotaira [16, 17], amely 3-4 nagyságrend növekedést jelent az elméleti pontosságban a korábbi irodalmi adatokhoz képest (mindkét esetre) és (a további legalább 2-3 nagyságrenddel pontosabb) precíziós spektroszkópiai kísérletekkel kiváló egyezést mutat;
- II.2. perturbatív (regularizált) vezető rendű relativisztikus és QED korrekciók implementációja és kiszámítása [16, 19, 20]; első regularizált (azaz, spektroszkópiai pontosságú) relativisztikus és QED korrekciók a  $H_3^+$  esetén [20]; nem-adiabatikus

korrekciókkal együtt kiváló egyezés a precíziós spektroszkópai mérésekkel a  ${}^4\text{He}_2^+$  rezgési-forgási átmeneteire [19];

II.3. a relativisztikus QED Bethe–Salpeter-egyenlet formalizmusának elméleti tanulmányozása atomi-molekuláris számításokhoz, a Salpeter–Sucher-féle megközelítésben definiálható pár-nélküli Dirac–Coulomb(–Breit) operátorra egy variációs eljárás tervezése, implementációja, a numerikus eredmények értelmezése és összehasonlítása (validálása) a nem-relativisztikus referenciához tartozó (regularizált) perturbatív korrekciókkal [21–24].

- 
- [1] E. Mátyus, G. Czakó, and A. G. Császár, *J. Chem. Phys.* **130**, 134112 (2009).
  - [2] J. Sarka, A. G. Császár, S. C. Althorpe, D. J. Wales, and E. Mátyus, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 22816 (2016).
  - [3] J. Sarka, A. G. Császár, and E. Mátyus, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 15335 (2017).
  - [4] A. Martín Santa Daría, G. Avila, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* **154**, 224302 (2021).
  - [5] A. Martín Santa Daría, G. Avila, and E. Mátyus, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 6526 (2021).
  - [6] G. Avila and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* **150**, 174107 (2019).
  - [7] G. Avila, D. Papp, G. Czakó, and E. Mátyus, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 2792 (2020).
  - [8] G. Avila and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* **151**, 154301 (2019).
  - [9] D. Papp, V. Tajti, G. Avila, E. Mátyus, and G. Czakó, *Mol. Phys.*, e2113565 (2022).
  - [10] A. Martín Santa Daría, G. Avila, and E. Mátyus, *J. Mol. Spectrosc.* **385**, 111617 (2022).
  - [11] E. Mátyus, J. Hutter, U. Müller-Herold, and M. Reiher, *Phys. Rev. A* **83**, 052512 (2011).
  - [12] E. Mátyus, J. Hutter, U. Müller-Herold, and M. Reiher, *J. Chem. Phys.* **135**, 204302 (2011).
  - [13] E. Mátyus, *Mol. Phys.* **117**, 590 (2019).
  - [14] E. Mátyus and P. Cassam-Chenaï, *J. Chem. Phys.* **154**, 024114 (2021).
  - [15] E. Mátyus, *J. Phys. Chem. A* **117**, 7195 (2013).
  - [16] D. Ferenc and E. Mátyus, *Phys. Rev. A* **100**, 020501(R) (2019).
  - [17] E. Saly, D. Ferenc, and E. Mátyus, (2022), 10.48550/arXiv.2210.09653.
  - [18] E. Mátyus and M. Reiher, *J. Chem. Phys.* **137**, 024104 (2012).
  - [19] D. Ferenc, V. I. Korobov, and E. Mátyus, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 213001 (2020).
  - [20] P. Jeszenszki, R. T. Ireland, D. Ferenc, and E. Mátyus, *Int. J. Quant. Chem.* **122**, e26819 (2022).
  - [21] P. Jeszenszki, D. Ferenc, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* **154**, 224110 (2021).
  - [22] P. Jeszenszki, D. Ferenc, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* **156**, 084111 (2022).
  - [23] D. Ferenc, P. Jeszenszki, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* **156**, 084110 (2022).
  - [24] D. Ferenc, P. Jeszenszki, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* **157**, 094113 (2022).

## V. A DOKTORI ÉRTEKEZÉS ALAPJÁUL SZOLGÁLÓ SAJÁT KÖZLEMÉNYEK

Az értekezés összeállítása folyamán meghívást kaptam az American Chemical Society (ACS) és a Royal Society of Chemistry (RSC) folyóirataitól, hogy írjak összefoglaló-kitekintő cikkeket a kutatócsoportom elmúlt években elért kutatási eredményeiről. Ezen meghívásoknak eleget téve az értekezés 2. és 3. fejezetei elbírálás, illetve a pályázat hivatalos benyújtásának idején (2022.12.08-án) megjelenés alatt állnak:

- Exact quantum dynamics developments for floppy molecular systems and complexes, E. Mátyus\*, A. Martín Santa Daría, and G. Avila, *Chem. Comm.* (in press). [invited Feature Article, közlésre elfogadva: 2022.11.23-án]  
(selected as 2022 HOT Chemical Communications article & inside Front Cover of the journal)
- The Bethe–Salpeter QED wave equation for bound-state computations of atoms and molecules, E. Mátyus\*, D. Ferenc, P. Jeszenszki, and Á. Margócsy, *ACS Phys. Chem. Au* (under review) [arXiv:2211.02389](https://arxiv.org/abs/2211.02389) [invited Review-Perpective Article]

A cikkek társszerzői kutatócsoportom tagjai, és nagy segítségemre voltak az ábrák elkészítésében, a hivatkozási listák kibővítésében, az egyenletek ellenőrzésében, valamint a teljes gondolatmenet és prezentáció megvitatásában. A bemutatott eredmények nem lezárt kutatások, hanem a kutatócsoport napi tevékenységének szerves részei, tudásunk és eszköztárunk folyamatosan alakul. Ennek megfelelően ma már bizonyos dolgokat kicsit másként írnék, fél év múlva pedig biztosan sokkal előrébb fogunk járni az elméleti vonatkozások jobb megértésben és az algoritmikus fejlesztésekben. Az anyagban maradt esetleges hibákért, pontatlanságokért természetesen minden felelősség engem terhel. Az áttekintő, összefoglaló munkákhoz tartozó eredeti kutatások bemutatása az alább felsorolt cikkekben olvasható.

36. **Variational versus perturbative relativistic energies for small and light atomic and molecular systems**  
D. Ferenc, P. Jeszenszki, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* (2022).
35. **CH<sub>4</sub>·F<sup>-</sup> PES revisited: Full-dimensional ab initio potential energy surface and variational vibrational states**  
D. Papp, V. Tajti, G. Avila, and E. Mátyus, G. Czakó, *Mol. Phys.* e2113565 (2022). [Péter Szalay Special Issue]
34. **Benchmark potential energy curve for collinear H<sub>3</sub>**  
D. Ferenc, and E. Mátyus, *Chem. Phys. Lett.* 801, 139734 (2022). [Kozu Kutsichu Special Issue]
33. **Vibrational states of HCOOH**  
A. Martín Santa Daría, G. Avila, and E. Mátyus, *J. Mol. Struct.* 385, 111617 (2022). [J. K. G. Watson Special Issue]
32. **Vibronic mass computations for the EF–GK–HH <sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> manifold of molecular hydrogen**  
E. Mátyus, D. Ferenc, *Mol. Phys.* e2074905 (2022). [L. Wolniewicz Special Issue]
31. **On the Breit interaction in an explicitly correlated variational Dirac–Coulomb framework**  
D. Ferenc, P. Jeszenszki, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 156, 084110 (2022).
30. **Variational Dirac–Coulomb explicitly correlated computations for atoms and molecules**  
P. Jeszenszki, D. Ferenc, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 156, 084111 (2022).
29. **On the inclusion of cusp effects in expectation values with explicitly correlated Gaussians**  
P. Jeszenszki, R. T. Ireland, D. Ferenc, and E. Mátyus, *Int. J. Quant. Chem.* 122, e26819 (2022). [István Mayer Special Issue]



28. **Performance of a black-box-type rovibrational method in comparison with a tailor-made approach: case study for the methane-water dimer**  
A. Martín Santa Daría, G. Avila, and E. Mátyus, J. Chem. Phys. 154, 224302 (2021).
27. **All-order explicitly correlated relativistic computations for atoms and molecules**  
P. Jeszenszki, D. Ferenc, and E. Mátyus, J. Chem. Phys. 154, 224110 (2021).
26. **Fingerprint region of the formic acid dimer: variational vibrational computations in curvilinear coordinates**  
A. Martín Santa Daría, G. Avila, and E. Mátyus, Phys. Chem. Chem. Phys. 23, 6526 (2021).
25. **Orientalional decoherence within molecules and emergence of the molecular shape**  
E. Mátyus and P. Cassam-Chenai, J. Chem. Phys. 154, 024114 (2021). [invited to the Special Issue to honor Women in Chemical Physics]
24. **Non-adiabatic, relativistic, and leading-order QED corrections for rovibrational intervals of  $^4\text{He}_2^+$  ( $X^2\Sigma_u^+$ )**  
D. Ferenc, V. I. Korobov, and E. Mátyus, Phys. Rev. Lett. 125, 213001 (2020).
23. **Exact quantum dynamics background of dispersion interactions: case study for  $\text{CH}_4\cdot\text{Ar}$  in full (12) dimensions**  
G. Avila, D. Papp, G. Czakó, and E. Mátyus, Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 2792 (2020). [selected as 2020 HOT PCCP article]
22. **Full-dimensional (12D) variational vibrational states of  $\text{CH}_4\cdot\text{F}^-$ : interplay of anharmonicity and tunneling**  
G. Avila and E. Mátyus, J. Chem. Phys. 151, 154301 (2019).
21.  **$\text{H}_3^+$  as a five-body problem described with explicitly correlated Gaussian basis sets**  
A. Muolo, E. Mátyus, and M. Reiher, J. Chem. Phys. 151, 154110 (2019).
20. **Non-adiabatic Mass Correction for Excited States of Molecular Hydrogen: Improvement for the Outer-well  $H\bar{H}^1\Sigma_g^+$  Term Values**  
D. Ferenc and E. Mátyus, J. Chem. Phys. 151, 094101 (2019).
19. **Computation of Rovibronic Resonances of Molecular Hydrogen:  $EF^1\Sigma_g^+$  Inner-well Rotational States**  
D. Ferenc and E. Mátyus, Phys. Rev. A 100, 020501(R) (2019).
18. **Effective Non-adiabatic Hamiltonians for the Quantum Nuclear Motion over Coupled Electronic States**  
E. Mátyus and S. Teufel, J. Chem. Phys. 151, 014113 (2019).
17. **Molecular Dimers of Methane Clathrates: *Ab Initio* Potential Energy Surfaces and Variational Vibrational States**  
M. Metz, K. Szalewicz, J. Sarka, R. Tóbiás, A. G. Császár, and E. Mátyus, Phys. Chem. Chem. Phys. 21, 13504 (2019). [selected as 2019 HOT PCCP article]
16. **Towards Breaking the Curse of Dimensionality in (Ro)vibrational Computations of Molecular Systems with Multiple Large-amplitude Motions**  
G. Avila and E. Mátyus, J. Chem. Phys. 150, 174107 (2019).
15. **Bound and Unbound Rovibrational States of the Methane-argon Dimer**  
D. Ferenc and E. Mátyus, Mol. Phys. 117, 1694 (2019). [MOLIM Special Issue]

14. **Pre-Born–Oppenheimer Molecular Structure Theory**  
E. Mátyus, Mol. Phys. 117, 590 (2019). [invited New View Article]
13. **Non-adiabatic Mass-correction Functions and Rovibrational States of  $^4\text{He}_2^+(X^2\Sigma_u^+)$**   
E. Mátyus, J. Chem. Phys. 149, 194112 (2018).
12. **Non-adiabatic Mass Correction to the Rovibrational States of Molecules: Numerical Application for the  $\text{H}_2^+$  Molecular Ion**  
E. Mátyus, J. Chem. Phys. 149, 194111 (2018).
11. **Explicitly Correlated Gaussian Functions with Shifted-center and Projection Techniques in Pre-Born–Oppenheimer Calculations**  
A. Muolo, E. Mátyus, and M. Reiher, J. Chem. Phys. 149, 184105 (2018).
10. **Generalized Elimination of the Global Translation from Explicitly Correlated Gaussian Functions**  
A. Muolo, E. Mátyus, and M. Reiher, J. Chem. Phys. 148, 084112 (2018).
9. **Rovibrational Quantum Dynamical Computations for Deuterated Isotopologues of the Methane-Water Dimer**  
J. Sarka, A. G. Császár, E. Mátyus, Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 15335 (2017).
8. **Rovibrational Transitions of the Methane-Water Dimer from Intermolecular Quantum Dynamical Computations**  
J. Sarka, A. G. Császár, S. C. Althorpe, D. J. Wales, and E. Mátyus, Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 22816 (2016).
7. **Relativistic Kinetic-Balance Condition for Explicitly Correlated Basis Functions**  
B. Simmen, E. Mátyus, and M. Reiher, J. Phys. B 48, 245004 (2015).
6. **Electric Transition Dipole Moment in pre-Born–Oppenheimer Molecular Structure Theory**  
B. Simmen, E. Mátyus, and M. Reiher, J. Chem. Phys. 141, 154105 (2014).
5. **On the Calculation of Resonances in pre-Born–Oppenheimer Molecular Structure Theory**  
E. Mátyus, J. Phys. Chem. A 117, 7195 (2013).
4. **Elimination of the Translational Kinetic Energy Contamination in pre-Born–Oppenheimer Calculations**  
B. Simmen, E. Mátyus, and M. Reiher, Mol. Phys. 111, 2086 (2013).
3. **Molecular Structure Calculations: a Unified Quantum Mechanical Description of Electrons and Nuclei Using Explicitly Correlated Gaussian Functions and the Global Vector Representation**  
E. Mátyus and M. Reiher, J. Chem. Phys. 137, 024104 (2012).
2. **Extracting Elements of Molecular Structure from the All-Particle Wave Function**  
E. Mátyus, J. Hutter, U. Müller-Herold, and M. Reiher, J. Chem. Phys. 135, 204302 (2011).
1. **On the Emergence of Molecular Structure**  
E. Mátyus, J. Hutter, U. Müller-Herold, and M. Reiher, Phys. Rev. A 83, 052512 (2011).