

**Konformációváltozások kinetikájának modellezése
elsőrendű reakcióhálózatokkal**

Doktori (PhD) értekezés tézisei

TÓBIÁS ROLAND JÓZSEF

okleveles vegyész

Témavezető:

DR. TASI GYULA

egyetemi docens

Kémiai Doktori Iskola



Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék
Természettudományi és Informatikai Kar
Szegedi Tudományegyetem

Szeged

2017

1. Bevezetés

A molekuláris konformáció a modern kémia és a szerkezeti biológia egyik központi fogalmává nőtte ki magát. A bioaktív molekulák konformációs sajátosságai, amelyek a bennük lévő atomok változatos kötési állapotainak köszönhetőek, kulcsfontosságú szerephez jutottak az élet kialakulásában és fenntartásában.

A molekulákra jellemző stabil térszerkezetek (konformerek) létrejöttének háttérében az inter- és intramolekuláris kölcsönhatások húzódnak meg. Ahhoz azonban, hogy egy molekula konformációs terét és konformációs preferenciáit megismerjük, illetve az azokban domináló kölcsönhatásokat leírassuk, kísérleti és elméleti módszerekre egyaránt szükségünk van. Míg a termodinamikailag kedvezményezett térszerkezetek kísérleti felderítésére diffrakciós és spektroszkópiai technikákat hívhatunk segítségül, addig a stacionárius magkonfigurációk elméleti leírásához kvantumkémiai és klasszikus fizikai eljárásokat vehetünk igénybe. A kvantumkémiai stratégiák közel kísérleti pontosságú szerkezeteket eredményezhetnek, szemben a klasszikus fizikai módszerekkel, amelyek csupán félkvantitatív szerkezeti becsléseket képesek nyújtani.

A bioaktív molekulák konformációs állapotainak felderítésén túl azok egymásba alakulásainak (interkonverzióinak) megismerésére is nagy hangsúlyt fektetnek a kémiai és biokémiai szerkezetkutatásban. Ez a fajta tudományos érdeklődés a fehérjék és nukleinsavak feltekeredésének (folding) problémájában csúcsosodik ki, amelyre a jelenség komplexitása miatt részletes kinetikai modell ez idáig nem született.

A kisebb molekulák konformációs egyensúlyaihoz hasonlóan a biomolekulák feltekeredését is egy ún. interkonverziós reakcióhálózat szabályozza, amely $A_1 \rightarrow A_2$ formájú reakciók (interkonverziók) sokaságából áll, ahol A_1 és A_2 a molekula két konformerét jelöli. Az interkonverziós reakcióhálózatok olyan elsőrendű lineáris differenciálegyenlet-rendszereket indukálnak, amelyek megoldásai a konformerpopulációk időbeli eloszlását adják. Mivel ezek a koncentrációprofilok numerikus szempontból relatíve könnyen kezelhetők, ezért az interkonverziós hálózatokban akár több ezer szpécieszt is figyelembe vehetünk, ami lehetővé teheti egy mélyreható kinetikai feltekeredés-modell sikeres felállítását a jövőben.

Jelen doktori munka témája az elsőrendű reakcióhálózatok egyszerű algebrai jellemzése, illetve az n -bután és az n -pentán interkonverziós sebességi együtthatóinak lehető legpontosabb becslése. Míg az előbbi irányvonal a formálkinetika területéhez kíván egy újfajta szemléletet hozzáadni, addig az utóbbi törekvés a kis méretű szerves molekulák rugalmasságának és diszperziós viselkedésének alaposabb megértésére szolgál, ami nagyobb rendszerek alkilláncainak vizsgálatában közvetlen haszonnal járhat.

2. Elméleti háttér

2.1. Reakciójálózatok

A $\langle \mathbf{D}, \mathbf{G}, \mathbf{A}, \mathbf{k} \rangle$ négyest – tömeghatás kinetika feltételezése mellett – *kémiai reakciójálózatnak* (*chemical reaction network*, CRN) nevezzük, ha (i) $\mathbf{D} = \{d_{ij}\}$ és $\mathbf{G} = \{g_{ij}\}$ a reakciórendszer bal- és jobboldali sztöchiometriai mátrixa, valamint (ii) $\mathbf{A} = \{A_j\}$ és $\mathbf{k} = \{k_i\}$ az anyagfajták és a sebességi együtthatók vektora. Amennyiben kizárólag *elsőrendű reakciók* játszódnak le a rendszerben, azaz a \mathbf{D} mátrix minden sorában pontosan egy darab 1-es van, a további elemek pedig zérók, úgy $\langle \mathbf{D}, \mathbf{G}, \mathbf{A}, \mathbf{k} \rangle$ egy *elsőrendű kémiai reakciójálózat* (*first-order chemical reaction network*, FCRN). A $\langle \mathbf{D}, \mathbf{G}, \mathbf{A}, \mathbf{k} \rangle$ elsőrendű reakciójálózat szpéciéseinek $\mathbf{c} = \mathbf{c}(t)$ koncentrációvektorára a

$$\dot{\mathbf{c}} = \mathbf{F}\mathbf{c} \quad (1)$$

differenciálegyenlet-rendszert írhatjuk fel, ahol $\dot{\mathbf{c}}$ a \mathbf{c} vektor idő szerinti deriváltja, illetve

$$\mathbf{F} = \mathbf{S}^T \text{diag}(k_i) \mathbf{D} \quad (2)$$

az elsőrendű hálózat együttható mátrixa az $\mathbf{S} = \mathbf{G} - \mathbf{D}$ mátrixszal. Fontos megemlíteni, hogy (1)-et csak a $\mathbf{c}(t=0) = \mathbf{c}_0$ kezdeti feltétel birtokában oldhatjuk meg. Ha a $\langle \mathbf{D}, \mathbf{G}, \mathbf{A}, \mathbf{k} \rangle$ elsőrendű reakciójálózatban bármely reakció „megfordítottja” is elsőrendű folyamat, akkor azokat *izomerizációs reakcióknak* nevezzük, $\langle \mathbf{D}, \mathbf{G}, \mathbf{A}, \mathbf{k} \rangle$ vonatkozásában pedig *izomerizációs reakciójálózatról* (*isomerization reaction network*, IRN) beszélünk.

2.2. Sebességi együtthatók becslése elméleti kémiai módszerekkel

A molekulák interkonverziós átalakulásait az ún. *konformációs potenciálisenergia-felületen* (*conformational potential energy surface*, CPES) értelmezzük. A CPES minimumainak és elsőfajú nyeregpontjainak birtokában az \mathcal{S}_{12} átmeneti állapoton keresztül lezajló $\mathcal{R} = \mathcal{S}_1 \rightarrow \mathcal{S}_2$ interkonverziós reakció $k_{\mathcal{R}}(T)$ sebességi együtthatóját az *átmenetiállapot-elmélet* és az ideális gáz közelítés keretein belül az *Eyring–Polányi-egyenlettel* becsülhetjük:

$$k_{\mathcal{R}}(T) = \frac{k_B T}{h} \exp \left\{ -\frac{\Delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(T)}{N_A k_B T} \right\}, \quad (3)$$

ahol N_A , k_B és h az Avogadró-, a Boltzmann- és a Planck-állandó, az \mathcal{R} folyamat T hőmérsékletre vonatkozó $\Delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(T)$ *aktiválási szabadentalpiája* pedig az \mathcal{S}_{12} átmeneti állapot és az \mathcal{S}_1 reaktáns szerkezetéhez tartozó teljes szabadentalpia különbségeként definiálható.

A $\Delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(T)$ aktiválási szabadentalpiát az ún. *fókuszpont analízis* (*focal-point analysis*, FPA) megközelítés keretein belül kvantumkémiai módszerekkel számítjuk, amelyhez a

$$\Delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(T) = \Delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(0) + \delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(T), \quad (4)$$

egyenletet használjuk fel, ahol $\Delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(0)$ a 0 K-es aktiválási szabadentalpia, $\delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(T)$ pedig az aktiválási szabadentalpia termikus korrekciója. A $\Delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(0)$ paramétert a

$$\Delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(0) = \Delta^\ddagger E_{\mathcal{R}} + \Delta^\ddagger E_{\text{ZPE,h},\mathcal{R}} + \delta^\ddagger E_{\text{ZPE,a},\mathcal{R}}, \quad (5)$$

kifejezéssel közelítjük, amelyben $\Delta^\ddagger E_{\text{ZPE,h},\mathcal{R}}$ és $\delta^\ddagger E_{\text{ZPE,a},\mathcal{R}}$ a zéruspont rezgési energia (zero-point /vibrational/ energy, ZPE) harmonikus és anharmonikus járuléka az \mathcal{R} reakcióra nézve, $\Delta^\ddagger E_{\mathcal{R}}$ pedig a teljes aktiválási elektronenergia. A $\Delta^\ddagger E_{\mathcal{R}}$ mennyiségre a jelen doktori munka során alábbi (végtelen bázisra extrapolált) dekompozíciót alkalmazhatjuk:

$$\Delta^\ddagger E_{\mathcal{R}} = \Delta^\ddagger E_{\text{HF},\mathcal{R}} + \delta^\ddagger E_{\text{MP2(fc),}\mathcal{R}} + \delta^\ddagger E_{\text{CCSD(fc),}\mathcal{R}} + \delta^\ddagger E_{\text{CCSD(T)(fc),}\mathcal{R}} + \delta^\ddagger E_{\text{CV},\mathcal{R}}, \quad (6)$$

ahol

- (i) $\Delta^\ddagger E_{\text{HF},\mathcal{R}}$ az aktiválási HF (Hartree–Fock) energia,
- (ii) $\delta^\ddagger E_{\text{MP2(fc),}\mathcal{R}}$ az MP2 (másodrendű Møller–Plesset) perturbációs energiajárulék,
- (iii) $\delta^\ddagger E_{\text{CCSD(fc),}\mathcal{R}}$ a CCSD (*coupled-cluster singles, doubles*) energiajárulék,
- (iv) $\delta^\ddagger E_{\text{CCSD(T)(fc),}\mathcal{R}}$ a CCSD(T) (*coupled-cluster singles, doubles, and perturbative triples*) aktiválási energiajárulék,
- (v) ‘fc’ a befagyasztott mag (*frozen core*) közelítés használatát jelöli,
- (vi) $\delta^\ddagger E_{\text{CV},\mathcal{R}}$ az atomtörzs-atomtörzs és atomtörzs-vegyérték kölcsönhatásokat (*core-core and core-valance correction*, CV) veszi figyelembe, valamint
- (vii) az egyes tagok számítását a konformerek és az átmeneti állapotok ún. *referencia szerkezetein* végezzük el.

A néhány nehézatomból álló molekulák esetén a referencia geometriákat leggyakrabban CCSD(T) módszerrel szokták előállítani. Ez az elméleti szint viszont nagyobb rendszerekre irreálisan hosszú futásidőhöz vezetne, így azt az „olcsóbb” sűrűségfunkcionál technikákkal helyettesítjük, amelyek megfelelő paraméterezés mellett akár a CCSD(T)-hez közeli eredményeket is nyújthatnak „hagyományos” szerkezetű molekulákra.

3. Alkalmazott módszerek

A dolgozatban az egyszerű algebrai eszközökön és az FPA megközelítésen túl a programfejlesztési munkához a Fortran 90 programnyelvet, a kvantumkémiai számításokhoz pedig a Molpro 2012.1 és a Gaussian 09 Rev. E.01 programrendszereket vettük igénybe. A Molpro szoftvert az általunk felállított FPA modellben szereplő CCSD(T) energiák számítására használtuk fel, minden további elektronszerkezet számítását a Gaussian programmal végeztünk el. Az elektronkorrelációs számításokhoz megkötéses HF pályákat alkalmaztunk.

4. Eredmények tézisszerű összefoglalása

4.1. A $\dot{c} = Fc$ egyenletrendszer megoldásának Luther–Rost-féle reprezentációja [1]

A jelen doktori munka első részében a $\dot{c} = Fc$ egyenlet egy egyszerű és elegáns megoldásmódjával (*Luther–Rost-féle reprezentáció*, LRR) foglalkoztunk, amelyet korábban hasonló problémák megoldására vezettek be. Az LRR procedúrát *Leverrier* azon *algoritmusaival* egészítettük ki, amely lehetőséget nyújt arra, hogy az F mátrix karakterisztikus polinomjának együtthatóit előállítsuk.

Rámutattunk arra, hogy a két eljárás kombinációja mind az oktatásban, mind a kutatásban a kinetikai differenciálegyenletek megoldásának egy kényelmesen használható eszközét jelentheti. Miként az Kyurkiev és Markov egy későbbi cikkéből világossá vált, az általunk szorgalmazott eljárás, amely megkerüli az együttható mátrix Jordan-láncainak kissé körülményes alkalmazását, szimbolikus-numerikus számításokra is hasznosnak bizonyult.

Ezt a módszerpárost néhány jellegzetes reakciókinetikai modellen keresztül is tanulmányozhattuk, amelyek közül kettő, a négy- és az ötszögreakció olyan elsőrendű differenciálegyenlet-rendszereket indukáltak, amelyek megoldásai idáig nem voltak lejegyezve az irodalomban. A kidolgozott példákra alapozva azt is előrevetítettük, hogy a K -szögreakciók kinetikai problémáira – a Ruffini–Abel-tétel követkevényeképp – általános egzakt megoldást kizárólag $K \leq 5$ mellett adhatunk.

4.2. Új eredmények az elsőrendű reakcióhálózatok kvalitatív elméletében [2]

A $\dot{c} = Fc$ egyenlet megoldására irányuló konstruktív vizsgálatokat követően figyelmünket az FCRN-ek eddig nem tárgyalt szerkezeti jellemzőire összpontosítottuk. Miután a CRN-ek *felbonthatóságát* értelmeztük, bebizonyítottuk, hogy nemnegatív bal- és jobboldali sztöchiometriai együtthatók esetén egy elsőrendű reakcióhálózat akkor és csak akkor bontható fel, ha annak F mátrixa blokkdiagonalizálható.

Igazoltuk azt is, hogy olyan szubkonzervatív elsőrendű hálózatokban, amelyek nemnegatív egész értékű jobboldali sztöchiometriai együtthatókkal írhatók fel, minden reakciólépésre fennállnak az alábbi, ún. *tömeginkompatibilitási relációk*: (i) a reaktáns moláris tömege egyetlen termék moláris tömegénél sem kisebb, (ii) amennyiben egy termék moláris tömege azonos a reaktánséval, akkor annak jobboldali sztöchiometriai együtthatója 1, illetve (iii) ha valamely termék moláris tömege megegyezik a reaktánséval, úgy más termék nem képződik. Ezek a relációk azt is magukkal vonják, hogy ha egy FCRN-ben nem csak

izomerizációs reakciók fordulnak elő, akkor a kérdéses rendszer \mathbf{F} mátrixa egy alkalmas permutációs mátrix szerinti transzformációval blokktrianguláris alakra hozható.

Harmadszor, megmutattuk, hogy bármely konzervatív FCRN-hez létezik egy lineárisan konjugált, pusztán izomerizációs reakciókból álló hálózat, az ún. *jelölőhálózat*, amely az eredeti hálózat időbeli viselkedését teljes egészében magán viseli („kijelöli”). Ez a jelölőhálózat azt is lehetővé teszi, hogy az IRN-ekre kimondott állításokat tetszőleges konzervatív elsőrendű reakcióhálózatokra átültethessük.

Negyedszer, a sajátértékek szukcesszív leválasztásának elvére hagyatkozva egy olyan eljárást dolgoztunk ki, amellyel az \mathbf{F} mátrix Frobenius-alakjában lévő diagonális blokkok sajátérték-problémájának *algebrai megoldhatóságáról* meggyőződhetünk. Az utóbbi kapcsán a diagonális blokkok sajátértékeinek egzakt előállíthatóságára egy elégséges feltételt is kimondtunk: ha egy ilyen blokk legfeljebb négy nemzérus sajátértékkel bír, akkor azok a polinomiális egyenletek jól ismert megoldóképleteivel állíthatók elő.

4.3. Fortran nyelvű programok elsőrendű reakcióhálózatok kinetikai szimulációjára

A kutatómunka következő fázisában két Fortran nyelvű programot (`fcrn_lrr` és `fcrn`) hoztunk létre, amelyek működését konkrét példákon tanulmányoztuk. Voltaképpen mindkét kód az FCRN-ek szpécieszeinek koncentrációit számítja az egyes mintavételi időpontokban, viszont a felhasznált módszerek és a működési feltételek tekintetében lényeges különbségek fedezhetők fel a két program között.

Ami az alkalmazott módszereket illeti, az `fcrn_lrr` szoftver alappilléret az LRR protokoll és a Leverrier algoritmus együttese, valamint az algebrai egyenletek gyökképletei képzik, szemben az `fcrn` kóddal, amely az \mathbf{F} mátrix sajátértékeit a legkorszerűbb numerikus stratégiákkal (Biloti–Matioli–Yuan eljárás, Bini–Gemignani–Tisseur módszer) lokalizálja, a koncentrációkat pedig az együttható mátrix spektrálfelbontásából fejezi ki. A működési körülményekkel kapcsolatosan érdemes megemlítenünk, hogy amíg az `fcrn_lrr` program olyan FCRN-ek szimulációjára készült, amelyekben az \mathbf{F} mátrix minden sajátértéke egzaktul megadható, a Krylov- és Vandermonde-mátrixok pedig stabilan számíthatók, addig az `fcrn` szoftvert, amely teszteléseink alatt 300 komponensig kellően robusztusnak minősült, pusztán diagonalizálható \mathbf{F} mátrixok esetén használhatjuk, ami a szokványos kinetikai problémákra általában teljesül. Bár nem kizárt, hogy a Krylov- és a Vandermonde-mátrixok számítása skálázással stabilizálható, e kérdés tisztázása további vizsgálódásokra tart igényt.

4.4. Az *n*-bután és *n*-pentán interkonverziós kinetikája [3]

Végül az *n*-bután és az *n*-pentán *interkonverziós paramétereire* (aktiválási energiák, aktiválási szabadentalpiák 0 és 298 K-en, illetve sebességi együtthatók 298 K-en) készítettünk becsléseket az FPA megközelítés alapján. E projekt keretein belül az *n*-alkánok interkonverziós kinetikájának kvantumkémiai modellezésére egy olyan FPA protokollt (FPA_{na}) építettünk fel, amely az említett kinetikai mennyiségeket a lehető legkisebb futásidejű elektronszerkezet-számító technikák segítségével az elérhető legkisebb bizonytalansággal közelíti. Az FPA_{na} módszerrel nyert legjobb becsléseket a **4.4. táblázatban** összegeztük, ahol *t* és *g*[±] az *n*-bután egyedi konformereit szimbolizálja, a *tt*, *tg*[±], *g*[±]*g*[±] és *g*[±]*x*[∓] szpecészek pedig az *n*-pentán egyedi konformereit jelölik.

\mathcal{R}	$\Delta^\ddagger E_{\mathcal{R}} / \text{cal mol}^{-1}$	$\Delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(0) / \text{cal mol}^{-1}$	$\Delta^\ddagger G_{\mathcal{R}}(298 \text{ K}) / \text{cal mol}^{-1}$	$k_{\mathcal{R}}(298 \text{ K}) / \text{s}^{-1}$
$t \rightarrow g^\pm$	3331(30)	3347(95)	3901(158)	$103(7) \times 10^7$
$g^\pm \rightarrow t$	2738(50)	2652(90)	3216(148)	$33(2) \times 10^8$
$g^\pm \rightarrow g^\pm$	4840(47)	4916(91)	5499(151)	$69(4) \times 10^6$
$tt \rightarrow tg^\pm$	3124(28)	3115(96)	3327(146)	$27(2) \times 10^8$
$tg^\pm \rightarrow tt$	2524(42)	2412(91)	3047(153)	$44(3) \times 10^8$
$tg^\pm \rightarrow g^+g^+$	2930(36)	2932(106)	3716(190)	$14(1) \times 10^8$
$g^+g^+ \rightarrow tg^+$	2597(38)	2404(77)	2551(112)	$101(5) \times 10^8$
$g^+g^+ \rightarrow g^+x^-$	6162(55)	6110(143)	6186(179)	$22(2) \times 10^6$
$g^+x^- \rightarrow g^+g^+$	4258(33)	4236(77)	4723(143)	$26(1) \times 10^7$
$tg^\pm \rightarrow g^+x^-$	2784(30)	2809(110)	3635(200)	$16(1) \times 10^8$
$g^+x^- \rightarrow tg^\pm$	544(9)	404(17)	1004(86)	$137(5) \times 10^9$
$tg^\pm \rightarrow tg^\pm$	423(6)	212(38)	682(118)	$24(1) \times 10^{10}$
$g^+x^- \rightarrow g^+x^-$	4763(56)	4829(101)	5497(170)	$69(5) \times 10^6$

4.4. táblázat: FPA_{na} becslések az egyedi *n*-bután és *n*-pentán konformerek gázfázisú interkonverziós paramétereire. A becsült értékek bizonytalanságait zárójelben tüntettük fel.

Az FPA_{na} eljárás során (i) DSD-PBEP86-D2/cc-pVTZ szintű referencia geometriákat állítunk elő, (ii) az így kapott szerkezeteken *single-point* energiákat számítunk az MP2(fc)/cc-pV5Z, CCSD(T)(fc)/cc-pVXZ, MP2(full)/cc-pCVXZ és az MP2(fc)/cc-pCVXZ (*X* = 2,3,4) módszerekkel, (iii) harmonikus rezgési analízist végzünk a DSD-PBEP86-D2/cc-pVXZ (*X* = 2,3) funkcionálokkal, majd (iv) HDCPT2 perturbációs számítást hajtunk végre MP2(fc)/6-31G* szintű kvartikus erőterek előállításával. Tekintve, hogy a kérdéses FPA modell az *n*-bután és az *n*-pentán interkonverziós paramétereire nagy pontosságú becsléseket adott, joggal várhatjuk, hogy az FPA_{na} protokoll hosszabb szénláncú *n*-alkánok konformációs sajátságainak termokémiai és kinetikai modellezésében is jól fog teljesíteni.

5. Az értekezés alapjául szolgáló közlemények

[1] Simple algebraic solutions to the kinetic problems of triangle, quadrangle, and pentangle reactions

R. Tóbiás and G. Tasi,

Journal of Mathematical Chemistry, **2016**, *54*, 85.

IF₂₀₁₆ = 1.308

Független hivatkozások száma: 4

[2] First-order chemical reaction networks I: theoretical considerations

R. Tóbiás, L. L. Stacho, and G. Tasi,

Journal of Mathematical Chemistry, **2016**, *54*, 1863.

IF₂₀₁₆ = 1.308

Független hivatkozások száma: 1

[3] Definitive thermochemistry and kinetics of the interconversions among conformers of *n*-butane and *n*-pentane

R. Tóbiás, A. G. Császár, L. Gyevi-Nagy, and G. Tasi,

Journal of Computational Chemistry, **2017** (*in press*).

IF₂₀₁₆ = 3.229

Független hivatkozások száma: 0

6. Az értekezés témájához nem kapcsolódó közlemények

[1] Vector algebra and molecular symmetry: a tribute to Professor Josiah Willard Gibbs

G. Tasi, L. Gyevi-Nagy, R. Tóbiás, and T. S. Tasi,
Journal of Mathematical Chemistry, **2013**, 51, 2187.

IF₂₀₁₃ = 1.270

Független hivatkozások száma: 0

[2] Cycle bases to the rescue

R. Tóbiás, T. Furtenbacher, and A. G. Császár,
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, **2017**, 203, 557.

IF₂₀₁₆ = 2.419

Független hivatkozások száma: 0

[3] Critical evaluation of measured rotational-vibrational transitions of four sulfur isotopologues of S¹⁶O₂

R. Tóbiás, T. Furtenbacher, A. G. Császár, O. V. Naumenko, J. Tennyson, P. Kumar,
and B. Poirier,
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, **2018** (*under revision*).

7. Konferencia részvételek

[1] Egzotikus izomerizációs reakciók – megoldás egy általános reakciótípusra?

R. Tóbiás and G. Tasi,

XXXV. Kémiai Előadói Napok, KEN

Szeged, **2012** (szóbeli előadás)

[2] Experimental rotation-vibration transitions and energy levels for sulfur dioxide

T. Furtenbacher, R. Tóbiás, A. G. Császár, B. Poirier, J. Tennyson, V.-M. Hornemann,
O. V. Naumenko, I. A. Vasilenko, A. Z. Fazliev

The 25th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy, HRMS 2017

Helsinki, Finland, **2017** (poszter)

Összes referált közlemény: 5	ebből az értekezéshez kapcsolódik: 3
Összesített impakt faktor: 9.534	ebből az értekezéshez kapcsolódik: 5.845
Összes független hivatkozás: 5	ebből az értekezéshez kapcsolódik: 5