

A kutatás eredményei

Sűrűségfunkcionál és sűrűségmátrix elméletek (K 67923 sz. OTKA pályázat)

Előzmények, a kutatás célja

A sűrűségfunkcionál és a sűrűségmátrix elméletek területén folytattunk kutatásokat.

A sűrűségfunkcionál elmélet szerint a rendszer alapállapota egyértelműen jellemezhető az elektronsűrűséggel. Az elmélet Thomas¹, Fermi² és Dirac³ munkásságával indult. Magyar kutatóknak is jelentős szerepük volt az elmélet létrejöttében^{4 5}. Az elmélet kidolgozásáért⁶ Walter Kohn 1998-ban kémiai Nobel-díjat kapott.

A pályázat keretében a következő problémákkal kívántunk foglalkozni:

“A pályázat elsősorban olyan kutatásokra fog összpontosítani, melyek mélyebb bepillantást engednek a kinetikus és korrelációs funkcionálokba. Nemrégiben a sűrűség skálázás segítségével új elméletet dolgoztunk ki az elektronkorreláció tárgyalására. Ezen elmélet továbbfejlesztésére és gerjesztett állapotokra valamint multiplettekre való kiterjesztésére fogunk összpontosítani. A pályázat másik célja a másodrendű sűrűség mátrix funkcionál elmélet továbbfejlesztése.”

A kitűzött célokat megvalósítottuk. Elvi, elméleti alapkutatás történt, az eredményeket cikkekben jelentettük meg. Összesen 38 cikk jelent meg rangos nemzetközi folyóiratban (Phys. Rev. A, Phys. Lett. A, J. Chem. Phys., Chem. Phys. Lett., J. Phys. Chem. A, J. Math. Phys. J. Stat. Mech.) 4 könyvrészlet készült. Ebből 1 könyvrészlet megjelenés alatt van. Számos meghívott előadásra került sor.

¹L.H. Thomas: Proc. Camb. Phil. Soc. **23**, 542 (1926).

²E. Fermi: Z. Phys. **48**, 73 (1928).

³P.A.M. Dirac: Proc. Camb. Phil. Soc. **26**, 376 (1930).

⁴P. Gombás: Die Statistische Theories Des Atoms und ihre Anwendungen (Springer-Verlag, Wien, 1949).

⁵R. Gáspár: Acta Phys. Hung. **3**, 263 (1954); Citation Classics **38**, Sept 21 (1992).

⁶P. Hohenberg - W. Kohn: Phys. Rev. **B 136**, 864 (1964); W. Kohn - L.J. Sham: Phys. Rev. **140**, A1133 (1963).

Új tudományos eredmények

Korreláció

Még az előző OTKA pályázatban a sűrűségskálázást felhasználva általánosított Kohn-Sham-egyenleteket vezettünk le. Az új Kohn-Sham-rendszerben az elektronsűrűség nem egyezik meg a valódi rendszer elektronsűrűségével, (mint az eredeti Kohn-Sham-elméletben) hanem annak konstans szorosa. A szorzófaktort úgy választjuk meg, hogy az új Kohn-Sham-rendszerben a korrelációs energia eltűnjön. Így csak a (persze megváltozott) kicserélődési energiát kell kiszámítani. Erre viszont nagyon jó, közel egzakt eredményt adó módszerek állnak rendelkezésre.

A jelen pályázat keretében a módszer négy általánosítására került sor:

1. Multiplettek

Korábban már kidolgoztunk egy módszert atomi multiplettek vizsgálatára a sűrűségfunkcionál elmélet keretei között. A degenerált állapotok új tárgyalása azon alapszik, hogy az azonos energiához tartozó hullámfüggvények által kifejlesztett altérhez rendelünk egy sűrűséget. Az energia ezen sűrűség funkcionálja. Levezettük a megfelelő Kohn-Sham-egyenleteket és vizsgáltuk a Kohn-Sham-potenciált. Általánosítottuk az optimalizált potenciál módszert (OPM)⁷ és a KLI (Krieger-Li-Iafrate)⁸ közelítést. A korreláció kezelése azonban akkor még nem volt megoldva. Ezért a jelen pályázat keretében általánosítottuk a módszert a sűrűségskálázás segítségével. Bebizonyítottuk, hogy a skálafaktor megválasztható úgy, hogy az új, a sűrűségskálázással definiált Kohn-Sham-rendszerben a korrelációs energia eltűnjön [1].

2. Gerjesztett állapotok

Általánosítottuk az egyetlen gerjesztett állapotra vonatkozó, Coulomb-rendszerekre érvényes (Nagy) elméletet⁹ a sűrűségskálázás segítségével. Levezettük az új, megváltozott sűrűségnek megfelelő Kohn-Sham-egyenleteket [2]. Általánosítottuk és bebizonyítottuk azt a tételt, mely szerint a skálafaktor megválasztható úgy, hogy az új, a sűrűségskálázással definiált Kohn-Sham-rendszerben a korrelációs energia eltűnjön. Megtörtént az optimalizált potenciál módszer (OPM) és a KLI (Krieger-Li-Iafrate) közelítés gerjesztett állapotra való kiterjesztése is.

⁷R. T. Sharp and G. K. Horton, Phys. Rev. **A 30**,317(1953); K. Aashamar, T. M. Luke and J. D. Talman, At. Data Nucl. Data Tables **22** 443 (1978).

⁸J. B. Krieger, Y. Li and G. J. Iafrate, Phys. Lett. A **146**,256(1990).

⁹Á. Nagy: Int. J. Quantum Chem. **70** 681 (1998).

3. Pársűrűség elmélet

A sűrűségskalázás mintájára bevezettük a pársűrűségskalázást [3]. Megmutattuk, ennek segítségével kapcsolat teremthető a sűrűségfukcionál és a sűrűségmátrix elméletek között. A sűrűség ill. a pársűrűségskalázással levezethetők az Euler-egyenletek mindkét elméletben. A sűrűségfukcionál elmélet Paulipotenciálja (energiája) megadható a skalázott és az eredeti kicserélődési-korrelációs potenciálok (energiák) különbségként.

4. Többkomponensű sűrűségfukcionál elmélet

A sűrűségfukcionál elméletben többnyire a Born-Oppenheimer-közelítést alkalmazzuk. Sok olyan jelenség van azonban, melyek tárgyalására ez nem kielégítő. Kreibich és Gross¹⁰ kidolgozták a többkomponensű sűrűségfukcionál elméletet, mely egzaktul leírja mind az elektronok mind pedig a magok mozgását. Bár maga az elmélet egzakt, a fukcionálok egzakt alakját nem ismerjük. Így az elektron-korrelációs energiafukcionál alakja is ismeretlen. Ezért a jelen pályázat keretében általánosítottuk a módszert az elektron sűrűségskalázás segítségével [4]. Bebizonyítottuk, hogy a skálafaktor megválasztható úgy, hogy az elektron korrelációs energia eltűnjön.

Ez utóbbi témához kapcsolódnak Vibók Ágnes professzor irányításával elért egyes fontos eredmények: Biológiaiag fontos molekulák pl. a tetrahydrocannabinol (THC) molekula fotostabilitását vizsgáltuk. Megmutattuk, hogy a fotostabil viselkedés erősen összefügg a molekula gyűrűs szerkezetével, s ezen belül is az oxigén atomot tartalmazó hat atomos gyűrűvel. Az időtől függő sűrűségfukcionál elmélet segítségével sikerült meghatározni a molekula alap- és első gerjesztett elektronállapotai között megjelenő konikus kereszteződést. Ez a konikus kereszteződés biztosítja, hogy a gerjesztést követően a molekula nagyon gyorsan (femtosekundos időskálán) sugárzás nélkül, a környezetét felmelegítve visszajusson alapállapotába [5, 6].

Itt említjük meg, hogy vizsgáltuk néhány kémiai mennyiség skalázását is [7].

A kicserélődési potenciálra vonatkozó eredmények:

Megadtuk az egzakt aszimptotikus megoldását a kicserélődési potenciálra vonatkozó integrálegyenletnek nagy rendszámú Be-szerű ionokra [8]. Megadtunk egy a kicserélődési potenciálra vonatkozó közelítő összefüggést is [9].

A sűrűségmátrix fukcionál elmélet

A sűrűségfukcionál elmélet egyik általánosítása a sűrűségmátrix fukcionál (vagy pársűrűség) elmélet. Még az előző OTKA pályázat keretében megmutattuk, hogy alapállapotban a pársűrűség meghatározható egy kételektronos probléma

¹⁰T. Kreibich - E. K. U. Gross: Phys. Rev. Lett. **86**, 2984 (2001).

megoldásával. Tehát tetszőleges, páros számú elektront tartalmazó rendszer tárgyalása kételektron problémára redukálható. A kétrészecske egyenlet tartalmaz egy olyan potenciált, melynek egzakt alakja nem ismert és melyről beláttuk, hogy teljesen a kinetikus energiából származik. Ezt a potenciált a sűrűségfüggvény elméletből vett analógia alapján Pauli-potenciálnak neveztünk el.¹¹ Egzakt differenciális és integrális relációkat vezettük le ezen potenciálra: differenciális viriáltétel, Hiller-Sucher-Feinberg azonosság a pársűrűsége [10], elektron-elektron csúcs (cusp) feltétel, és meghatároztuk a Pauli-potenciál aszimptotikus ($r \rightarrow \infty$) viselkedését [11, 12].

Megalkottuk a He-szerű ionok Chandrasekhar által javasolt 3-paraméteres, variációs korrelált hullámfüggvényéhez tartozó Hamilton-operátort és kidolgoztunk egy új módszert a Pauli-potenciál meghatározására [13, 14, 15].

Kinetikus energia és információ-mértékek

Napjainkban az elektronszerkezet-számítások többnyire a sűrűségfüggvény elmélet Kohn-Sham-egyenleteinek megoldásával történnek. Ennek az az oka, hogy nem ismerjük a kinetikus energiafüggvényt (mint a sűrűségfüggvény elméletét) ill. nem ismertek kielégítő pontosságú közelítések. A kinetikus energiát a pályák funkcionáljaként ismerjük csak. Általában annyi Kohn-Sham-egyenletet kell megoldani, ahány elektron van a vizsgált rendszerben. A kinetikus energiafüggvény ismeretében viszont elegendő mindig csak egyetlen egyenletet, az ún. Euler-egyenletet megoldani akárhány elektron is van jelen. Egy ilyen pályafüggetlen módszer lehetővé teszi igen nagy rendszerek tárgyalását is. Ezért van nagy jelentőségük az ilyen irányú kutatásoknak.

A kinetikus energiafüggvény problémája megoldatlan több mint 80 éve. (Thomas és Fermi adták meg az első közelítést még jóval a sűrűségfüggvény elmélet egzakt megalapozása előtt, ez a Thomas-Fermi-modell azonban nagyon pontatlan.) A pályázat legfontosabb eredménye, hogy sikerült jelentős előrehaladást elérni a kinetikus energia problémában: Általánosítottuk a Nagy-March differenciális viriáltételt sokaságra és ebből elsőrendű differenciálegyenletet vezettünk le a sokaság kinetikus energiafüggvényderiváltjára gömbszimmetrikus rendszerekre [16, 17, 18]. Az egyenlet megoldásának egy speciális esete megadja az eredeti kinetikus energiát. Ez az eredeti probléma egzakt megoldását jelenti, de csak gömbszimmetrikus esetben. Az általános eset továbbra is megoldatlan.

A kinetikus energia más szempontból is fontos. Kiderült ugyanis, hogy nem az elektronsűrűség az egyetlen mennyiség, mely egyértelműen jellemez egy Coulomb rendszert. Vannak más ilyen mennyiségek is és ilyen a lokális kinetikus energia is [20, 16].

¹¹Á. Nagy, Phys. Rev. A **66**, 022505 (2002).

Vizsgáltuk a kinetikus energia sűrűség és a Pauli-potenciál kapcsolatát [19, 21, 22]. Kiindulva a differenciális viriátétekből és a Hiller-Sucher-Feinberg azonosságból egzakt összefüggést vezetünk le a kicserélődési-korrelációs potenciál deriváltjára.

Sears, Parr és Dinur már több mint három évtizede felhívta a figyelmet a kinetikus energia és a Fisher-információ kapcsolatára. Azóta sokan vizsgálták a sűrűségfüggvény elmélet és a különböző információ-mértékek kapcsolatát. Az elektronsűrűség, ha 1-re normaljuk valószínűségűrség is, és a Fisher, Shannon vagy Rényi információk a sűrűség függvényeik.

Több érdekes eredményt is közöltünk a Fisher-információ és a kinetikus energia kapcsolatáról. Megmutattuk, hogy az egy-elektron Fisher-információk összege a teljes rendszerre vonatkozó Fisher-információ és a kvantum és a klasszikus szórásnégyzetek különbségének az összege. Levezettük a Stam-féle egyenlőtlenségek általánosítását [23]. Vizsgáltuk a pársűrűségből konstruált Fisher-mértékek kapcsolatát [24].

Megmutattuk, hogy a lokális hullámszámvektor kapcsolatot teremt a lokális Shannon- és a Fisher-információ között [25] és a Shannon-féle entrópiaösszeg jelzi a kvantum fázisátmenetet [26].

A Fisher-Shannon információ-szorzatot és síkot vizsgáltuk analitikusan atomokra a Thomas-Fermi-Gáspár statisztikus modell keretében [27]. A Hartree-Fock-sűrűségekkel való összehasonlítás világosan mutatja, hogy a statisztikus modell nem jeleníti meg az atomi héjszerkezetet.

Az információelméleti vizsgálataink fontos eredménye a kötési entrópia fogalmának bevezetése [28], valamint az időtől függő sűrűségfüggvény elmélet 'termodinamikai' formalizálása [29].

Számos fontos eredményt kaptunk a Rényi-információval kapcsolatban. Vizsgáltuk a többelektronos rendszerek Rényi-információra vonatkozó határozatlansági relációit koordináta- és impulzus-térben. Tanulmányoztuk a Fisher- és Rényi-információ kapcsolatát [30].

Atomok Rényi-információit határoztuk meg koordináta- és impulzustérben. A koordináta- (impulzus)térbeli Rényi-információ $\alpha \leq 1$ ($\alpha \geq 1$) esetén mutat héjszerkezetet, ahol α a Rényi-paraméter [31]. Koordináta- és impulzustérbeli relatív Rényi-információt határoztunk meg atomokra [32]. Referenciaként H-szerű modell-sűrűségeket alkalmaztunk. Megmutattuk, hogy a Rényi-információ jelzi a kvantum fázisátmenetet [33].

Rényi-entrópiát defináltuk a fázistérben és egyenlőtlenségeket vezetünk le rá [34].

Feltártuk a statisztikus komplexitás és a Rényi-információ kapcsolatát [35]. Megadtuk az LMC bonyolultsági mérték előbb egy-paraméteres [36], majd két-

paraméteres általánosítását [37]. Ez utóbbi, a Journal of Mathematical Physics-ben megjelent cikket a Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology 2010 januári és a Virtual Journal of Quantum Information 2010 januári számába is bevették. (Ez a cikk egyike volt a Journal of Mathematical Physics folyóiratnál a 20 leggyakrabban letöltött cikknek 2010 januárjában.) Majd, relatív statisztikus bonyolultsági mértéket definiáltunk [38].

A maximális Rényi-információ elvet alkalmaztuk a Thomas-Fermi-modell általánosítására [39]. Feltártuk a dimenzió és a Rényi-paraméter kapcsolatát. Vizsgáltuk az energia és a kémiai potenciál kapcsolatát is [40].

Négy könyvrészlet készült el. Ezekből kettő a sűrűségskalázás egy-egy speciális kérdéséről tárgyalja [2, 4], egy a gerjesztett állapotokra [41], egy pedig a Rényi-információra [42] vonatkozó kutatásaink egy részét foglalja össze.

Nemzetközi együttműködések

Kutatásainkat részben nemzetközi együttműködésben valósítottuk meg. 25 éve folytatunk közös kutatásokat N. H. March oxfordi professzorral. Számos közös cikk készült. Újabb keletű gyümölcsöző együttműködés történik E. Romera granadai professzorral.

Együttműködő partnerek:

C. Amovilli (Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Pisa, Pisa, Italy)

P. W. Ayers, Department of Chemistry, McMaster University, Hamilton, Ontario, L 8S 4M1, Canada)

M. Levy (Department of Chemistry, Duke University, Durham, North Carolina, USA)

S. B. Liu, Renaissance Computing Institute (RENCI), University of North Carolina, Chapel Hill, USA)

R. López-Ruiz (DIIS and BIFI, Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza, E-50009 Zaragoza, Spain)

N. H. March (University of Oxford, Oxford, England and Department of Physics, University of Antwerp, Antwerp, Belgium)

E. Romera (Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear and Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Universidad de Granada, Granada, Spain)

J. Sañudo (Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Extremadura, E-06071 Badajoz, Spain)

K. D. Sen (School of Chemistry, University of Hyderabad, Hyderabad, India)

V. G. Tsirelson (Quantum Chemistry Department, Mendeleev University of Chem-

ical Technology, Miusskaya Sq. 9, Moscow, 125047, Russia)

A pályázat megvalósítása során az OTKA-tól engedélyt kértünk és kaptunk a költségvetés módosítására. Sikerült a külföldi konferencia részvételeket az eredetileg tervezettnél kevesebb napidíjjal megvalósítani. Az így megspórolt napidíj átcsoportosításával egy, időközben tönkrement munkaállomás helyett vettünk újat.

Debrecen, 2012. január 25.

Dr. Nagy Ágnes
egyetemi tanár
témavezető

Publikációk

- [1] Á. Nagy: Density Scaling for Multiplets, *J. Phys. B* **44** (2011) 035001.
- [2] Á. Nagy: Density Scaling for Excited States, in *Progress in Theoretical Chemistry and Physics* ed. P. Hoggan, (Springer, Berlin,2011)
- [3] Á. Nagy: Density and pair-density scaling *Phys. Rev. A* **84** (2011) 032506.
- [4] Á. Nagy: Electron Density Scaling - An Extension to Multicomponent Density Functional Theory, in *Theoretical and Computational Developments in Modern Density Functional Theory* ed. A. K. Roy (Nova Science Publishers, NY, USA, 2012) nyomdában.
- [5] C. Woywod- A. Papp- G. J. Halász -Á. Vibók: Theoretical investigation of the electronic spectrum of pyrazine. *Theor. Chem. Acc.* **125** (2010) 521.
- [6] G. J. Halász - A. L. Sobolewski -Á. Vibók: Radiationless decay of excited states of tetrahydrocannabinol through the S1- S0(conical) intersection. *Theor. Chem. Acc.* **125** (2010) 503.
- [7] N. H. March - Á. Nagy: Scaling of some chemical properties of tetrahedral and octahedral molecules plus almost spherical C and B cages, *J. Math. Chem.* **49** (2011) 2268.

- [8] I. A. Howard - N. H. March - Á. Nagy: Exact asymptotic solution of the Della Sala-Görling integral equation for the exchange-only potential for Be-like atomic ions at large Z , Phys. Lett. A 372 (2008) 3256.
- [9] N. H. March -Á. Nagy: Proposed approximate relation in inhomogeneous electron liquids between exchange-only potential and its Slater counterpart, Phys. Chem. Liq. 48 (2010) 648.
- [10] Á. Nagy - C. Amovilli: Exact differential and integral constraints for the Pauli potential in the pair density functional theory, Chem. Phys. Lett. 469 (2009) 353.
- [11] Á. Nagy - C. Amovilli: Electron-electron Cusp Condition and Asymptotic Behaviour for the Pauli Potential in Pair Density Functional Theory: J. Chem. Phys. 128 (2008) 114115.
- [12] Á. Nagy - C. Amovilli: Ground- and excited-state cusp conditions for the pair density, Phys. Rev. A 82 (2010) 042510.
- [13] C. Amovilli - N. H. March - I.A. Howard - Á. Nagy: Exact Hamiltonian for an analytic correlated ground-state wave function for He-like ions, Phys. Lett A372 (2008) 4053.
- [14] C. Amovilli - N. H. March -Á. Nagy: Exact integral relation between the triplet correlation function in the ground state of the completely polarized homogeneous electron fluid and the pair function: comparison with the classical liquid argon result, Phys. Chem. Liq. 47 (2009) 5.
- [15] C. Amovilli -Á. Nagy: Modelling the Pauli Potential in the Pair Density Functional Theory, J. Chem. Phys. 129 (2008) 204108. Erratum: “Modelling the Pauli Potential in the Pair Density Functional Theory” J. Chem. Phys. 132 (2010) 109902.
- [16] Á. Nagy: Alternative descriptors of Coulomb systems and their relationship to the kinetic energy Chem. Phys. Lett. 460 (2008) 343.
- [17] Á. Nagy: The Pauli potential from the differential virial theorem, Int. J. Quant. Chem. 110 (2010) 2117.
- [18] Á. Nagy: Functional derivative of the kinetic energy functional for spherically symmetric systems, J. Chem. Phys. 135 (2011) 044106.
- [19] N. H. March -Á. Nagy: Exact integral constraint requiring only the ground-state electron density as input on the exchange-correlation force $-\partial V_{xc}(r)/\partial r$ for spherical atoms, J. Chem. Phys. 129 (2008) 194114.

- [20] P. W. Ayers - Á. Nagy: Alternatives to electron density for describing Coulomb systems J. Chem. Phys. 126 (2007) 144108.
- [21] N. H. March - Á. Nagy: Differential virial theorem in DFT in terms of the Pauli potential for spherically symmetric electron densities: illustrative example for the family of Be-like atomic ions, Phys. Rev. A 78 (2008) 044501.
- [22] N. H. March - Á. Nagy: The Pauli potential in terms of kinetic energy density and electron density in the leading Coulombic term of the non-relativistic $1/Z$ expansion of spherical atomic ions Phys. Rev. A 81 (2010) 014502.
- [23] Á. Nagy: Fisher Information and Steric Effect Chem. Phys. Lett. 449 (2007) 212.
- [24] Á. Nagy and E. Romera: Relation between Fisher measures of information coming from pair distribution functions, Chem. Phys. Lett. 490 (2010) 242.
- [25] Á. Nagy - S. B. Liu: Local wave-vector, Shannon and Fisher Information, Phys. Lett. A 372 (2008) 1654.
- [26] E. Romera - M. Calixto - Á. Nagy: Entropic uncertainty and the quantum phase transition in the Dicke model, Eur. Phys. Lett. nyomdában.
- [27] J. B. Szabó - K. D. Sen - Á. Nagy: The Fisher-Shannon information plane for atoms, Phys. Lett. A 372 (2008) 2428.
- [28] V. G. Tsirelson - Á. Nagy: Binding entropy and its application to solids, J. Phys. Chem. A 113 (2009) 9022.
- [29] Á. Nagy: Time-dependent density functional theory as thermodynamics, J. Mol. Struct Theochem 943 (2010) 48.
- [30] E. Romera - Á. Nagy: Fisher-Rényi entropy product and information plane, Phys. Lett. A 372 (2008) 6823.
- [31] E. Romera - Á. Nagy: Rényi information of atoms Phys. Lett. A 372 (2008) 4918.
- [32] Á. Nagy - E. Romera: Relative Rényi entropy for atoms, Int. J. Quant. Chem. 109 (2009) 2490.
- [33] E. Romera - Á. Nagy: Rényi entropy and quantum phase transition in the Dicke model, Phys. Lett. A 375 (2011) 3066.
- [34] I. Hornyák - Á. Nagy: Inequalities for Phase-space Rényi entropies, Int. J. Quantum Chem. 112 (2012) 1285.

- [35] Á. Nagy - K. D. Sen - H. E. Montgomery: LMC complexity for the ground states of different quantum systems, *Phys. Lett. A* 373 (2009) 2552.
- [36] E. Romera, R. López-Ruiz -J. Sanudo and Á. Nagy: A generalized statistical complexity and Fisher-Rényi product in the H-atom, *Int. Rev. Phys.* 3 (2009) 207.
- [37] R. López-Ruiz- Á. Nagy- E. Romera and J. Sanudo: A generalized statistical complexity measure: Applications to quantum systems *J. Math. Phys.* 50 (2009) 123528.
- [38] E. Romera - K. Sen - Á. Nagy: A generalized relative complexity measure, *J. Stat. Mech.* P09016 (2011) doi:10.1088/1742-5468/2011/09/P09016
- [39] Á. Nagy - E. Romera: Maximum Rényi entropy principle and the generalized Thomas-Fermi model, *Phys. Lett. A* 373 (2009) 844.
- [40] N. H. March - Á. Nagy: Some model inhomogeneous electron liquid in D dimensions: relation between energy and chemical potential and a spatial generalization of Kato's nuclear cusp theorem, *Phys. Chem. Liq.* 2011 (2011) 1.
- [41] Á. Nagy - M. Levy - P. W. Ayers: Time-independent theories for a single excited state, in *Theory of Chemical Reactivity* ed. by P. K. Chattaraj (Taylor and Francis, London, 2009)p. 121
- [42] Á. Nagy and E. Romera: Rényi entropy and complexity, in *Statistical Complexity* ed. K. D. Sen, (Springer, Berlin, 2011) pp 215.