

W roku **2009** pracownicy **Zakładu Chemii Teoretycznej** byli autorami lub współautorami **11** artykułów recenzowanych w czasopismach i wydawnictwach o zasięgu światowym oraz **jednej** publikacji książkowej

.

PUBLIKACJA KSIĄŻKOWA

Autor: *M. Jaworska, M. Musiał, T. Pluta*

Tytuł: *Wybrane zagadnienia chemii kwantowej*

Wydawca, miejsce wydania: *Uniwersytet Śląski, Katowice 2009*

Liczba stron: *256*

ARTYKUŁY WYKRUKOWANE

Autor: *M. Musiał*

Tytuł: *Efficient realization of the Fock-space coupled-cluster method with connected triplet excitations*

Czasopismo: *Chemical Physics Letters*

Rok wydania, tom, strony: 2009, 470, 358-362

Autor: *M. Musiał, S. A. Kucharski, P. Zerzucha, T. Kuś, R. J. Bartlett*

Tytuł: *Excited and ionized states of the ozone molecule with full triplet coupled cluster π cluster methods*

Czasopismo: *The Journal of Chemical Physics*

Rok wydania, tom, strony: 2009, 131, 194101-1-10

Autor: *R. Podeszwa, B. M. Rice, K. Szalewicz*

Tytuł: *Crystal structure π prediction for cyclotrimethylene trinitramine (RDX) from first principles*

Czasopismo: *Physical Chemistry Chemical Physics*

Rok wydania, tom, strony: 2009, 11, 5512-5518

Autor: *L. M. C. Janssen, G. C. Groenenboom, A. van der Avoird, P. S. Żuchowski, R. Podeszwa*

Tytuł: *Ab initio potential energy surfaces of $\text{NH}({}^3\Sigma^-)$ - $\text{NH}({}^3\Sigma^-)$ with analytical long range*

Czasopismo: *The Journal of Chemical Physics*

Rok wydania, tom, strony: 2009, 131, 224314-1-9

Autor: K. Pernal, **R. Podeszwa**, K. Patkowski, and K. Szalewicz

Tytuł: *Dispersionless density functional theory*

Czasopismo: *Physical Review Letters*

Rok wydania, tom, strony: 2009, 103, 263201-1-4

Autor: A. Kumar, E. Ch. Lee , S. Lee , **M. Kołaski**

Tytuł: *Ab initio molecular dynamics simulations of excited hydrogen halides and methyl halides*

Czasopismo: *Chemical Physics Letters*

Rok wydania, tom, strony: 2009, 482, 189–194

Autor: S. Krompiec, R. Penczek, M. Krompiec, **T. Pluta**, H. Ignasiak, A. Kita, S. Michalik, M. Matlengiewicz, M. Filapek

Tytuł: *Transition Metals for Conjugation of Polyunsaturated Acids and their Esters*

Czasopismo: *Current Organic Chemistry*

Rok wydania, tom, strony: 2009, 13, 896-913

Autor: B. Machura, **M. Jaworska**, **P. Lodowski**, J. Kusz, R. Kruszynski, Z. Mazurak
Tytuł: Synthesis, spectroscopic characterization, X-ray structure and DFT calculations of $[\text{Re}(\text{CO})_3\text{L}_2\text{Cl}]$ ($\text{L} = 1,2,4\text{-triazolo-[1,5-a]pyrimidine}$)
Czasopismo: Polyhedron
Rok wydania, tom, strony: 2009, 28, 2571–2578

Autor: T. Andruniów, **M. Jaworska**, **P. Lodowski**, M. Z. Zgierski, R. Dreos, L. Randaccio, P. M. Kozłowski
Tytuł: Time-dependent density functional theory study of cobalt corrinoids: Electronically excited states of coenzyme B₁₂
Czasopismo: The Journal of Chemical Physics
Rok wydania, tom, strony: 2009, 131, 105105-1-15

Autor: **P. Lodowski**, **M. Jaworska**, T. Andruniów, M. Kumar, P. M. Kozłowski
Tytuł: Photodissociation of Co-C Bond in Methyl- and Ethylcobalamin: An Insight from TD-DFT Calculations
Czasopismo: Journal of Physical Chemistry B
Rok wydania, tom, strony: 2009, 113, 6898–6909

Autor: **R. Podeszwa**, B. M. Rice, D. Taylor, F. Rob, K. Szalewicz
Tytuł: Predictions of Properties of Energetic Materials from First Principles
Czasopismo: Proceedings of the HPCMP Users Group Conference 2009, IEEE Computer Society, Los Alamitos, California 2009
Rok wydania, tom, strony: 2009
