

W roku **2010** pracownicy **Zakładu Chemii Teoretycznej** byli autorami lub współautorami **13** artykułów recenzowanych w czasopismach i wydawnictwach o zasięgu światowym oraz **trzech** publikacji książkowych

.

PUBLIKACJE KSIĄŻKOWE

Autor: R. J. Bartlett, **M. Musiał**, V. Lotrich, T. Kuś

Tytuł: „The yearn to be hermitian” Chapter 1 in *Recent Progress In Coupled Cluster Methods*, Ed. P. Čársky et al.

Wydawca, miejsce wydania: Springer Science+Business Media B.V. 2010, 1-36

Liczba stron: 36

Autor: L. Meissner, **M. Musiał**

Tytuł: „Intermediate Hamiltonian formulations of the Fock-Space coupled-cluster method: details, comparisons, examples” Chapter 15 in *Recent Progress In Coupled Cluster Methods*, Ed. P. Čársky et al.

Wydawca, miejsce wydania: Springer Science+Business Media B.V. 2010, 395-428

Liczba stron: 33

Autor: **M. Kołaski**, A. Kumar, H. M. Lee, K. S. Kim

Tytuł: „Charge transfer in excited states: ab initio molecular dynamics simulations” Chapter 28 in *Hydrogen Bonding and Transfer in the Excited States*, Ed. Ke-Li Han i Guang-Jiu Zhao

Wydawca, miejsce wydania: John Wiley & Sons, ISBN 9780470666777

Liczba stron: 15

ARTYKUŁY WYKRUKOWANE

Autor: **M. Musiał**, R. J. Bartlett

Tytuł: Improving upon CCSD(TQ_f) for potential energy surfaces: Λ CCSD(TQ_f) models

Czasopismo: *The Journal of Chemical Physics*

Rok wydania, tom, strony: 2010, 133, 104102-1 - 104102-7

Autor: S. A. Kucharski, M. Musiał

Tytuł: *Connected quadruple excitations in the coupled-cluster theory*

Czasopismo: *Molecular Physics*

Rok wydania, tom, strony: 2010, 108, 2975-2985

Autor: M. Musiał

Tytuł: *The excited, ionized and electron attached states within the EOM-CC approach with full inclusion of connected triple excitations*

Czasopismo: *Molecular Physics*

Rok wydania, tom, strony: 2010, 108, 2921-2931

Autor: M. Jaworska, G. Stopa, Z. Stasicka

Tytuł: *Photochemical NO-removal and NO_x-release in the presence of Fe-EDTA complexes. DFT calculations of electronic structure and spectroscopy of the [Fe(edta)(NO)]²⁻*

complex

Czasopismo: *Nitric Oxide*

Rok wydania, tom, strony: 2010, 23, 227-233

Autor: H. M. Lee, A. Kumar, **M. Kołaski**, D. Y. Kim, E. Ch. Lee, S. K. Min, M. Park, Y. Ch. Choi, K. S. Kim

Tytuł: Comparison of cationic, anionic and neutral hydrogen bonded dimers

Czasopismo: Physical Chemistry Chemical Physics

Rok wydania, tom, strony: 2010, 12, 6278-6287

Autor: T. Kupka, M. Stachów, M. Nieradka, J. Kaminsky, **T. Pluta**

Tytuł: Convergence of Nuclear magnetic Shieldings in the Kohn-Sham Limit for Several Small Molecules

Czasopismo: Journal of Chemical Theory and Computation

Rok wydania, tom, strony: 2010, 6, 1580-1589

Autor: Ad van der Avoird, **R. Podeszwa**, K. Szalewicz, C. Leforestier, Rob van Harreveld, P. R. Bunker, M. Schnell, Gert von Heldenb, G Meijerb

Tytuł: Vibration-rotation-tunneling states of the benzene dimer: An ab initio study

Czasopismo: Physical Chemistry Chemical Physics

Rok wydania, tom, strony: 2010, 12, 8219-8240

Autor: R. Podeszwa, K. Patkowski, K. Szalewicz

Tytuł: Improved interaction energy benchmarks for dimers of biological relevance

Czasopismo: Physical Chemistry Chemical Physics

Rok wydania, tom, strony: 2010, 12, 5974-5979

Autor: R. Podeszwa

Tytuł: Interactions of graphene sheets deduced from properties of polycyclic aromatic hydrocarbons

Czasopismo: The Journal of Chemical Physics

Rok wydania, tom, strony: 2010, 132, 044704-1 - 044704-8

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

Tytuł: Extension of the Hartree-Fock plus dispersion method by first-order correlation effects

Czasopismo: Journal of Physical Chemistry Letters

Rok wydania, tom, strony: 2010, 1, 550-555

ARTYKUŁY PRZYJĘTE DO DRUKU

Autor: M. Musiał, R. J. Bartlett

Tytuł: Charge-transfer separability and size-extensivity in the equation-of-motion coupled cluster

metod: EOM-CCx

Czasopismo: *The Journal of Chemical Physics*

Autor: *M. Kołaski, A. Kumar, N. J. Singh and K. S. Kim*

Tytuł: *Differences in structure, energy, and spectrum between neutral, protonated, and deprotonated phenol dimers: comparison of various density functionals with ab initio theory*

Czasopismo: *Physical Chemistry Chemical Physics*

Autor: *W. Cencek, F. Rob, K. Szalewicz, R. Podeszwa, B. M. Rice, D. Taylor*

Tytuł: *Dispersion interactions in calculations of properties of energetic materials*

Czasopismo: *Proceedings of the HPCMP Users Group Conference 2010, IEEE Computer Society, Los Alamitos, California 2010*