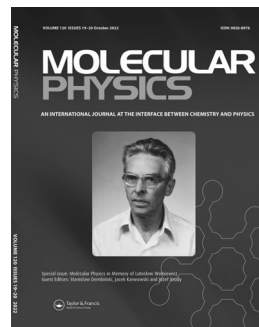


Wojciech Gawlik

ORCID: 0000-0002-9886-5736

Instytut Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego

Kraków



RECENZJA

**„Molecular Physics: An International Journal
at the Interface Between Chemistry and Physics”
2022, vol. 120, no 19–20 (Special Issue of Molecular Physics
in Memory of Lutosław Wolniewicz)**

Numer specjalny czasopisma „Molecular Physics” (t. 120, nr 19–20), wydawanego przez Taylor & Francis, poświęcono osobie profesora Lutosława Wolniewicza (1930–2020) – znakomitego fizyka i chemika kwantowego, jednego z najwybitniejszych polskich uczonych. Redaktorami zeszytu są współpracownicy i przyjaciele profesora z Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu: Stanisław Dembiński, Jacek Karwowski i Józef Szudy, oraz Trygve Helgaker z Wydziału Chemii Uniwersytetu w Oslo. Umieszczono w nim 31 artykułów inspirowanych pracami profesora Wolniewicza w dziedzinie fizyki molekularnej i chemii kwantowej, przygotowanych zarówno przez współpracowników Lutosława Wolniewicza, jak i jego młodszych następców z różnych krajów.

We wstępie (0) do tego okolicznościowego numeru redaktorzy przypomnieli pracę Włodzimierza Kołosa (1928–1996) i Lutosława Wolniewicza dotyczącą widma cząsteczki wodoru, wykonaną w 1968 r. z wykorzystaniem najlepszych ówczesnych technik obliczeniowych. Praca ta podawała wartości bardzo dokładnie obliczonych energii stanów molekuly H_2 . Okazały się one wyraźnie niższe od zmierzonych wcześniej przez Gerharda Herzberga (1904–1999), noblistę i najbardziej uznany ówczesny autorytet. Kolejne pomiary Herzberga wykazały jednak doskonałą zgodność z obliczeniami Kołosa i Wolniewicza, co było ich wielkim sukcesem oraz sukcesem nowoczesnych metod obliczeniowych – jednego z kamieni milowych rozwoju chemii kwantowej. Jak piszą autorzy wstępu do numeru specjalnego, trwająca 15 lat współpraca Kołosa i Wolniewicza nie tylko ugruntowała pozycję obu autorów na naukowej scenie i dała nowy bodziec do

rozwoju podstaw chemii kwantowej, ale też doskonale scalała nurt wynikający z poszukiwania rozwiązań trudnych problemów chemicznych (Kołos) z wykorzystaniem matematycznego aparatu fizyki (Wolniewicz).

Dwa pierwsze artykuły w omawianym zeszycie, 1 i 2, mają charakter historyczny. Pierwszy z nich przygotowali redaktorzy numeru (Stanisław Dembiński, Trygve Helgaker, Jacek Karwowski, Józef Szudy). Ich tekst charakteryzuje z bliskiej, osobistej perspektywy życie i działalność naukową Lutosława Wolniewicza i przedstawia wiele faktów ważnych dla dokumentacji dziejów fizyki w Polsce. Drugi artykuł (Kurt Dressler, ETH Zurich) dotyczy blisko dwudziestoletniej współpracy Lutosława Wolniewicza i Kurta Desslera, podczas której obaj uczeni wykorzystywali znakomitą bazę komputerową ETH w Zurichu do najbardziej zaawansowanych obliczeń z zakresu chemii kwantowej.

Do historycznych materiałów można także zaliczyć artykuł 26 (Grzegorz P. Karwasz, Mikołaj Karawacki, Fabio Carelli, Kamil Fedus, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu). Wychodząc od przypomnienia znaczenia krótkiego dwustronicowego artykułu Kołosa i Wolniewicza, omawiającego zastosowanie metody wariacyjnej do opisu cząsteczki wodoru, autorzy pokazują w swoim tekście, jak interpretacja cząsteczki wodoru z perspektywy rozpraszania elektronów i pozytronów przyczyniła się do lepszego zrozumienia tych procesów w szerokim zakresie energii.

Po osobistych wspomnieniach i historycznych uwagach, kolejne artykuły numeru specjalnego przedstawiają wyniki aktualnych prac różnych autorów, przeważnie z Polski. 21 artykułów poświęcono zagadnieniom teoretycznym, 7 – kwestiom doświadczalnym.

Grupę prac doświadczalnych otwiera opis nowoczesnych eksperymentów prowadzonych różnymi technikami spektroskopii molekularnej. I tak, praca 3 (Arthur Fast, Samuel A. Meek, Instytut Chemii Biofizycznej im. Maxa Plancka w Getyndze) omawia precyzyjne pomiary częstości przejść oscylacyjnych w homojądrowych izotopach molekuł wodoru, jakie wykonano w Getyndze z użyciem zaawansowanej aparatury i laserowych technik pomiarowych (precyzyjne lasery, strumień atomowy, grzebień częstości laserowych). To zestawienie nowoczesnego eksperymentu z wczesnymi pracami Wolniewicza, świetnie ilustruje postęp jaki się dokonał w ultraprecyzyjnej spektroskopii molekularnej od czasów pomiarów Herzberga i pierwszych wyników Kołosa i Wolniewicza.

Następna praca doświadczalna 4 (Christian Wellers, Magnus R. Schenkel, Gouri S. Giri, Stephan Schiller, Uniwersytet w Düsseldorfie; Kenneth R. Brown, Duke University, Durham) dotyczy eksperymentu z ultrazimnymi molekularnymi jonami wodorowymi schłodzonymi i spułapkowanymi w temperaturze ok. 0,5 mK. Autorzy tej pracy zademonstrowali cały wachlarz zaawansowanych technik: ochładzanie chmury jonowej, jej kontrolowane ładowanie do pułapki radio-częstościowej, identyfikację cząstek za pomocą spektroskopii masowej,

a także „chłodzenie stowarzyszone” (*sympathetic cooling*) i precyzyjne wzbudzenie wybranego przejścia oscylacyjnego.

Praca 6 (Kin Fung Lai, Edcel John Salumbides, Maximilian Beyer, Wim Ubachs, Vrije Universiteit, Amsterdam) jest opisem doświadczenia, w którym zbadano słabo związane rezonanse molekuł H_2 powstałych w dwufotonowej fotolizie cząsteczki H_2S . Doświadczenie dostarczyło pierwszych dokładnych wartości stałych rozpraszania fal s w rozpraszaniu $H + H$ na podstawie obliczeń *ab initio* z uwzględnieniem przyczynków relatywistycznych i QED. Doświadczalny charakter mają też prace 7 i 9. W pracy 7 (Joanna Sobczuk, Tomasz Urbańczyk, Jarosław Koperski, Uniwersytet Jagielloński) wykonanej przez grupę Jarosława Koperskiego w Krakowie opisano metodykę podwójnego rezonansu optyczno-optycznego stosowanego w badaniach prostych molekuł van der Waalsa $CdAr$ i $ZnAr$ z użyciem naddźwiękowej wiązki molekularnej. Z kolei w pracy 9 (Piotr Kowalczyk, Uniwersytet Warszawski; Anna Grochola, Włodzimierz Jastrzębski, Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk) przedstawiono wyniki otrzymane z dwukolorową laserową spektroskopią polaryzacyjną cząsteczki Na_2 . W pomiarach tych odkryto nieznanego wcześniej stan elektronowy $7^1\Pi_u$.

Kolejna praca doświadczalna 15 (Maximilian Beyer, Vrije Universiteit Amsterdam i ETH Zurich; Frédéric Merkt, ETH Zurich) to opis pomiarów i analizy fotojonizacji cząsteczki HD. W artykule przeprowadzono analizę masową i jonizacyjną widm fotoelektronów w sąsiedztwie progów jonizacyjno-dysocjacyjnych przy trójfotonowo rezonansowym wzbudzeniu.

Praca 20 (Tom M. Rubin, Marian Sarrazin, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin; Nikolai F. Zobov, Rosyjska Akademia Nauk; Jonathan Tennyson, University College London; Oleg L. Polyansky, Rosyjska Akademia Nauk, University College London) dotyczy laserowych pomiarów widma absorpcji w podczerwieni cząsteczek wody. Autorzy donoszą o uzyskaniu subprocentowej dokładności, która pozwoliła im na precyzyjne zweryfikowanie teoretycznych przewidywań.

Jak już zostało zaznaczone, większość prac zamieszczonych w numerze tematycznym będącym przedmiotem niniejszej analizy to prace teoretyczne, na ogół blisko związane ze spektroskopią molekuł wodoru. Pewnym wyjątkiem jest tu artykuł 5 Włodzimierza Jaskólskiego z Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu poświęcony obliczeniom struktury elektronowej grafenu – tematyki pozornie odległej od pierwotnych zainteresowań Lutosława Wolniewicza, ale najwyraźniej zainspirowanej precyzyjnymi metodami rozwijanymi w jego pracach.

Poniżej przedstawiamy zwięźle tematykę pozostałych prac teoretycznych umieszczonych w omawianym numerze. Na końcu recenzji przytaczamy też spis prac z całego numeru.

Praca 8 (Yasuyo Hatano, Shigeyoshi Yamamoto, Uniwersytet Chukyo, Nagoya i Toyota, Japan) zawiera rozwinięcie nierelatywistycznych obliczeń Hartree-Focka (HF) dla wszystkich 117 atomów od He do Og (*oganesson*, liczba

atomowa 118) i przedstawienie wartości całkowitej energii HF (z dokładnością do 30 cyfr). W pracy 10 (A.M. Tucholska, Michał Lesiuk, Robert Moszyński, Uniwersytet Warszawski) omówiono metodę obliczeń sprzężeń spin-orbita opartą na technice *coupled cluster* i metodzie Hartree-Focka, popularnym podejściu do obliczeń układów wielociałowych. Kolejny tekst (Sylwia Siecińska, Szymon Śmiga, Ireneusz Grabowski, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu; Fabio Della Sala, Eduardo Fabiano, Uniwersytet Salento, Lecce, Włochy, Włoski Instytut Technologiczny w Arnesano) opisuje zastosowanie tzw. semi-kanonicznych efektywnych potencjałów drugiego rzędu (OEP2-sc), które uzupełniają zestaw metod *ab initio*. Autorzy podkreślają niewielki koszt obliczeniowy opisywanego podejścia.

Praca 12 (Krzysztof Pachucki, Uniwersytet Warszawski; Jacek Komasa, Uniwersytet Adama Mickiewicza w Poznaniu) stanowi omówienie wyników obliczeń energii izotopologów molekuł wodoru zawierających tryt. Stosując nieadiabatyczną metodę wariacyjną, autorzy wyznaczyli nierelatywistyczne energie nisko położonych stanów rowibracyjnych cząsteczek HT, DT, i T₂ z względnymi dokładnościami 10⁻¹³–10⁻¹⁴, a więc przekraczającymi poprzednie wartości o kilka rzędów wielkości. W kolejnym tekście w recenzowanym tomie grupa badaczy z Politechniki Gdańskiej (Klaudia Bączek, Patryk Jasik, Tymon Kilich, Józef E. Sienkiewicz) przedstawiła wykresy adiabatycznych energii potencjalnych dla cząsteczki NaK, uzyskane przy pomocy obliczeń *ab initio* z uwzględnieniem korelacji elektronowych.

W artykule 14 (Krzysztof Strasburger, Politechnika Wrocławska; Jerzy Ciołowski, Uniwersytet Szczeciński) zastosowano rozkład liczby elektronów i ich energii kinetycznej dla dwóch jednoelektronowych składników cząsteczki LiH na przyczynki związane z różnymi rzutami (stany |m>) indywidualnych krętów na oś cząsteczki. W ten sposób pokazano, że do wyznaczenia energii kinetycznych wystarczą przyczynki odpowiadające małym wartościom |m|. Kolejna praca teoretyczna – 16 (Leonid Gorb, Uniwersytet Stanowy Jackson, Narodowa Akademia Nauk Ukrainy; Mykola Ilchenko, National Academy of Sciences of Ukraine; Jerzy Leszczyński, Uniwersytet Stanowy Jackson) – dotyczy zastosowania teorii funkcjonałów gęstości do obliczeń zdolności adsorpcji rozmaitych organicznych zanieczyszczeń przez grafen i jego pochodne. Autorzy zrobili to obliczając adsorpcję kwasów perfluorooktanowych i perfluorooktansulfonicznych z roztworów wodnych przez powierzchnie tlenków grafenu. W artykule 17 (Ilias Magoulas, Jun Shen, Piotr Piecuch, Uniwersytet Stanowy Michigan) autorzy opisali bardzo zaawansowane obliczenia potencjałów oddziaływania w pierścieniach H₆.

Z kolei w pracy 18 (Jeroen C.J. Koelemeij, Vrije Universiteit, Amsterdam) przedstawiono teoretyczne modelowanie wyników spektroskopii i korelacji przesunięć nadsubtelnych i częstości rowibracyjnych w molekułach HD⁺. W 19 (Michał

Siłkowski, Krzysztof Pachucki, Uniwersytet Warszawski) omówiono dokładne obliczenia wariacyjne potencjału Borna-Oppenheimera dla stanów wzbudzonych molekuł wodoru z symetrami π , Δ i Φ . Dla większości opisanych stanów, przedstawione wyniki są obliczone po raz pierwszy, a inne są obliczone z dokładnością o rzędy wielkości lepszą od poprzednich.

W artykule 21 Leszek Meissner (Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu) opisuje badania korelacji elektronów w atomach i molekułach z zastosowaniem metody sprzężonych klastrów (CC). W pracy 22 (Alexander V. Turbiner, Narodowy Uniwersytet Autonomiczny Meksyku; Horacio Olivares-Pilón, Metropolitalny Uniwersytet Autonomiczny, Meksyk) meksykańscy badacze rozwijają teorię i konstruują proste analityczne potencjały modelujące PEC, pozwalające na opis rowibracyjnych widm diatomowych molekuł bez przeprowadzania rozbudowanych obliczeń numerycznych. Kolejny artykuł (Saeed Nasiri, Uniwersytet Nazarbajew, Nur-Sułtan, Kazachstan; Ludwik Adamowicz, Uniwersytet Arizony w Tucson, Norweska Akademia Nauk i Literatury; Sergiy Bubín, Uniwersytet Nazarbajew, Nur-Sułtan, Kazachstan) przedstawia najdokładniejsze dotychczas przeprowadzone obliczenia elektronowej afiniczności pięcioelektronowej cząsteczki bez przybliżenia Borna-Oppenheimera. Obliczenia są wykonane na przykładzie cząsteczki LiH. W pracy 24 (Jacek Karwowski, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu; Andreas Savin, Uniwersytet Sorbona w Paryżu) autorzy rozważają zagadnienie kolascencji, czyli warunki, kiedy hamiltoniany dwóch cząstek nie dadzą się przedstawić jako suma dwóch problemów jednocząstkowych.

Artykuł 25 (Ankit Raj, Yen-Bang Chao, Henryk A. Witek, Narodowy Uniwersytet Yang Ming Chiao Tung, Hsinchu, Tajwan) dotyczy obliczeń widm ramanowskich za pomocą metod *ab initio*. Autorzy wskazują na potrzebę rozwoju dokładniejszych metod obliczeniowych, stosowalnych także do cząsteczek ze zniekształconą geometrią. W pracy 27 (Monika Stanke, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu; Ludwik Adamowicz, University of Arizona w Tucson, Norweska Akademia Nauk i Literatury) omówiono wyniki precyzyjnych obliczeń dla czterech najniższych stanów 3D i stanu podstawowego atomu berylu. W obliczeniach założono stałość mas jąder i niezależne od spinu poprawki relatywistyczne.

Praca 28 (Andrzej Kędziorski, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu; J. Patrick Zobel, Uniwersytet Wiedeński; Marek Krośnicki, Uniwersytet Gdański; Jarosław Koperski, Uniwersytet Jagielloński) dotyczy obliczeń *ab initio* energii stanów rydbergowskich kompleksów ZnAr. Autorzy uwzględniają stany korelujące do asymptot $(4s6s) ^1S_0$ atomów Zn i rozważają różne ograniczenia dokładności swoich obliczeń. W pracy 29 (Edit Mátyus, Dávid Ferenc, Uniwersytet Loránda Eötvösa w Budapeszcie) obliczono nieadiabatyczne poprawki masowe za pomocą metody wariacyjnej. Obliczenia rozszerzają trzydziestoletnie wyniki Wolniewicza

i Dresslera odpowiadające sekwencji EF, GK, H.H, S5 i S6 $^1\Sigma_g^+$ cząsteczki wodoru i mogą być przydatne dla wielowymiarowych układów elektronowych.

W artykule 30 (Jacek Kobus, Andrzej Kędziorski, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu) zbadano możliwość rozwiązania równania Diraca-Focka dla molekuł, które można zastosować do jednoelektronowych dwuatomowych cząsteczek z punktowymi i skończonymi jądrami.

Ostatnia praca tomu (Jie J. Bao, Donald G. Truhlar, Uniwersytet Minnesoty, Minneapolis; Matthew R. Hermes, Thais R. Scott, Laura Gagliardi, Uniwersytet Chicago, Narodowe Laboratorium Argonne, Lemont; Andrew M. Sand, Uniwersytet Butlera, Indianapolis; Roland Lindh, Uniwersytet w Uppsali) przedstawia obliczenia silnie sprzężonych struktur w pobliżu degeneracji. Autorzy rozwijają i stosują metodę wielokonfiguracyjnej teorii (MC-PDFT) stosującej metodę analitycznych gradientów.

Wydawcy numeru specjalnego „Molecular Physics” nie tylko przybliżyli sylwetkę i dokonania profesora Lutosława Wolniewicza – przez bardzo trafny dobór autorów indywidualnych przyczynków, udało im się zademonstrować imponujący rozwój metod opartych na precyzyjnych obliczeniach kwantowo-chemicznych zainicjowanych przez Lutosława Wolniewicza i ich niesłabnące do dziś znaczenie.

Spis treści „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20

- (0) Stanisław Dembiński, Trygve Helgaker, Jacek Karwowski, Józef Szudy, *Foreword*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 2 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2144060.
- (1) Stanisław Dembiński, Trygve Helgaker, Jacek Karwowski, Józef Szudy, *Lutosław Wolniewicz (1930–2020)*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 8 s., DOI 10.1080/00268976.2021.2024904.
- (2) Kurt Dressler, *The collaboration Wolniewicz–Dressler 1976–1994*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 3 s.; DOI 10.1080/00268976.2021.2007308.
- (3) Arthur Fast, Samuel A. Meek, *Precise measurement of the $D_2 S_1(0)$ vibrational transition frequency*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 9 s., DOI 10.1080/00268976.2021.1999520.
- (4) Christian Wellers, Magnus R. Schenkel, Gouri S. Giri, Kenneth R. Brown, Stephan Schiller, *Controlled preparation and vibrational excitation of single ultracold molecular hydrogen ions*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 16 s., DOI 10.1080/00268976.2021.2001599.
- (5) W. Jaskólski, *Electronic structure of trilayer graphene with internal layer broken*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 6 s., DOI 10.1080/00268976.2021.2013554.
- (6) K.-F. Lai, E. J. Salumbides, M. Beyer, W. Ubachs, *Precision measurement of quasi-bound resonances in H_2 and the $H + H$ scattering length*, „Mo-

- lecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 17 s., DOI 10.1080/00268976.2021.2018063.
- (7) Joanna Sobczuk, Tomasz Urbańczyk, Jarosław Koperski, *Optical-optical double resonance process in free-jet supersonic expansion of van der Waals molecules: characteristics of the expansion, number of excited molecules and emitted photons*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 9 s., DOI 10.1080/00268976.2021.2024614.
- (8) Yasuyo Hatano, Shigeyoshi Yamamoto, *Performance of Lambda functions in atomic Hartree-Fock calculations*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 11 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2027534.
- (9) P. Kowalczyk, A. Grochola, W. Jastrzebski, *Study of the $7^1\Pi_u$ state of sodium dimer by polarisation labelling spectroscopy*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 5 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2027536.
- (10) A. M. Tucholska, M. Lesiuk, R. Moszynski, *Spin-orbit coupling matrix elements from the explicitly connected expressions of the response functions within the coupled-cluster theory*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 11 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2029965.
- (11) Sylwia Sיעińska, Szymon Śmiga, Ireneusz Grabowski, Fabio Della Sala, Eduardo Fabiano, *Boosting the OEP2-sc method with spin-component scaling*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 10 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2037771.
- (12) Krzysztof Pachucki, Jacek Komasa, *Nonrelativistic energy of tritium-containing hydrogen molecule isotopologues*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 10 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2040627.
- (13) K. Bączek, P. Jasik, T. Kilich, J. E. Sienkiewicz, *Born–Oppenheimer potential energy curves of NaK from the optimised atomic basis sets*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 8 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2040628.
- (14) Krzysztof Strasburger, Jerzy Cioslowski, *Partial-wave decomposition of the one-electron properties of the LiH molecule computed with explicitly correlated basis sets*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 7 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2048107.
- (15) Maximilian Beyer, Frédéric Merkt, *Structure and dynamics of HD^+ in the vicinity of the $H^+ + D$ and $D^+ + H$ dissociation thresholds: Feshbach resonances and the role of g/u-symmetry breaking*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 14 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2048108.
- (16) Leonid Gorb, Mykola Ilchenko, Jerzy Leszczynski, *A density functional theory study of the simplest adsorption forms of perfluorooctanoic and perfluorooctanesulphonic acids by graphene oxide and fluorinated graphene oxide*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 9 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2053218.

-
- (17) Ilias Magoulas, Jun Shen, Piotr Piecuch, *Addressing strong correlation by approximate coupled-pair methods with active-space and full treatments of three-body clusters*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 30 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2057365.
- (18) J. C. J. Koelemeij, *Effect of correlated hyperfine theory errors in the determination of rotational and vibrational transition frequencies in HD^+* , „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 16 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2058637.
- (19) Michał Siłkowski, Krzysztof Pachucki, *Born-Oppenheimer potentials for Π , Δ , and Φ states of the hydrogen molecule*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 9 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2062471.
- (20) Tom M. Rubin, Marian Sarrazin, Nikolai F. Zobov, Jonathan Tennyson, Oleg L. Polyansky, *Sub-percent accuracy for the intensity of a near-infrared water line at $10,670\text{ cm}^{-1}$: experiment and analysis*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 7 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2063769.
- (21) Leszek Meissner, *A new intermediate Hamiltonian Fock-space coupled-cluster formalism for the three-valence sector*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 15 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2064355.
- (22) Alexander V. Turbiner, Horacio Olivares-Pilón, *Towards the analytic theory of potential energy curves for diatomic molecules: studying He_2^+ and LiH diatomics as illustration*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 14 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2064784.
- (23) Saeed Nasiri, Ludwik Adamowicz, Sergiy Bubin, *Electron affinity of LiH^-* , „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 8 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2065375.
- (24) Jacek Karwowski, Andreas Savin, *Two-particle coalescence conditions revisited*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 12 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2069055.
- (25) Ankit Raj, Yen-Bang Chao, Henryk A. Witek, *Testing the limitations of harmonic approximation in the determination of Raman intensities*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 19 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2069613.
- (26) G. P. Karwasz, M. Karawacki, F. Carelli, K. Fedus, *Hydrogen molecule as seen in electron and positron scattering*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 12 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2070087.
- (27) Monika Stanke, Ludwik Adamowicz, *Benchmark calculations of the 3D Rydberg spectrum of beryllium*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 7 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2073281.
- (28) Andrzej Kędziorski, J. Patrick Zobel, Marek Krośnicki, Jarosław Koperski, *Rydberg states of ZnAr complex*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 27 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2073282.

-
- (29) Edit Mátyus, Dávid Ferenc, *Vibronic mass computation for the EF–GK–H $^1\Sigma_g^+$ manifold of molecular hydrogen*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 12 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2074905.
- (30) Jacek Kobus, Andrzej Kędzioriski, *Two-dimensional, finite-difference method of solving the Dirac equation for diatomic molecules revisited*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 16 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2092563.
- (31) Jie J. Bao, Matthew R. Hermes, Thais R. Scott, Andrew M. Sand, Roland Lindh, Laura Gagliardi, Donald G. Truhlar, *Analytic gradients for compressed multistate pair-density functional theory*, „Molecular Physics” 2022, t. 120, nr 19–20, 14 s., DOI 10.1080/00268976.2022.2110534.