

## Az értekezés témaköréből készült közlemények jegyzéke

- I. **Csonka**, G. I., Erdős, M. and Réffy, J., Structure of Disiloxane: Semiempirical and post-Hartree-Fock study, *J. Comput. Chem.* **15** (1994) 925.
  - II. **Csonka**, G. I. and Réffy, J., Density-functional study of the equilibrium geometry and Si-O-Si potential energy curve of disiloxane, *Chem. Phys. Lett.* **229** (1994) 191.
  - III. **Csonka**, G. I., Loos, M., Kucsman, A., and Csizmadia, I. G., Ab Initio study of the energy hypersurface of uneven sulfuranes. Dissociation of HCl from Cl-SH(OH)-Cl, *Chem. Phys. Lett.* **230** (1994) 203.
  - IV. **Csonka**, G. I., Loos, M., Kucsman, A., and Csizmadia, I. G., Ab Initio geometry optimization of the Cl-S(H)OH-Cl uneven sulfurane with the inclusion of electron correlation, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **315** (1994) 29.
  - V. **Csonka**, G. I. and Réffy, J., The failure of the MO-based theoretical explanations for bending of disiloxane, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **332** (1995) 187.
  - VI. **Csonka**, G. I. and Sztraka L., Density functional and post Hartree-Fock equilibrium geometries, potential energy surface and vibrational frequencies for methylamine, *Chem. Phys. Lett.* **233** (1995) 611.
  - VII. **Csonka**, G. I. and Anh, N., The ability of the MP2 and MP3 methods to model the QCISD(T) basis set extension effects for the hydrogen atoms in molecules, *Proceedings of First Electronic Computational Chemistry Conference* (1995).
  - VIII. **Csonka**, G. I., Anh, N., and Réffy, J., The performance of Generalized Gradient Approximation DFT methods with gaussian basis sets: Sulfur and Chlorine-containing molecules, *Proceedings of First Electronic Computational Chemistry Conference* (1995).
  - IX. **Csonka**, G. I. and Csizmadia, I. G., Density functional conformational analysis of 1,2-ethanediol, *Chem. Phys. Lett.* **243** (1995) 419.
  - X. **Csonka**, G. I., Anh, N., Ágyán, J. G., Csizmadia, I. G., Investigation of intramolecular hydrogen bonding in 1,2-ethanediol using density functional methods, *Chem. Phys. Lett.* **245** (1995) 129.
  - XI. **Csonka**, G. I. and Hencsei, P., Prediction of geometrical changes in silatranes: an ab initio molecular orbital and density functional theory study, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **362** (1996) 199.
  - XII. **Csonka**, G. I. and Hencsei, P., The Structure of 1-Chlorosilatrane. An Ab Initio Molecular Orbital and a Density Functional Theory Study, *J. Comput. Chem.* **17** (1996) 767.
  - XIII. **Csonka**, G. I., Éliás, K., Csizmadia, I. G., Relative stability of  ${}^1C_4$  and  ${}^4C_1$  chair forms of *b*-D-glucose: a density functional study, *Chem. Phys. Lett.* **257** (1996) 49.
  - XIV. **Csonka**, G. I., Anh, N. N., Kolossvár, I., A kémiai kötések és reakcióképesség térbeli szemléltetése és osztályozása az elektronsűrűség analízise alapján, *Kém. Közl.* **82** (1996) 97.
-

- XV. Kovács, A., Kolossváry, I., **Csonka**, G. I. and Hargittai, I., Theoretical study of intramolecular hydrogen bonding and molecular geometry of 2-trifluoromethylphenol, *J. Comput. Chem.* 17 (1996) 1804.
- XVI. **Csonka**, G. I., Éliás, K., Csizmadia, I. G., *Ab initio* and density functional study of the conformational space of  ${}^1\text{C}_4$ -L-fucose, *J. Comput. Chem.* 18 (1997) 330.
- XVII. **Csonka**, G. I., Ágyán, J. G., Origin of the problems with PM3 core repulsion function, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 393 (1997) 31.
- XVIII. **Csonka**, G. I., Kolossváry, I., Császár, P., Éliás, K., Csizmadia, I. G., The conformational space of pyranose rings in aldohexoses, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 395-396 (1997) 29.
- XIX. Sztraka, L., **Csonka**, G. I., Flexible ab initio geometry of methylamine and its internal rotation, *J. Mol. Struct.* 410-411 (1997) 387.
- XX. **Csonka**, G. I., Nguyen, N. A., Kolossváry, I., Simple tests for density functionals, *J. Comput. Chem.* 18 (1997) 1534.
- XXI. **Csonka**, G. I., Éliás, K., Kolossváry, I., Sosa, C. P., Csizmadia, I. G., Theoretical study of alternative ring forms of  $\alpha$ -L-fucopyranose, *J. Phys. Chem. A*, accepted.
- XXII. **Csonka**, G. I., Johnson, B. G., Inclusion of exact exchange for self-interaction corrected  $\text{H}_3$  density functional potential energy surface, *Theor. Chem. Acc.*, accepted.

**Az értekezés témaköréhez kapcsolódó meghívott előadás nemzetközi konferencián:**

- The working mechanism of A, B, and C parameters in hybrid density functional methods, DFT97, 7<sup>th</sup> International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, Vienna, Austria, 1997 september 2-6.

---

**Az értekezés témájához kapcsolódó, de abban fel nem használt közlemények.**

23. Nagy, J., Nyitrai, J. and **Csonka** G., Neue Beiträge zum mechanismus der photoringverengung von 1,2,4-triazinen. *J. Inf. Rec. Mats.* **21** (1994) 467.
24. Nyulászi, L., Szieberth, D., **Csonka**, G. I., Heinicke J., and Veszprémi, T., The Photoelectron Spectrum and Conformation of Phenyl-phosphine and Phenyl-arsine, *Struct. Chem.*, **6** (1995) 1.
25. Varga, F., Nemes, L., **Csonka**, G. I., Vibrational properties of  $\text{C}_{20}$  isomers, a semi-empirical study, *J. Mol. Struct.*, **376** (1996) 513.
26. Sztraka L., **Csonka**, G. I., A metil-amin flexibilis ab initio geometriája és az alapállapotú rotációs együtthatók közötti kapcsolat, *Kém. Közl.*, 82 (1996) 143.
27. Endrédi, G., Perczel, A., Farkas, O., McAllister, M. A., **Csonka**, G. I., Ladik, J. and Csizmadia, I. G., Peptide Models XV. The effect of basis set size increase and electron correlation on selected minima of the ab initio 2D-Ramachandran map of For-L-Ala-NH<sub>2</sub>, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 391 (1997) 15.
28. Kovács, A., **Csonka**, G. I. Vibrational analysis of  $\text{TeCl}_4$ . II. A HF, MP2, and Density Functional Study, *Int. J. Quant. Chem.*, in press.
29. Ferenczy, G. G., **Csonka**, G. I., Náray-Szabó, G., Ágyán, J. G., SCMP-NDDO: self-consistent madelung potential method at semiempirical level for the treatment of polar molecular crystals, *J. Comput. Chem.*, accepted.
30. Kovács A., **Csonka**, G. I., Keserű, G. M., Comparison of ab initio and density functional methods for the vibrational analysis of  $\text{TeCl}_4$ , *J. Comput. Chem.*, accepted.
-