

# Jan Wróbel

## Lista publikacji

z dnia 31 października 2012

### Książki i monografie

1. Wróbel J., *Modelowanie ab-initio właściwości faz międzymetalicznych La-X (X = Mg, Al)*, 121 s., praca doktorska WIM PW, 2012
2. Hector Jr. L.G., Wrobel J., Kurzydłowski K.J., *Thermodynamic and Elastic Properties of La-X (X=Al,Mg) Intermetallic Compounds from First Principles Calculations, [w.] Magnesium Technology 2010*, S.R. Agnew, N.R. Neelameggham, E.A. Nyberg, W.H. Sillekens, TMS (The Minerals, Metals & Materials Society), Warrendale, PA., Wiley, 2010: 41-48

### Publikacje w czasopismach

1. Muzyk M., D. Nguyen-Manh, Wróbel J., Kurzydłowski K.J., Baluc N.L, Dudarev S.L., 2012, *First-principles model for phase stability, radiation defects and elastic properties of W-Ta and W-V alloys*, *Journal of Nuclear Materials*, DOI: 10.1016/j.jnucmat.2012.10.025 – w druku
2. Wróbel J., Wejrzanowski T., Kurzydłowski K.J., Kozłowski M., Kozubski R., 2012, *Mesoscale simulations of atomic ordering in nano-layered FePt*, *Computational Materials Science* 55: 60-64
3. Wróbel J., Hector Jr. L.G., Wolf W., Shang S.L., Liu Z.K., Kurzydłowski K.J., 2012, *Thermodynamic and mechanical properties of lanthanum – magnesium phases from density functional theory*, *Journal of Alloys and Compounds* 512: 296-310
4. Wróbel J., Hector Jr. L.G., Wolf W., Kurzydłowski K.J., 2011, *Thermodynamic and elastic properties of the phases appearing in the lightweight La-Mg alloys*, *Materials Science Forum* 690: 15-18
5. Kozubski R., Kozłowski M., Wrobel J., Wejrzanowski T., Kurzydłowski K.J., Goyhenex Ch., Pierron-Bohnes V., Renhofer M., Malinov S., 2010, *Atomic ordering in nano-layered FePt: Multiscale Monte Carlo simulation*, *Computational Materials Science* 49: S80-S84
6. Wróbel J., Kurzydłowski K.J., Hummer K., Kresse G., Piechota J., 2009, *Calculations of ZnO properties using the Heyd–Scuseria–Ernzerhof screened hybrid density functional*, *Physical Review B* 80: 155124:1-8
7. Wróbel J., Piechota J., 2008, *On the structural stability of ZnO phases*, *Solid State Communications* 146: 324-329
8. Wróbel J., Piechota J., 2007, *Erratum: Structural properties of ZnO polymorphs, physica status solidi (b)* 224: 4688-4690
9. Wróbel J., Piechota J., 2007, *Structural properties of ZnO polymorphs, physica status solidi (b)* 224: 1538-1543

### Prace pokonferencyjne i doniesienia zjazdowe

1. Wróbel J., Hector Jr. L.G., Wejrzanowski T., Kurzydłowski K.J., 2009, *Właściwości mechaniczne i termodynamiczne związków międzymetalicznych X-La na podstawie obliczeń z pierwszych zasad (X=Al,Mg)*, *Szkoła Inżynierii Materiałowej*, Kraków Krynica: 1-6
2. Kozubski R., Kozłowski M., Wrobel J., Wejrzanowski T., Kurzydłowski K.J., Goyhenex Ch., Pierron-Bohnes V., Renhofer M., Malinov S., 2010, *Atomic ordering in nano-layered FePt: Multiscale Monte Carlo simulation*, *Materials Research Society Symposium Proceedings* 1177: 37-42
3. Wróbel J., Śpiewak P., Hector Jr. L.G., Yang J., Wolf W., Kurzydłowski K.J., 2012, *Comparison of Density Functionals for Prediction of Thermodynamic Properties of Materials*, *Proceedings of the 2nd International Conference on Advanced Materials Modelling*, Nantes, France, p.:44-45