

Laskennallisen kemian jaoston vuosikertomus 2016

Jaoston vuoden 2016 gradupalkinto

Vuoden 2016 gradupalkinto myönnetään FM Mira Ahingon pro gradu -tutkielmalle "Luotettava laskennallinen menetelmä sytokromi P450 alatyypin 2A6 katalysoimien pienmolekyylien metaboliakohtien ennustukseen". Mira Ahingon pro gradu -tutkielma liittyy aihepiiriltään laskennalliseen lääkeainekehitykseen. Tutkielma on tehty Jyväskylän yliopiston Bio- ja ympäristötieteiden laitoksen Laskennallisen biotieteen tutkimusryhmässä. Tutkimuksen tavoitteena oli kehittää tarkka, nopea ja aiempaa luotettavampi laskennallinen menetelmä, jolla voidaan mallintaa sytokromi P450 -entsyymien yhden alatyypin toimintaa ihmisen vierasainemetaboliassa. Työn johdanto- ja kirjallisuusosuus osoittavat erinomaista kokonaiskuvan hallintaa tutkittavan entsyymien, sen sitoutumistaskujen toiminnan ja laskennallisen mallintamisen suhteen. Tutkitut proteiimirakenteet on valittu huolellisesti ja valintakriteerit on kuvattu selkeästi. Käytettyjä malleja ja laskennallisia ennusteita käsitellään kriittisesti ja tiedostaen samalla menetelmien rajoitukset. Työssä kehitetyillä uusilla laskennallisilla menetelmillä saavutettiin selvä parannus alan olemassa oleviin menetelmiin. Kehitettyä menetelmää voidaan käyttää yhdessä muiden laskennallisten tai kokeellisten mallien kanssa esimerkiksi lääkeainekandidaattien rakenteen optimointiin ja siten lääkehoidon vaikuttavuuden parantamiseen.

Laskennallisen kemian jaosto on myöntänyt samassa yhteydessä myös kunniamaininnan ansiokkaasta lopputyöstä FM Maria Dimitrovalle. Maria Dimitrovan pro gradu -tutkielma "Density functional theory studies of the interactions of 1-butyl-3-methylimidazolium chloride with xenon" on hieno esimerkki laadukkaasta kvanttikemian pro gradu -tutkielmasta. Työ on tehty Helsingin yliopiston kemian laitoksen teoreettisen ja laskennallisen kemian tutkimusryhmässä. Kirjallisuusosassa työn aihepiiri ja käytetyt laskentamenetelmät on esitetty selkeästi ja kattavasti. Kokeellisen osan tulokset on kuvattu huolellisesti ja analyysistä näkyy, että tekijällä on hyvä ymmärrys aihepiiristä ja siitä, mitkä ovat käytettyjen laskentamenetelmien rajoitteet. Työn tulokset auttavat ymmärtämään paremmin molekyylienvälisiä vuorovaikutuksia ionisissa nesteissä, joilla on lukuisia teollisia sovellutuksia.

Laskennallisen kemian jaoston gradupalkinto jaettiin toista kolmatta kertaa vuonna 2016. Gradukilpailuun saatiin kaksi korkeatasoista työtä, joten vuonna 2014 aloitettu uusi toimintamuoto jatkui melko onnistuneesti. Vuonna 2017 palkinnon mainostusta voisi lisätä entisestään. Yhtenä keinona isomman jutun tekeminen Kemia-Kemi -lehteen.

Muuta

Jaoston verkkosivuja osoitteessa <http://kemianseurat.fi/lki/> on ylläpidetty säännöllisesti, lähinnä jaoston sihteerin toimesta.

Laskennallisen kemian jaoston vuosikokous pidettiin Teoreettisen kemian talvikoulun yhteydessä, 15.12.2015. Talvikoulun aiheena oli "Current Trends in Electronic Structure Theory Methods" ja osallistujia oli n. 80.

LASKEMO-tutkijakoulun päätyttyä 2015 päätettiin perustaa yhteistyön ylläpitämistä varten laskennallisen kemian verkosto, jossa olisivat mukana alan aktiiviset ryhmät. Ensimmäinen uusimuotoinen kokous järjestettiin 25.8.2016 Itä-Suomen yliopiston Joensuun kampuksella. Tapaaminen oli onnistunut ja tilaisuutta päätettiin jatkaa. Vuonna 2017 tapaaminen järjestettäneen Jyväskylässä (vastuuhenkilö Gerrit Groenhof).

Kemian päivät 2017: to 30.3 järjestetään "Symposium on Computational Chemistry". Jaoston sihteeri on ansiokkaasti kasannut hyvän ohjelman ja mielenkiintoiset puhujat. Jaoston tulisi aktiivisesti mainostaa tilaisuutta.

Laskennallisen kemian väitöksiä vuodelta 2016:

- 8.1.2016, FM Valtteri Mäkelä, Helsingin yliopisto, "Automated Analysis of Quantitative NMR Spectra"
- 18.2.2016, DI Hanne Antila, Aalto-yliopisto, "Simulations of Polyelectrolyte Interactions in Salt"
- 19.2.2016, FM Linlin Sun, Itä-Suomen yliopisto, "The Effects of Structural and Environmental Factors on the Swelling Behavior of Montmorillonite-Beidellite Smectites: a Molecular Dynamics Approach"
- 18.3.2016, FM Richard Hatz, Helsingin yliopisto, "Computational Studies of Dispersion Interactions in Coinage and Volatile Metal Clusters"
- 24.3.2016, FM Albert Ofori, "Inter- and Intramolecular Interactions in the Stabilization and Coordination of Palladium and Silver Complexes: DFT and QTAIM Studies"
- 13.5.2016, FM Lasse Lavikainen, "The structure and surfaces of 2:1 phyllosilicate clay minerals"
- 27.5.2016, FM Oona Kupiainen-Määttä, Helsingin yliopisto, "From cluster properties to concentrations and from concentrations to cluster properties"
- 10.6.2016, FM Juhani Teeriniemi, Aalto-yliopisto, "Thermodynamic modeling of alloys by Coarse-Grained Density Functional Theory"
- 21.10.2016, FM Ville Härkönen, Jyväskylän yliopisto, "Computational and Theoretical Studies on Lattice Thermal Conductivity and Thermal Properties of Silicon Clathrates"
- 18.11.2016, FM Heikki Salo, Itä-Suomen yliopisto, "A Computational Approach towards Sirtuin Inhibitors - Application of Molecular Docking Methods"
- 14.12.2016, FM Sakari Tuokko, Jyväskylän yliopisto, "Understanding selective reduction reactions with heterogeneous Pd and Pt: climbing out of the black box"
- 15.12.2016, DI Risto Pajarre, Aalto yliopisto/VTT, "Modelling of chemical processes and materials by free energy minimisation - Additional constraints and work terms"

Merkittäviä laskennallisen kemian tapahtumia vuonna 2017:

- 19.-22.3. Computational Molecular Science 2017, Warwick, UK.
- 8.-11.3. CSC Spring School in Computational Chemistry, Espoo.
- 30.3. Kemian päivät 2017, Laskennallisen kemian symposium
- 20.-25.8. 25th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Helsinki.
- 21.-26.08. 53rd Symposium on Theoretical Chemistry: Big Data in Chemistry, Basel.
- Elokuu 2017, Laskennallisen kemian vuositapaaminen, Jyväskylä.
- 27.8.-1.9. 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC2017, München, Saksa.
- Joulukuu 2017, Teoreettisen kemian talvikoulu, Helsinki.

Helsingissä 31.12.2016

Mikael Johansson, jaoston puheenjohtaja