

Laskennallisen kemian jaoston vuosikertomus 2014

- Laskennallisen kemian jaoston gradupalkinto jaettiin ensi kertaa vuonna 2014. Gradukilpailuun saatiin neljä korkeatasoista työtä, joten jaoston uusi toimintamuoto käynnistyi onnistuneesti.
- Vuoden 2014 gradupalkinto myönnetään Elias Toivasen Pro Gradu -tutkielmalle "Grid-based Fast Multipole Method - a fully numerical scheme for evaluating two-electron integrals". Helsingin yliopiston kemian laitoksella tehty työ käsittelee kvanttikemiallisissa elektronirakennelaskuissa esiintyvien kahden elektronin repulsiointegraalien laskemista uudentyypisellä numeerisella menetelmällä. Aihe liittyy vahvasti massiivisesti rinnakkaisten laskentaohjelmistojen kehittämiseen. Kehitetty hilapohjainen menetelmä on lähtökohtaisesti rinnakkaistettavissa erittäin tehokkaasti. Se eroaakin edukseen nykyään käytössä olevista menetelmistä, joiden soveltuvuus supertietokonelaskentaan on yleensä huono. Kyseessä on erittäin korkeatasoinen laskennallisen kemian gradu, joka sisältää vaativaa menetelmänkehitystyötä lähtien perusteoriasta aina käyttökelpoisen koodin kirjoittamiseen asti.
- Jaosto avasi uudet verkkosivut osoitteessa <http://kemianseurat.fi/lki/>
- Aalto-yliopistossa järjestettiin 5.-7.6. kansainvälinen, laskennallis-kokeellinen workshop "Clusters 2014: Workshop on Reactivity and catalysis of metallic nanoclusters". Osallistujia oli noin 25.
- Helsingin yliopistossa (Tvärminne) järjestettiin 17.-21.11. kansainvälinen kokous "Workshop on MAGnetically Induced Currents in molecules (MAGIC 2014)"
- Laskennallisen kemian jaoston vuosikokous pidettiin Teoreettisen kemian talvikoulun yhteydessä, 16.12.2014. Talvikoulun aiheena oli "Theoretical f-element chemistry" ja osallistujia oli 53.
- Uppsalassa pidettyyn kokoukseen "Swedish Theoretical Chemistry Meeting 2014 – New Horizons" oli tänä vuonna pyydetty osallistujia myös muista pohjoismaista. Suomesta oli puhumassa prof. Dage Sundholm. Kokouksessa oli suunniteltu kokouskonseptin laajentamista yhteispohjoismaiseksi. Seuraavan kokouksen 2016 järjestää Kurt V. Mikkelsen (Kööpenhaminan yliopisto).
- Kansainvälisesti ehkä tärkein laskennallisen kemian tapahtuma oli Santiago de Chilessä pidetty WATOC2014 (5.-10.10.). Paikalla oli kymmenkunta suomalaista ja Pekka Pyykölle jaettiin WATOCin Schrödinger-mitali aiheesta "For his pioneering contributions to relativistic quantum chemistry."
- CECAMin Councilin jäsenenä ovat toimineet vuonna 2014 prof. Kari Laasonen ja prof. Risto Nieminen. Aalto-yliopisto toimii CECAMin noodina ja Suomessa järjestettäviä laskennallisen kemian kokouksia voidaan ehdottaa CECAM- kokouksiksi. Kokouksia voi ehdottaa noodin johtajalle (prof. Mikko Alava, Aalto).
- LASKEMO-tutkijakoulu päättyy ensi vuonna samalla kun muutkin viimeiset opetusministeriön rahoittamat tutkijakoulut, mutta suunnitelmassa on perustaa alan yhteistyön ylläpitämistä varten laskennallisen kemian verkosto, jossa olisivat mukana alan aktiiviset ryhmät. Hanketta vetää prof. Kari Laasonen. Hankkeella on varsin rajallinen rahoitus, mutta se mahdollistaa pienimuotoisen Laskennallisen Kemian päivien järjestämisen.

Laskennallisen kemian väitöksiä vuodelta 2014:

- 14.11. MSc Andrey Bazhenov, Itä-Suomen yliopisto, Towards Deeper Atomic-level Understanding of the Structure of Magnesium Dichloride and Its Performance as a Support in the Ziegler-Natta Catalytic System
- 14.11. FM Mikael Kuisma, Tampereen Teknillinen yliopisto, Approaches to Light-Matter Interaction and Surface Phenomena within Density Functional Theory
- 5.12. FM Pauli Parkkinen, Helsingin yliopisto, Computational study of proton ordering in ice and icelike systems
- 13.12. FM Elina Sjöholm, Helsingin yliopisto, Computational study of the vibrational energy levels of adsorbed and clustered water and ammonia molecules

Merkittäviä laskennallisen kemian tapahtumia vuonna 2015:

- 24.-27.2. Mariapfarr Workshop on Theoretical Chemistry (Quantum Monte Carlo), Salzburg
- 10.-13.3. CSC Spring School in Computational Chemistry, Espoo
- 19.3., Kemian päivien laskennallisen kemian symposium
- 8.-13.6. ICQC2015, Beijing (+ satelliittikokoukset)
- 20.-24.9. 51st Symposium on Theoretical Chemistry, Potsdam

Espoossa 17.12.2014

Kari Laasonen, puheenjohtaja