

Laskennallisen kemian jaoston vuosikertomus 2015

- Vuoden 2015 gradupalkinto myönnetään DI Sampsa Vierroksen diplomityölle "Fosfolipidikäänteismisellien molekyyliidynaaminen karakterisointi". Aalto-yliopiston kemian laitoksella tehty työ käsittelee geeliytyviä fosfolipidejä. Tutkimusmenetelmänä on käytetty klassista molekyyliidynamiikkaa. Työssä on tutkittu erityisesti organogeelejä, joilla on lupaavia sovelluksia mm. huokoisten ja pitkulaisten nanomateriaalien valmistuksessa sekä lääkeaineiden annostelussa. Työssä on käsitelty sujuvasti ja kattavasti fosfolipidien rakennetta ja ominaisuuksia sekä käytettyjä simulaatio- ja analyysimenetelmiä. Simulaatioiden yksityiskohdat ja rajoitukset sekä käytetyt mallit on kuvattu erittäin hyvällä tarkkuudella. Kokeellisessa osuudessa työn tuloksia analysoidaan monipuolisesti. Työssä osoitetaan, että alan tutkimuksessa hyvin yleisesti käytetty voimakenttä ei itseasiassa sovellu orgaanisissa liuoksissa oleville lipideille ja myös vesiliuoksissa havaittu hyvä suorituskyky voi johtua virheiden kumoutumisesta. Nämä johtopäätökset ovat yleisesti merkittäviä fosfolipidien molekyyliidynaamisen tutkimuksen kannalta.
- Laskennallisen kemian jaoston gradupalkinto jaettiin toista kertaa vuonna 2015. Gradukilpailuun saatiin kolme korkeatasoista työtä, joten vuonna 2014 aloitettu uusi toimintamuoto jatkui onnistuneesti. Vuonna 2016 palkinnon mainostusta voisi lisätä entisestään, jotta ehdokkaita saataisiin enemmän myös Aallon ja HY:n ulkopuolelta.
- Jaoston verkkosivuja osoitteessa <http://kemiaseurat.fi/lki/> on ylläpidetty säännöllisesti. Emoseuran tarjoama sivustoalusta on erittäin toimiva.
- Laskennallisen kemian jaoston vuosikokous pidettiin Teoreettisen kemian talvikoulun yhteydessä, 17.12.2015. Talvikoulun aiheena oli "Computational Biochemistry" ja osallistujia oli n. 80.
- LASKEMO-tutkijakoulu päättyi tänä vuonna ja viimeinen tapaaminen järjestettiin 8.12.2015 Aalto-yliopistolla. Kokouksen yhteydessä päätettiin perustaa yhteistyön ylläpitämistä varten laskennallisen kemian verkosto, jossa olisivat mukana alan aktiiviset ryhmät. Ensimmäinen uusimuotoinen kokous päätettiin järjestää vuonna 2016 Itä-Suomen yliopiston Joensuun kampuksella.
- CECAMin Councilin jäsenenä ovat toimineet vuonna 2015 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).

Laskennallisen kemian väitöksiä vuodelta 2015:

- 6.2. FM Kai Ruusuvuori, Helsingin yliopisto, *Modelling the Role of Charge in Atmospheric Particle Formation Using Quantum Chemical Methods*
- 27.3. MSc Nergiz Özcan-Ketola, Helsingin yliopisto, *Computational studies of structural effects on magnetic resonance properties*
- 22.5. FM Mikko Muuronen, Helsingin yliopisto, *Activation of π -systems in Lewis acid mediated homogenous catalysis*
- 7.8. DI Marko Melander, Aalto-yliopisto, *Reactivity of Iron Nanostructures from Density Functional Theory*
- 20.8. FM Jarkko Vähäkangas, Oulun yliopisto, *Extended and Finite Graphenes: Computational Studies of Magnetic resonance and Magneto-Optic Properties*

- 20.11. FM Petra Vasko, Jyväskylän yliopisto, *Synthesis, characterization, and reactivity of heavier group 13 and 14 metallylenes and metalloid clusters: small molecule activation and more*
- 3.12. MSc Mikhail Kuklin, Itä-Suomen yliopisto, *Towards optimization of metallocene olefin polymerization catalysts via structural modifications: a computational approach*

Merkittäviä laskennallisen kemian tapahtumia vuonna 2016:

- 16.-19.2. Mariapfarr Workshop on Theoretical Chemistry (*Advanced Group Theoretical Methods in Theoretical Chemistry*), Mariapfarr
- 8.-11.3. CSC Spring School in Computational Chemistry, Espoo
- 17.-20.4. Girona Seminar in Predictive Catalysis
- 15.-17.6. 6th Baltic Electrochemistry Conference (sisältää myös lask. kemiaa), Helsinki
- 26.6-1.7. 8th Molecular Quantum Mechanics, Uppsala
- 28.8.-2.9. Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2016), Seattle
- 26.-29.9. 52nd Symposium on Theoretical Chemistry (*Chemistry in Solution*), Bochum

Helsingissä 31.12.2015

Antti Karttunen, jaoston puheenjohtaja