

## Laskennallisen kemian jaoston vuosikertomus 2017

### Jaoston vuoden 2017 gradupalkinto

Suomalaisten kemistien seuran Laskennallisen kemian jaoston Vuoden 2017 gradupalkinto myönnetään DI Tapio Peltomaan diplomityölle "*Parametrization of force fields for molecular dynamics simulations of organic solar cell polymers*".

Tapio Peltomaan diplomityö liittyy voimakenttäkehitykseen polymeerimallinnuksessa. Tutkielma on tehty Tampereen teknillisen yliopiston Kemian ja biotekniikan laboratoriossa. Tutkimuksen tavoitteena oli luoda ja verifioida uusi laskennallinen vuorovaikutusmalli, jolla voidaan mallintaa muun muassa polymeeriaurinkokennoissa käytetyn PBBDT-TPD-polymeerin käyttäytymistä. Tutkielmassa tehty uuden vuorovaikutusmallin systemaattinen parametrisointi on teknisesti varsin haastavaa ja Peltomaan työ osoittaa kokonaisuutena perustavaa laatua olevaa ymmärrystä aihealueesta sekä erinomaista toteutusta. Työn johdanto- ja kirjallisuusosuuksista näkyy vahva sekä klassisen molekyylihallinnuksen että parametrisointiin tarvittavan kvanttikemiallisen laskennan menetelmäkentän hallinta. Työ on edellyttänyt paitsi vahvaa osaamista kohteena olevan polymeerisysteemin mallinnuksesta, myös kykyä käyttää menestyksekkäästi menetelmäkehitystason analysointityökaluja sekä käsitellä onnistuneesti ja yksikäsitteiseen ratkaisuun päätyen tällaista vuorovaikutusmallia kehitettäessä syntyvä haasteellinen data.

Työssä kehitettiin vuorovaikutusmalli PBBDT-TPD-polymeerin käyttäytymisen mallintamiseen. Vuorovaikutusmallin kehitystyön sovellutuskohde on erityisesti tietäntyyppisten orgaanisten aurinkokennojen PBBDT-TPD-kerrosten rakennetason mallintaminen mutta tällaisella vuorovaikutusmallin parametrisointityöllä on myös laajempi käyttöalue, koska kehitettyä mallia voi hyödyntää myös muiden, samantapaisia rakenneosia sisältävien polymeerien malleissa.

Lisätietoja työstä on saatavilla osoitteesta <http://URN.fi/URN:NBN:fi:ttt-201708241725>

Laskennallisen kemian jaoston gradupalkinto jaettiin neljättä kertaa vuonna 2017.

### Kunniamaininta 2017

Laskennallisen kemian jaosto myönsi samassa yhteydessä myös kunniamaininnan ansiokkaasta lopputyöstä DI Outi Haapaselle. Outi Haapasen diplomityö "*Proton translocation channels in respiratory complex I probed by molecular dynamics simulations*" on esimerkillinen biomolekulaarisen mallinnuksen alan maisteritason lopputyö. Työ on tehty Tampereen teknillisen yliopiston biologisen fysiikan ja pehmeän aineen tutkimusryhmässä. Kirjallisuusosassa käsitellään kattavasti proteiinikompleksin toimintaa ja tällaisen laajan biomolekulaarisen systeemin mallintamista. Työn tulokset voivat auttaa ymmärtämään käsitellyn proteiinikompleksin toimintaa mitokondriokalvossa ja erityisesti sen roolia soluhengityksessä. Lisäksi molekyyli-tason ymmärrys kyseisestä proteiinista auttaa ymmärtämään sen toimintaa neurodegeneratiivisissa sairauksissa, kuten Alzheimerin taudissa.

Lisätietoja tutkielmasta on saatavilla osoitteesta <http://URN.fi/URN:NBN:fi:ttt-201612214897>

## Muuta

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

Laskennallisen kemian jaoston vuosikokous pidettiin Teoreettisen kemian talvikoulun yhteydessä, 21.12.2017. Talvikoulun aiheena oli "Molecular Energy and Electron Transfer" ja osallistujia oli n. 90.

Laskennallisen kemian verkostotapaaminen, Computational Chemistry Days, järjestettiin toista kertaa. Vuoden 2017 tapaaminen järjestettiin Jyväskylässä ja päävastuussa oli Gerrit Groenhof. Kaksipäiväiseen tapahtumaan osallistui noin 60 henkeä. Vuoden 2018 tapaaminen järjestetään Helsingin yliopistolla 28-29.5.2018. Järjestelytoimikuntaan kuuluu Outi Haapanen, Vivek Sharma, Ilpo Vattulainen ja Mikael Johansson.

Kemian päivät 2017 sisälsi laskennallisen kemian symposiumin (to 30.3.). Aiheena oli laskennallinen materiaalitutkimus. Pääpuhujina olivat Prof. Patrick Rinke (Aalto) ja Prof. Ilpo Vattulainen (HY/TTY). Symposium sujui onnistuneesti ja osanottajia oli n. 50.

Jyväskylän yliopistossa järjestettiin kansainvälinen HBOND2017-kokous (XXII Horizons in Hydrogen Bond Research) 10.-14.9.2017. Kokouksen järjestelykomitean puheenjohtajana oli Jan Lundell.

Helsingin yliopistossa järjestettiin kansainvälinen HRMS2017-kokous (High-Resolution Molecular Spectroscopy) 20.-25.8.2017. Kokouksen järjestelykomitean puheenjohtajana oli Lauri Halonen.

### Laskennallisen kemian väitöksiä vuodelta 2017:

- 20.1.2017, Lars Gell, Jyväskylän yliopisto, "Theoretical Investigations of Ligand Protected Silver Nanoclusters"
- 24.2.2017, Lauri Partanen, Helsingin yliopisto, "Ab initio investigations of the dynamic and thermodynamic properties of atmospherically relevant strong acids"
- 24.3.2017, Bhagwan Yadav, Helsingin yliopisto, "Quantitative modeling and analysis of drug screening data for personalized cancer medicine"
- 28.4.2017, Andreas Helfenstein, Helsingin yliopisto, "Fighting Bugs by Numbers: Bioinformatics Tools for Antimicrobial Drug Discovery"
- 28.6.2017, Ville Nissinen, Itä-Suomen yliopisto (Joensuu), "The roles of multidentate ether and amine electron donors in the crystal structure formation of magnesium chloride supports"
- 22.7.2017, Laura Bukonte, Helsingin yliopisto, "Modelling of defect formation and evolution in metals and silicon"
- 18.8.2017, Leonardo Garma, Oulun yliopisto, "Structural Bioinformatics Tools for the Comparison and Classification of Protein Interactions"
- 18.8.2017, Wei Ren, Helsingin yliopisto, "Mechanisms of ion beam modification of nanowires and nanotubes"
- 6.10.2017, Tuomas Rossi, Aalto-yliopisto, "Computational modeling of quantum aspects in plasmonic nanostructures"
- 13.10.2017, Syed Awais Rouf, Oulun yliopisto, "Paramagnetic NMR Chemical Shift Theory: Combined *ab Initio*/Density-Functional Theory Method"

- 18.10.2017, Vasantha Gowda, Oulun yliopisto / Luleå University of Technology, "Experimental and computational magnetic resonance studies of selected rare earth and bismuth complexes"
- 27.10.2017, Juha Hurmalainen, Jyväskylän yliopisto, "Experimental and computational studies of unconventional main group compounds: stable radicals and reactive intermediates"
- 1.12.2017, Nanna Myllys, Helsingin yliopisto, "From electronic structures to molecular-level cluster formation mechanisms in the atmosphere"
- 12.12.2017, Thuy Minh Dau, Itä-Suomen yliopisto (Joensuu), "Luminescent coinage metal complexes based on multidentate phosphine ligands"
- 15.12.2017, John Tracey, Aalto-yliopisto, "Simulating Atomic Force Microscopy at the Solid-Liquid Interface"

**Merkittäviä laskennallisen kemian tapahtumia vuonna 2018:**

- 28-29.5.2018, Computational Chemistry Days 2018, Helsinki
- 18-23.6.2018, ICQC 2018, Menton, Ranska
- 3-6.9.2018, Quantum Bio-Inorganic Chemistry, QBIC IV, Bath, Iso-Britannia
- 17-20.9.2018, 54<sup>th</sup> Symposium on Theoretical Chemistry: "Non-Covalent Interactions", Halle, Saksa
- Joulukuu, Teoreettisen kemian talvikoulu, Helsinki

Helsingissä 31.12.2017



Mikael Johansson, jaoston puheenjohtaja