

Suomen Kemian Seuran Laskennallisen kemian jaoston vuosikertomus 2018

Jaoston vuoden 2018 gradupalkinto

Suomalaisten kemistien seuran Laskennallisen kemian jaoston vuoden 2018 gradupalkinto myönnetään Olli Ahlstedtin diplomityölle “Density functional study of hydrogen adsorption on Pt-Ni nanoclusters”.

Olli Ahlstedtin diplomityö alkaa erinomaisella johdannolla ja motivointiosuudella. Työ liittyy yhteiskunnallisesti hyvin ajankohtaiseen aiheeseen, vetytalouteen. Tutkielma on tehty Tampereen teknillisen yliopiston fysiikan laboratoriossa. Siinä käydään läpi sähkökemiallisen katalyyysin perusteet, sekä mallinnuksessa käytetyt tiheysfunktioalimenetelmät hyvin selkeästi ja sujuvasti. Työssä on tutkittu laskennallisen kemian menetelmillä pienten platina-nikkeli-nanoryppäiden aktiivisuutta sähkökemiallisessa vedynkehitysreaktiossa. Saostamalla nikkeliä ja platinaa voidaan vähentää platinan tarvetta, mikä on ensiarvoisen tärkeää platinavarantojen rajallisuuden vuoksi. Laskennallisessa osuudessa käytetyt mallisysteemit on kuvattu hienosti ja työn tulokset on käsitelty järjestelmällisesti. Tutkielma on erinomainen kokonaisuus, joka osoittaa tekijän paitsi syvällisen perehtyneisyyden laajaan aihealueeseen jossa laskennallisen kemian tutkimuksella on merkittävä rooli, myös kykyä tuoda laskennallisen mallinnuksen tärkeys esiin isossa kuvassa.

Lisätietoja työstä on saatavilla osoitteesta <https://dspace.cc.tut.fi/dpub/handle/123456789/25901>

Laskennallisen kemian jaoston gradupalkinto jaettiin viidettä kertaa vuonna 2018.

Kunniamaininta 2018

Laskennallisen kemian jaosto myönsi samassa yhteydessä myös kunniamaininnan ansiokkaasta lopputyöstä Rasmus Kronbergille. Rasmus Kronbergin diplomityö “Ab initio molecular dynamics simulation of the platinum–water interface: Insights into structure and electrocatalytic properties” on esimerkillinen maisteritason lopputyö laskennallisen sähkökemian alueelta. Työ on tehty Aalto-yliopiston Kemian ja materiaalitieteen laitoksella. Kirjallisuusosassa on kuvattu syvällisesti työssä käytetyt tiheysfunktioalimenetelmät ja kuvattu selkeästi sekä laskennallisen sähkökemian avainkäsitteet että työssä käytettävät mallisysteemit. Työn laskennallinen osuus käsittelee platina-vesi -rajapintaa, joka on hyvin keskeisessä roolissa esimerkiksi sähkökemiallisen vedynkehitysreaktion tehokkuuden parantamisessa. Työssä on saavutettu uusia tieteellisiä tuloksia, joita on onnistuneesti verrattu kokeellisiin havaintoihin. Työ kytkeytyy yhteiskunnallisesti erittäin ajankohtaiseen aiheeseen, vetytalouteen, ja se on hieno esimerkki aihealueesta, missä laskennallisen kemian tutkimus on avainroolissa kokeellisten havaintojen selittämisessä ja uusien materiaalien kehitystyössä.

Lisätietoja työstä on saatavilla osoitteesta <https://aaltodoc.aalto.fi/handle/123456789/33668>

Muuta

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

- Laskennallisen kemian jaoston vuosikokous pidettiin Teoreettisen kemian talvikoulun yhteydessä, 12.12.2018. Talvikoulun aiheena oli "Machine Learning in Theoretical Chemistry" ja osallistujia lähes 200 – siis tuplasti enemmän kuin koskaan aiemmin.
- Laskennallisen kemian verkostotapaaminen, Computational Chemistry Days, järjestettiin kolmatta kertaa. Vuoden 2018 tapaaminen järjestettiin Helsingissä, järjestäjinä Outi Haapanen, Mikael Johansson, Vivek Sharma, sekä Ilpo Vattulainen. Kaksipäiväiseen tapahtumaan osallistui yli sata henkeä. Vuoden 2019 tapaaminen järjestetään Kuopiossa ja järjestelytoimikunnan puheenjohtaja on Antti Poso.
- Kemian päivillä 2019 on laskennallisen kemian symposium 28.3. Ulkomailta kutsuttuina puhujina ovat FT Mikko Muuronen (BASF SE) ja Dr. Peter Horvath, Biological Research Centre of the Hungarian Academy of Sciences.

Laskennallisen kemian väitöksiä vuodelta 2018

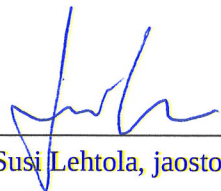
- 2.3.2018, Outi Kontkanen, Tampereen teknillinen yliopisto, "Modeling of Charge Transfer at Dye-Semiconductor Interfaces in p-Type Solar Cells"
- 2.3.2018, Carl-Mikael Suomivuori, Helsingin yliopisto, "Multiscale computational studies of biological light capture"
- 4.4.2018, Timo Vuorela, Tampereen teknillinen yliopisto, "Computational Modelling of Lipoprotein Particles"
- 6.4.2018, Vesa Aho, Jyväskylän yliopisto, "Modeling of intracellular transport in realistic cell geometries"
- 20.4.2018, Akseli Mansikkamäki, Jyväskylän yliopisto, "Theoretical and Computational Studies of Magnetic Anisotropy and Exchange Coupling in Molecular Systems"
- 1.6.2018, Tuomas Löytynoja, Oulun yliopisto, "Quantum and quantum-classical calculations of core-ionized molecules in varied environments"
- 24.8.2018, Noora Hyttinen, Helsingin yliopisto, "Computational studies on chemical ionization and reaction rates of atmospherically relevant oxidized multifunctional compounds"
- 12.9.2018, Lidija Zivanovic, Aalto-yliopisto, "Structural and dynamic properties of solid-liquid interfaces studied by Molecular Dynamics simulations"
- 14.9.2018, Timo Weckman, Aalto-yliopisto, "First Principles Multiscale Modelling of the Atomic Layer Deposition of Al₂O₃ and ZnO".
- 26.10.2018, Matti Javanainen, Tampereen yliopisto, "Diffusion of Lipids and Proteins in Complex Membranes"
- 26.10.2018, Lasse Karhu, Helsingin yliopisto, "Computational analysis of orexin receptors and their interactions with natural and synthetic ligands"
- 26.10.2018, Sampo Kukkurainen, Tampereen yliopisto, "Molecular dynamics of talin-integrin interaction"
- 23.11.2018, Nico Holmberg, Aalto-yliopisto, "Hydrogen Evolution Reaction on Carbon Nanotubes: Insights from Electronic Structure Theory"
- 13.12.2018, Sami Rissanen, Helsingin yliopisto, "Modulation of Membrane Lipid Receptors Explored via Multiscale Computer Simulations"
- 14.12.2018, Sergei Posysaev, Oulun yliopisto, "Applications of density functional theory for modeling metal-semiconductor contacts, reaction pathways, and calculating oxidation states"

- 21.12.2018, Jyrki Rantaharju, Oulun yliopisto, "Magnetization dynamics in paramagnetic systems"

Merkittäviä laskennallisen kemian tapahtumia vuonna 2019

- 11.-17.7.2019, 10th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Tromsø, Norja, <http://istcp-2019.org/>.
- Joulukuu, Teoreettisen kemian talvikoulu, Helsinki

Helsingissä 31.12.2018,



Susi Lehtola, jaoston puheenjohtaja