

Molecular Modeling of Small and Medium Size Molecular Systems. Structure and Spectroscopy

Teobald Kupka¹, Michał Stachów¹, Marzena Nieradka¹, Klaudia Radula-Janik¹, Paweł Groch¹, Małgorzata Broda¹, Aneta Buczek¹, Leszek Stobiński², Karol Pasterny³, Elżbieta Chelmecka⁴, Stephan Sauer⁵, Jacob Kongstead⁶, Hanna Kjeær⁷, Jakub Kaminsky⁸ and Tadeusz Pluta⁹

¹University of Opole, Faculty of Chemistry, 45-052 Opole, Poland; ²Institute of Physical Chemistry, PAS, 01-224 Warsaw, Poland; ³A. Chełkowski Institute of Physics, University of Silesia, 40-007, Katowice, Poland; ⁴Division of Statistics, Department of Instrumental Analysis, Medical University of Silesia, 41-200, Sosnowiec, Poland; ⁵University of Copenhagen, Department of Chemistry, Universitetsparken 5, 2100 Copenhagen, Denmark; ⁶Department of Physics, Chemistry and Pharmacy, University of Southern Denmark, DK-5230 Odense, Denmark; ⁷Department of Chemistry, University of Copenhagen, DK-2100 Copenhagen, Denmark; ⁸Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, 166 10 Prague, Czech Republic; ⁹Institute of Chemistry, University of Silesia, 40-007 Katowice, Poland

teobaldk@yahoo.com

KUKDM, Zakopane 28.02-01.03.2013



Autor



Dr hab. Teobald Kupka, prof. U. O.
Uniwersytet Opolski
Wydział Chemii
Ul. Oleska 48, 45-052 Opole
teobaldk@yahoo.com;
teobaldk@gmail.com
Tel. 77 452 7126; 665 921 475



WPROWADZENIE

1. Wstęp
2. Bilans roku 2012
3. Szczegóły
4. Problematyka naukowa
5. Podziękowania



BILANS ROKU 2012

Publikacje:

Opublikowane	7
--------------	---

Wysłane	1
---------	---

Razem	8
-------	---

Ponadto:

Praca licencjacka	1
-------------------	---

Prace doktorskie (kontynuacja + nowe)	3
--	---

A. Publikacje opublikowane w 2012 r.

1. E. Chełmecka, K. Pasterny, T. Kupka* and L. Stobiński,
OH-functionalized open-ended armchair single-wall carbon nanotubes (SWCNT) studied by
density functional theory,
J. Mol. Model, 18 (2012) 1463-1472, (IF= 1.797 w 2011, cyt. = 2). Gaussian. Obliczenia wykonano
przy pomocy oprogramowania i sprzętu WCSS Wrocław.
2. E. Chełmecka, K. Pasterny, T. Kupka*, and L. Stobiński,
"DFT studies of COOH tip-functionalized zigzag and armchair single wall carbon nanotubes",
J. Mol. Model., 18 (2012) 2241-2246 (IF=1.797 w 2011, cyt. = 5). Gaussian. Obliczenia wykonano
przy pomocy oprogramowania i sprzętu WCSS Wrocław.
3. T. Kupka*, E. Chełmecka, K. Pasterny, M. Stachów and L. Stobiński,
DFT calculations of structures, ¹³C NMR chemical shifts and Raman RBM mode of
simple models of small diameter (4.0) zigzag carboxylated single wall carbon nanotubes,
Magn. Reson. Chem., 50 (2012) 142-151 (IF=1.437 w 2010, cyt. = 0). Gaussian. Obliczenia
wykonano przy pomocy oprogramowania i sprzętu ACK Cyfronet Kraków + WCSS Wrocław.

A. Publikacje opublikowane w 2012 r. (kontynuacja)

4. T. Kupka*, M. Stachów, E. Chełmecka, K. Pasterny and L. Stobiński,
"DFT calculations of structures, ^{13}C NMR chemical shifts and Raman RBM mode of simple models of ultra small diameter (4.0) zigzag hydroxylated single wall carbon nanotubes",
Synth. Metals, 162 (2012) 573-583 (IF=1.829 in 2011, cyt. = 0). Gaussian. Obliczenia wykonano przy pomocy oprogramowania i sprzętu ACK Cyfronet Kraków + WCSS Wrocław.
5. T. Kupka*, M. Nieradka, M. Stachów, T. Pluta, P. Nowak, H. Kjær, J. Kongsted, J. Kaminsky*,
„Basis set convergence of indirect spin-spin coupling constants in the Kohn-Sham limit for several small molecules”
J. Phys. Chem. A, 116 (2012) 3728–3738 (IF =2.946 in 2011, cyt. = 1) Gaussian. Obliczenia wykonano przy pomocy oprogramowania i sprzętu ACK Cyfronet Kraków + WCSS Wrocław.
6. A. Buczek, T. Kupka*, S. P. A. Sauer, M. A. Broda,
Estimating the carbonyl anharmonic vibrational frequency from affordable harmonic frequency calculations,
J. Mol. Model., 18 (2012) 2471-2478, (IF=1.797 in 2011, cyt. = 1). Gaussian. Obliczenia wykonano przy pomocy oprogramowania i sprzętu ACK Cyfronet Kraków + WCSS Wrocław.
7. M. A. Broda*, A. Buczek, T. Kupka, J. Kaminsky*
“Anharmonic Frequencies of Solvated Molecules in the Complete Basis Set Limit”,
Vibr. Spectrosc., 63 (2012) 432-439 (IF=1.650 in 2011, cyt. = 0) Gaussian. Obliczenia wykonano przy pomocy oprogramowania i sprzętu ACK Cyfronet Kraków + WCSS Wrocław.

B.

Oprogramowanie i sprzęt ACK Cyfronet i WCSS Wrocław pozwoliły również na zakończenie jednej pracy licencjackiej:

1. Katarzyna Łebek,
Modelowanie molekularne parametrów strukturalnych i spektroskopowych
wybranych antybiotyków β -lactamowych (promotor dr hab. T. Kupka, obrona
28.06.2012).

C. Ponadto 24 wystąpień (14 wykładów i 10 posterów konferencyjnych)
opierało się na materiale obliczeniowym uzyskanym zarówno w Cyfronecie
jak i w WCSS Wrocław.

Badania koncentrowały się na przewidywaniu struktury geometrycznej oraz wybranych parametrów spektroskopowych (NMR, IR, Raman) małych molekuł modelowych oraz jednościennych nanorurek węglowych (SWCNT) przed i po funkcjonalizowaniu.

SWCNT: podstawienie końca grupami -OH i -COOH

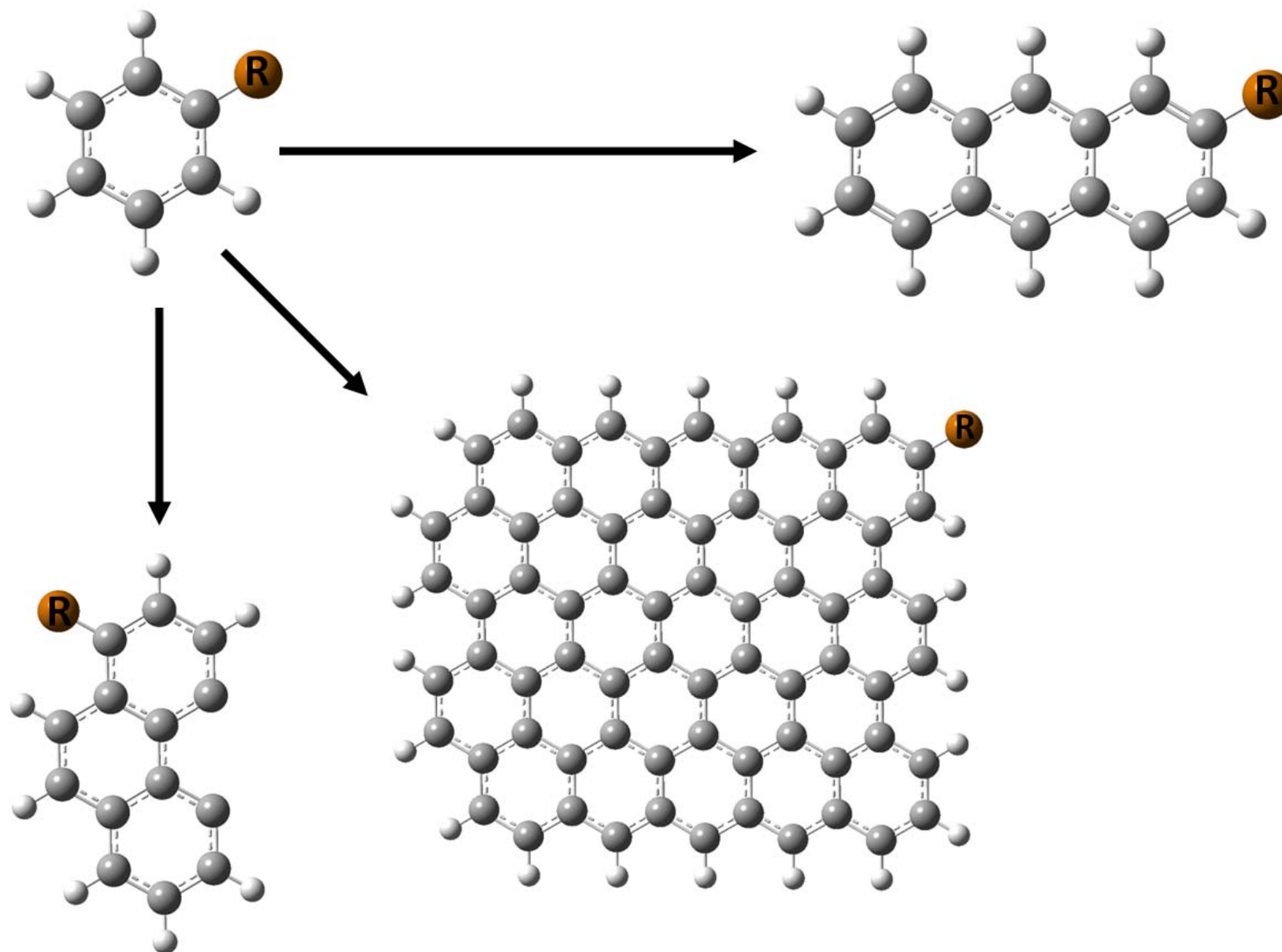
NMR: stałych sprzężeń spin-spin do granicy bazy
zupelnej (CBS)

IR: anharmoniczność metodą VPT2 (również CBS)

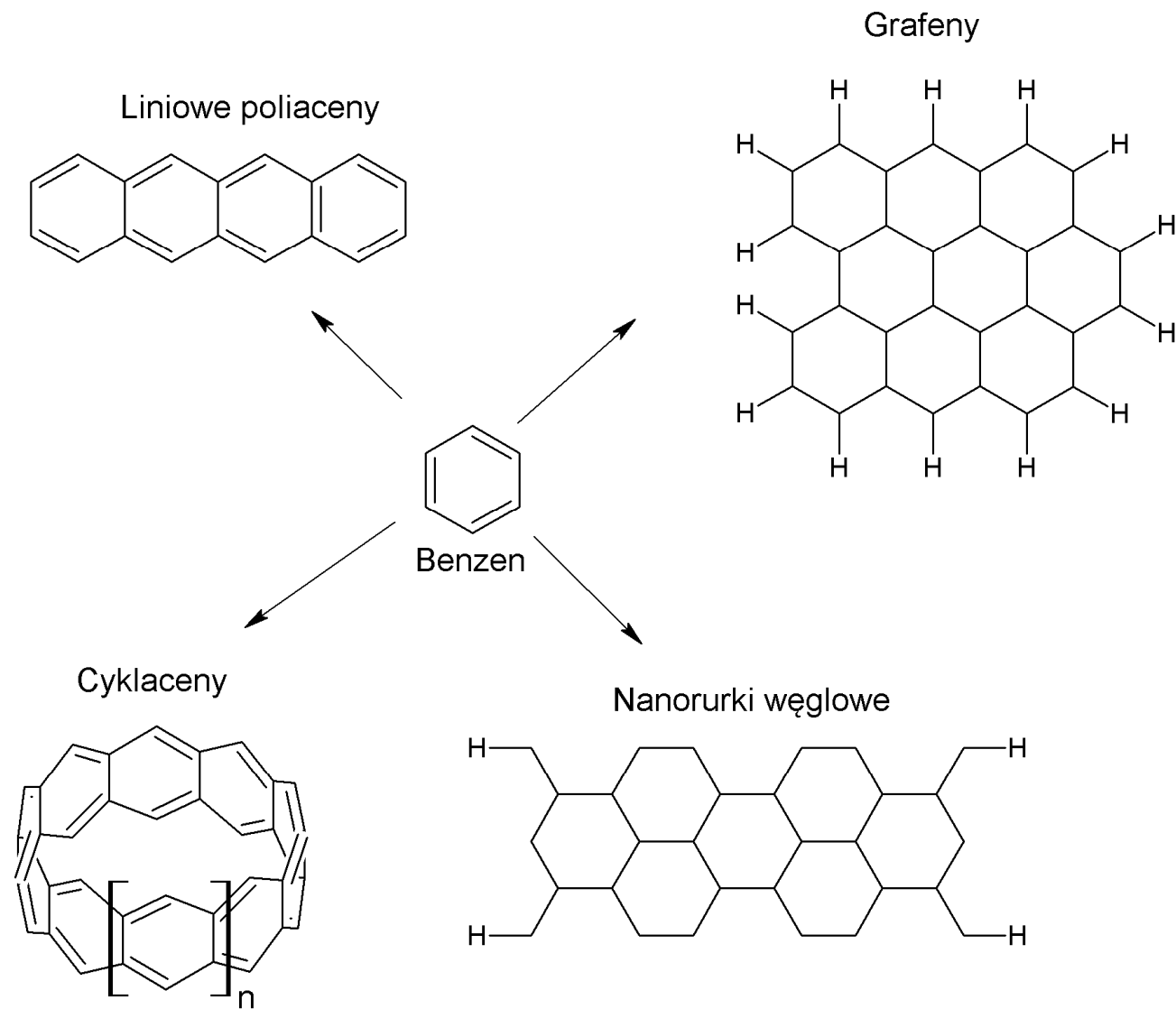
Obliczenia - Gaussian 09; **metody** - DFT, HF;
CFOUR (CCSD(T))



Uporządkowane materiały węglowe



Uporządkowane materiały węglowe



Uporządkowane materiały węglowe

of small size (from STO-3G to 3-31G, and finally 6-31G*) for full geometry optimization were selected. This is a typical approach allowing obtaining fairly accurate results starting from a rough optimization [34]. The second step involved calculation of vibrational frequencies to ensure the ground state of the molecule (no negative frequencies).

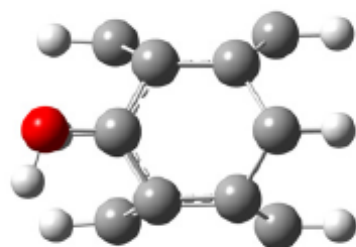
As before [33], fairly simple model systems were selected and their atom, bond and molecule arbitrary numberings are shown

It was possible to estimate the values of regularly converging data toward the infinitely large molecule size using an exponential-like two-parameter fit [62–64]:

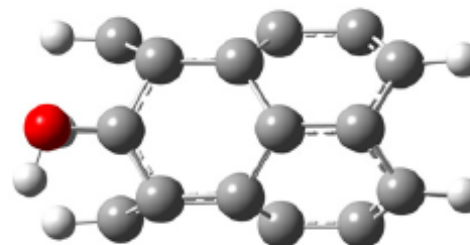
$$Y(x) = Y(\infty) + \frac{B}{x^3}, \quad (4)$$

where “x” is the size unit of the ring system and $Y(\infty)$ and B are the fitting parameters.

4r-1 bamboo unit



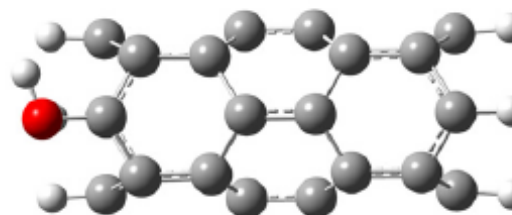
4r-2 bamboo units



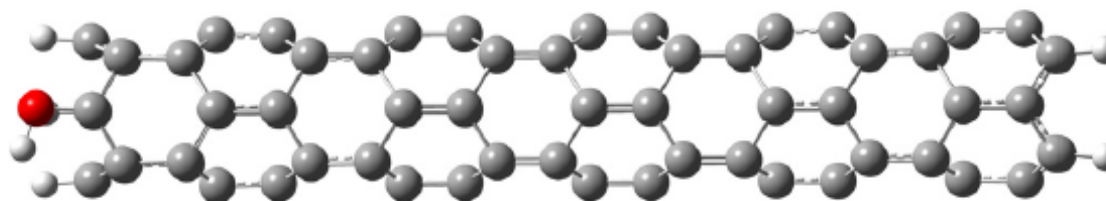
front



4r-3 bamboo units



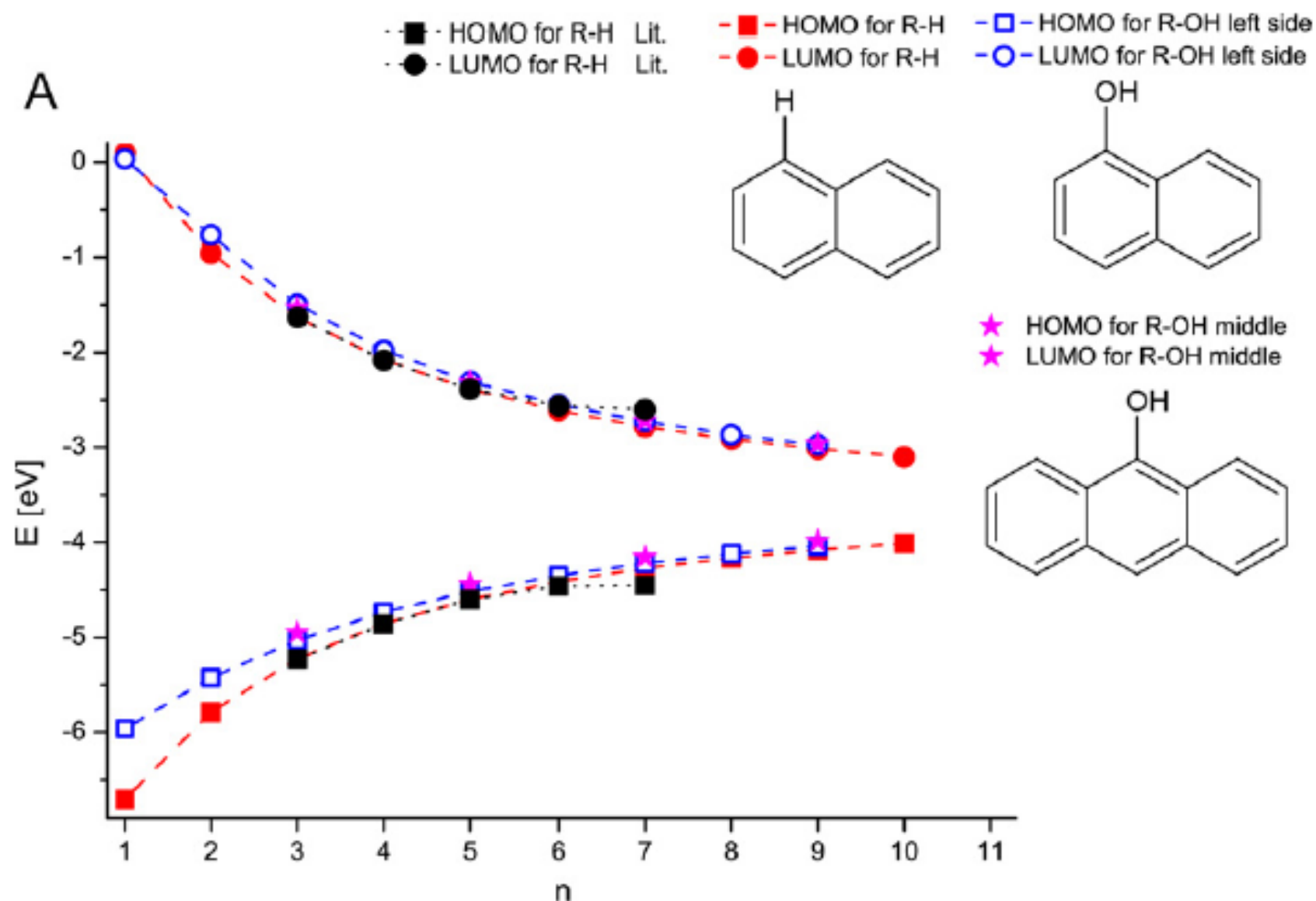
4r-10 bamboo units



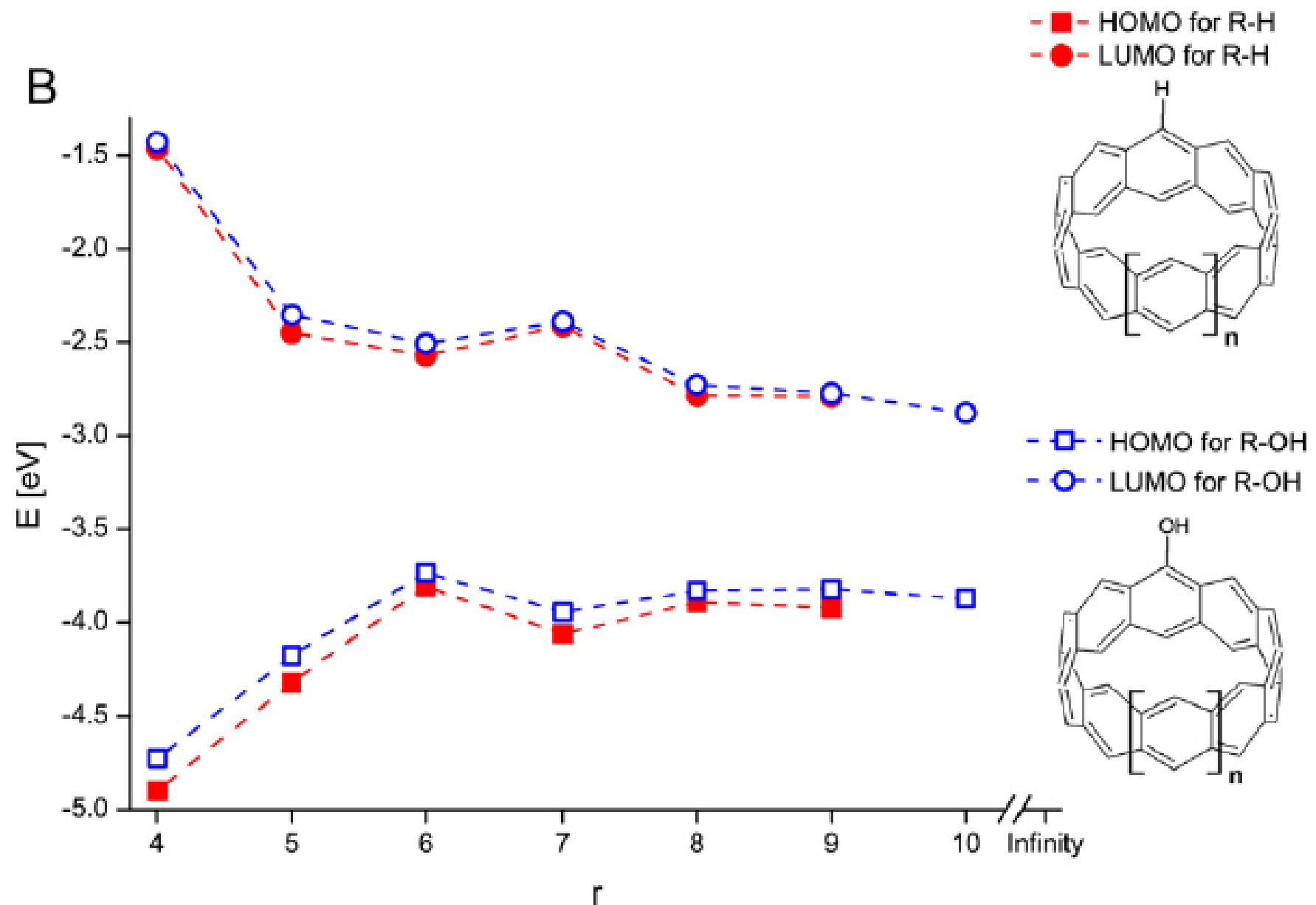
Scheme 3. Ultra-narrow zigzag (4,0) OH— functionalized SWCNT models containing one, two, three and ten units (including model labeling).

Uporządkowane materiały węglowe

T. Kupka et al. / Synthetic Metals 162 (2012) 573–583



Uporządkowane materiały węglowe



Uporządkowane materiały węglowe

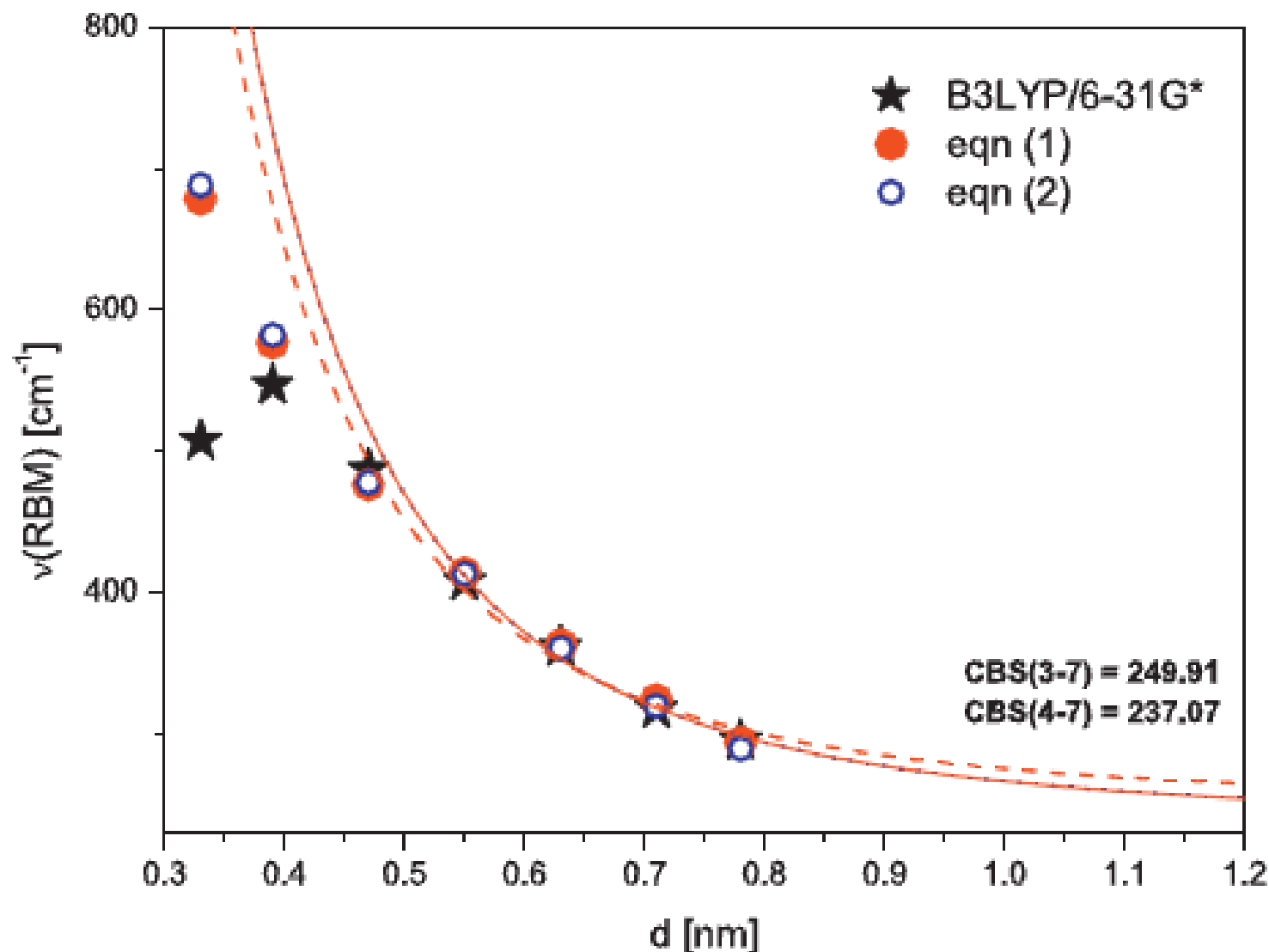


Fig. 8. Convergence of B3LYP/6-31G* calculated Raman RBM in monohydroxylated cyclic acenes. The results of empirical calculated frequency with formulas (1) and (2) are also shown. For the reader's convenience the individual points are connected and the values estimated from Eq. (4) for the infinitely large systems shown.

Uporządkowane materiały węglowe

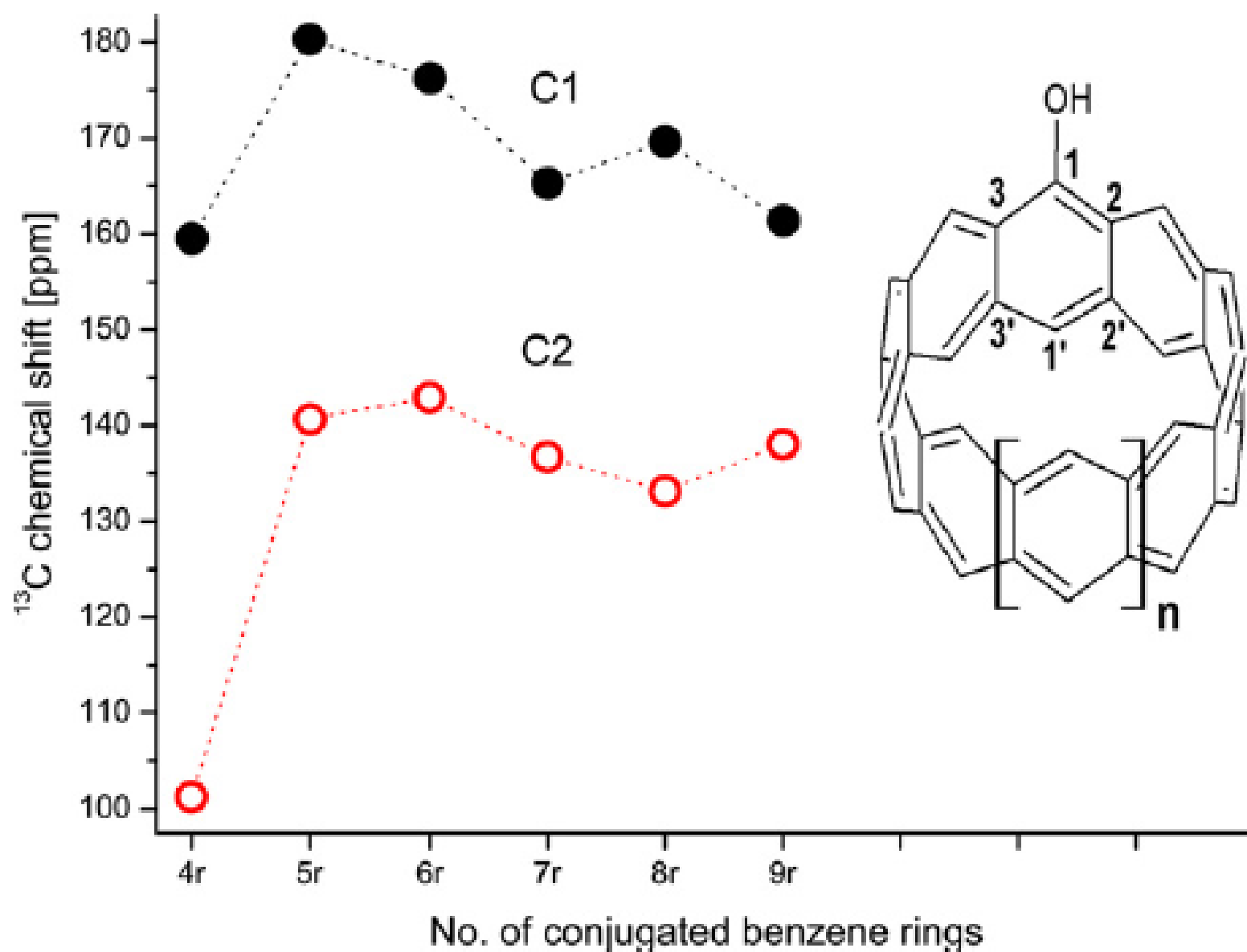
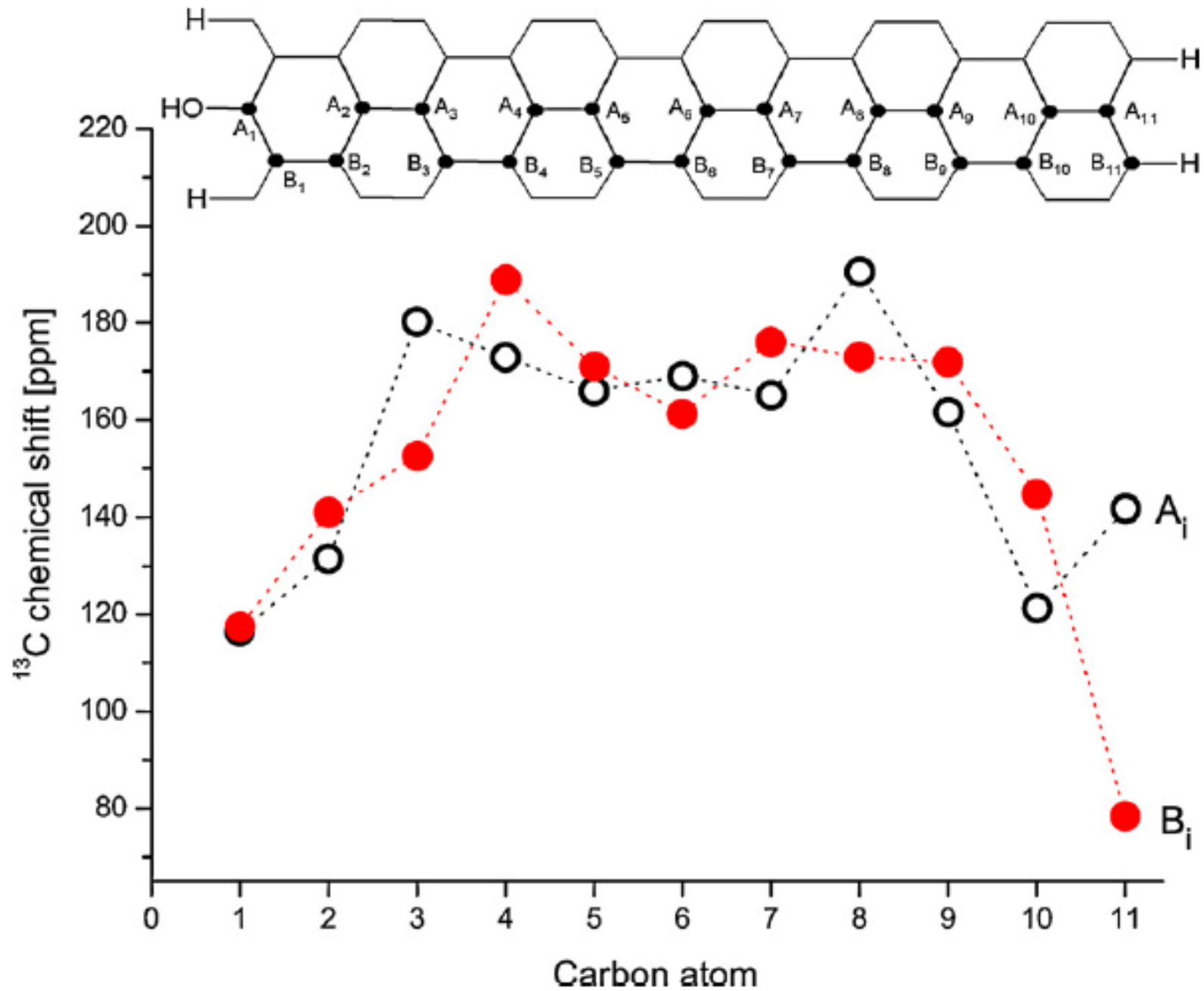
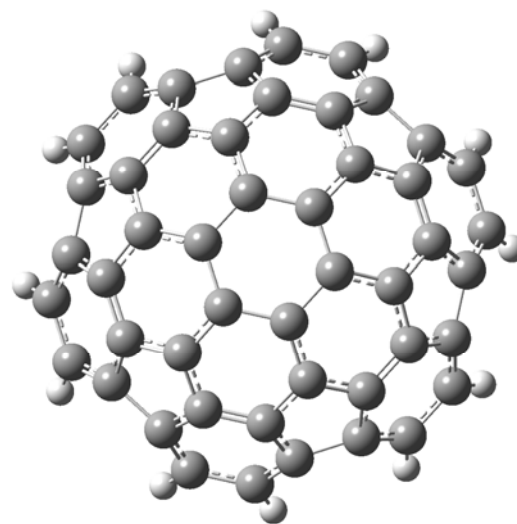
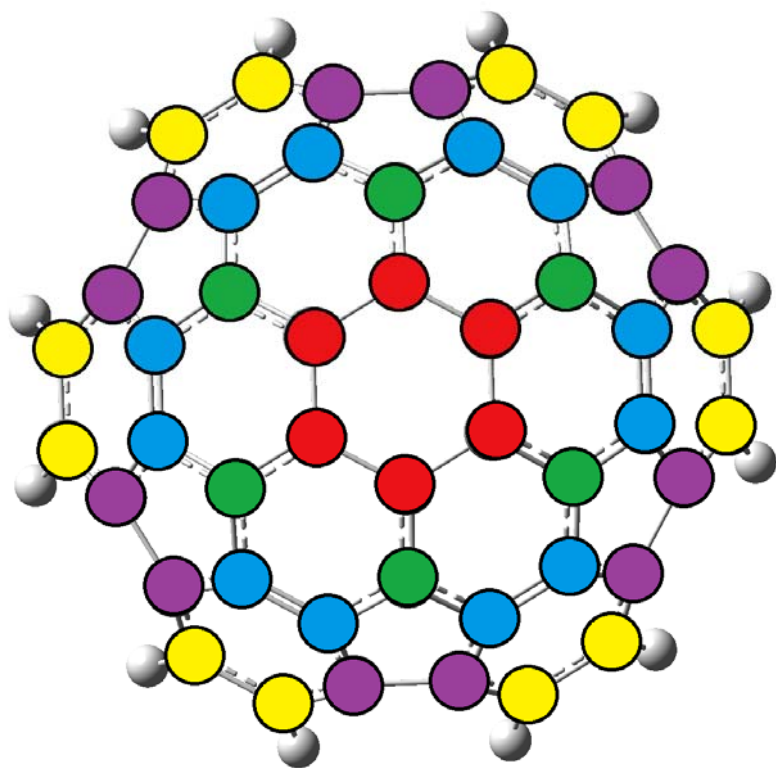


Fig. 10. Dependence of ^{13}C NMR chemical shift of monohydroxylated cyclic acenes on the model size. For the reader's convenience the individual points are connected.

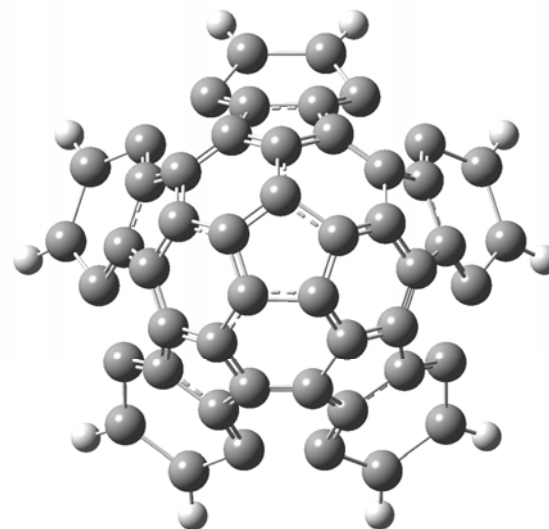
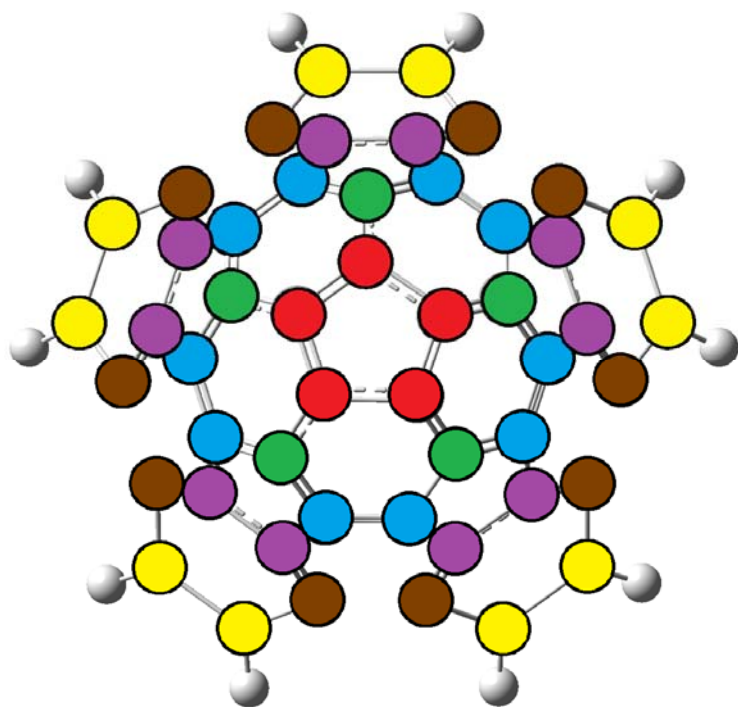
Uporządkowane materiały węglowe



Uporządkowane materiały węglowe



Uporządkowane materiały węglowe



Wnioski:

1. Owocna kontynuacja testowania metody CBS NMR (stałe sprzężeń spinowo-spinowych).
2. Zastosowanie CBS do wyznaczania innych parametrów molekularnych i spektroskopowych (struktura geometryczna, częstości drgań harmoniczných i anharmoniczných)
3. Obliczenia DFT dla SWCNTs



Podziękowania:

1. ACK Cyfronet i WCSS Wrocław
(oprogramowanie, sprzęt komputerowy
i pomoc techniczna).
2. Uniwersytet Opolski, Wydział Chemii

Acknowledgments

This work was supported by the Faculty of Chemistry, University of Opole (Grant 8/WCH/2012-S) and the National Centre for Research and Development through the PBS1 Grant for the years 2012-2015 NR PBS1/A5/15/2012.

Marzena Nieradka, Michał Stachów, Klaudia Radula-Janik and Aneta Buczek are recipients of Ph. D. fellowships from a project funded by the European Union Social Funds. The calculation facilities and software in the Supercomputing and Networking Center ACK CYFRONET AGH in Krakow and calculation facilities and software at WCSS Wrocław are also acknowledged.



Z Kraju Ryżu, Herbaty i Tajfunów do ... KUKDM Zakopane'2013



Dziękuję za uwagę

