

# Obliczanie Dokładnych Parametrów NMR

Charakterystyka struktury i parametrów spektroskopowych  
wybranych układów molekularnych

**Teobald Kupka**

*Uniwersytet Opolski, Wydział Chemii, Opole*

*e-mail: [teobaldk@yahoo.com](mailto:teobaldk@yahoo.com)*



# Autor



**Dr hab. Teobald Kupka**  
Uniwersytet Opolski  
Wydział Chemii  
Ul. Oleska 48, 45-052 Opole  
teobaldk@yahoo.com;  
teobaldk@gmail.com  
Tel. 77 452 7130; 665 921 475  
Fax 77 441 0740



# BILANS ROKU 2011

## Publikacje:

|              |    |
|--------------|----|
| Opublikowane | 6  |
| W druku      | 4  |
| Po recenzji  | 2  |
| Wysłane      | 1  |
| Razem        | 13 |

## Ponadto:

|                   |   |
|-------------------|---|
| Habilitacja       | 1 |
| Praca magisterska | 2 |
| Praca licencjacka | 1 |

## A. Publikacje opublikowane w 2011 r.

### Badania koncentrowały się na przewidywaniu struktury geometrycznej oraz wybranych parametrów spektroskopowych (NMR, IR, Raman) małych molekuł modelowych

1. A. Buczek, T. Kupka, M. A. Broda\*, „Extrapolation of water and formaldehyde harmonic and anharmonic frequencies to the B3LYP/CBS limit using polarization consistent basis sets”, *J. Mol. Model.*, 17 (2011) 2029–2040, (IF=1.871 in 2010). *Obliczenia wykonano częściowo w Cyfronecie w Krakowie.*
2. A. Buczek, T. Kupka, M. A. Broda\*, „Estimation of formamide harmonic and anharmonic modes in the Kohn-Sham limit using the polarization consistent basis sets”, *J. Mol. Model.*, 17 (2011) 2265–2274 (IF=1.871 in 2010). *Obliczenia wykonano częściowo w Cyfronecie w Krakowie.*
3. T. Kupka\*, M. Stachów, M. Nieradka, J. Kaminsky, T. Pluta, S. P. A. Sauer\*, „From CCSD(T)/aug-cc-pVTZ-J to CCSD(T) Complete Basis Set Limit Isotropic Nuclear Magnetic Shieldings via affordable DFT/CBS Calculations”, *Magn. Reson. Chem.*, 49 (2011) 231-236. (IF=1.247 in 2010). *Obliczenia wykonano częściowo w Cyfronecie w Krakowie.*
4. A. M. Buczek, T. Ptak, T. Kupka, M. A. Broda\*, „Experimental and theoretical NMR and IR studies of the side-chain orientation effects on the backbone conformation of dehydrophenylalanine residue”, *Magn. Reson. Chem.*, 49 (2011) 343-349. (IF=1.247 in 2010). *Obliczenia wykonano częściowo w Cyfronecie w Krakowie.*

## A. Publikacje opublikowane w 2011 r. (kontynuacja)

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

1. E. Chelmecka, K. Pasterny, T. Kupka\* and L. Stobiński,

„DFT studies of OH-functionalized open-ended zigzag, arm-chair and chiral single wall carbon nanotubes”,

Phys. Status Solidi A, 208 (2011) 1774-1777, (IF=1.458 w 2010).

2. T. Kupka\*, M. Stachów, M. Nieradka, L. Stobiński,

„DFT calculation of structures and NMR chemical shifts of simple models of small diameter zigzag single wall carbon nanotubes (SWCNTs)”,

*Magn. Reson. Chem.*, 49 (2011) 549-557. (IF=1.247 in 2010). *Obliczenia wykonano częściowo w Cyfronecie w Krakowie.*

## B. W druku w 2011:

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, w druku, DOI 10.1007/s00894-011-1181-6, (IF=1.871 in 2010).
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., JMMO2383R1, w druku, (IF=1.871 in 2010).
3. 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., w druku, JMMO2287R1, (IF=1.871 in 2010). *Obliczenia wykonano częściowo w Cyfronecie w Krakowie.*
4. T. Kupka\*, E. Chełmecka, K. Pasterny, M. Stachów and L. Stobiński,  
„DFT calculations of structures, <sup>13</sup>C NMR chemical shifts and Raman RBM mode of simple models of small diameter (4.0) zigzag carboxylated single wall carbon nanotubes”,  
Magn. Reson. Chem., w druku . (IF=1.247 in 2010). *Obliczenia wykonano częściowo w Cyfronecie w Krakowie.*

## C. Wysłano ponownie po recenzjach w 2011:

1. T. Kupka\*, E. Chelmecka, K. Pasterny, M. Stachów and L. Stobiński, "DFT calculations of structures,  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts and Raman RBM mode of simple models of ultra small diameter (4.0) zigzag hydroxylated single wall carbon nanotubes",  
Wysłano do Synth. Metals, 25 Aug 2011. SYNMET-S-11-00824-2, R1. (IF=1.871 in 2010). *Obliczenia wykonano częściowo w Cyfronecie w Krakowie.*

## **D. Wyślano do druku:**

- 1. 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”**  
**Wyślano 30. 12. 2011r do J. Phys. Chem. A (IF = 2.732 in 2010) *Obliczenia wykonano częściowo w Cyfronecie w Krakowie.***
- 2. M. A. Broda, A. Buczek, T. Kupka, J. Kaminsky**  
**“Anharmonic Frequencies of Solvated Molecules in the Complete Basis Set Limit”,**  
**wyślano do Vibr. Spectrosc. (IF = 2.083) *Obliczenia wykonano częściowo w Cyfronecie w Krakowie.***



**F. Ponadto 12 wystąpień (8 wykładów i 4 postery konferencyjne) opierało się na materiale obliczeniowym uzyskanym zarówno w WCSS jak i w Cyfronecie.**

**Oprogramowanie i sprzęt WCSS** pozwoliły również na zakończenie jednej pracy habilitacyjnej:

1. Teobald Kupka,

dwóch prac magisterskich

1. Marzena Nieradka:

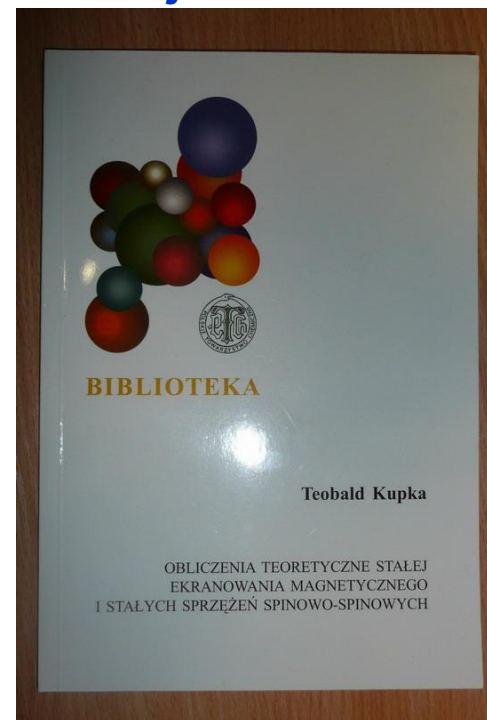
**TEORETYCZNE OBLICZANIE PARAMETRÓW NMR  
WYBRANYCH MOLEKUŁ ORGANICZNYCH: CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>,  
C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> i C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>.**

2. Michał Stachów:

**TEORETYCZNE OBLICZANIE PARAMETRÓW NMR WYBRANYCH MOLEKUŁ  
NIEORGANICZNYCH: N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> i NH<sub>3</sub>)**

oraz jednej pracy licencjackiej

1. Justyna Skórzewska: „Modelowanie molekularne leków przeciwwgrzybiczych i przeciwnowotworowych na przykładzie 5-fluorouracylu i 5-fluorocytosyny”



**NMR:** zbieżność stałych ekranowania magnetycznego, przesunięcia chemicznego i stałych sprzężeń spin-spin do granicy bazy zupełnej (CBS)

**IR:** anharmoniczność metodą VPT2 (również CBS)

**SWCNT:** podstawienie końca grupami -OH i -COOH

**Obliczenia** - Gaussian 09; **metody** - DFT, HF



# Wnioski:

1. Owocna kontynuacja testowania metody CBS NMR (stałe ekranowania magnetycznego oraz stałe sprzężeń spinowo-spinowych).

2. Potencjalne zastosowania dla większych molekuł (locally dense basis sets).

3. Zastosowanie CBS do wyznaczania innych parametrów molekularnych i spektroskopowych (struktura geometryczna, częstości drgań harmoniczných i **anharmoniczných**

4. Obliczenia DFT dla SWCNTs



# Podziękowania:

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



# Dziękuję za uwagę

