



Od nowych materialow do peptydobiomimetykow.

Badania podstawowe wspomagane obliczeniami w WCSS

**Teobald Kupka,
Małgorzata A. Broda**

Uniwersytet Opolski, Wydział Chemii, Opole
e-mail: teobaldk@yahoo.com; broda@uni.opole.pl



WCSS Wrocław, 05.02.2013

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	9
Wysłane	1
Razem	10

Ponadto:

Praca licencjacka	1
Prace doktorskie (kontynuacja + nowe)	4 + 2

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. = 0) 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

A. Publikacje opublikowane w 2012 r. (kontynuacja)

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

8. D. Siodłak, A. Macedowska-Capiga, M.A.Broda, A.E.Kozioł „Isomerisation cis-trans of N-Methyl-a,b-dehydroamino acids” Biopolymers 2012, 58, 466 – 478.

Gaussian. Obliczenia wykonano przy pomocy oprogramowania i sprzętu ACK Cyfronet Kraków + WCSS Wrocław

9. A. Buczek, R. Wałęsa, M. A. Broda „ β -Turn tendency in N-methylated peptides with dehydrophenylalanine residue. DFT study” Biopolymers, 2012, 97 (7) 518 – 528.

Gaussian. Obliczenia wykonano przy pomocy oprogramowania i sprzętu ACK Cyfronet Kraków + WCSS Wrocław

B.

Oprogramowanie i sprzęt WCSS 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 WCSS
i w Cyfronecie.**

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

Ponadto przeprowadzono szczegółową analizę konformacyjną (teoretyczną i eksperymentalną) wybranych dehydropeptydów.

SWCNT: podstawienie końca grupami -OH i -COOH
Peptydomimetyki

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

IR: anharmoniczność metodą VPT2 (również CBS)

Dehydropeptydy

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



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
4. Skuteczna modyfikacja struktury dehydropeptydów (eksperyment i teoria)



Podziękowania:

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



Z Kraju Ryżu, Herbaty i Tajfunów do ... Wrocławia'2013



Dziękuję za uwagę

