

Estudio de Líquidos Complejos Mediante Simulaciones Masivas en Paralelo

Mario G. Del Pópolo

*Grupo de Biofísica y Materia Condensada Blanda
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UNCUYO*



Mario Del Pópolo



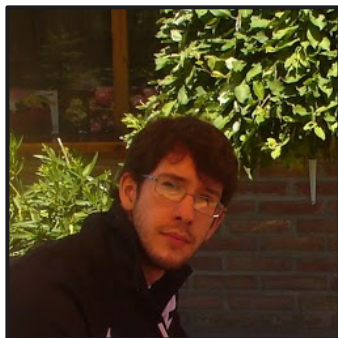
Diego Masone



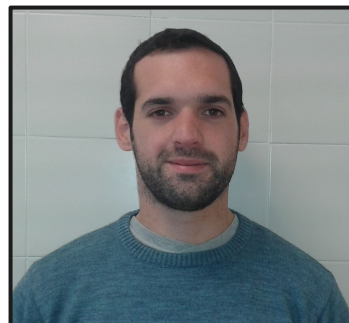
Jesús López Martí



Joaquín Klug



Facundo Ciocco Aloia



Matías Via



Silvina Moyano

Motivación

“Estudio de líquidos complejos (materia blanda) combinando simulaciones computacionales a gran escala y mecánica estadística”



The Nobel Prize in Chemistry 2013
Martin Karplus, Michael Levitt, Arieh Warshel

The Nobel Prize in Chemistry 2013



© Harvard University
Martin Karplus



Photo: © S. Fisch
Michael Levitt



Photo: Wikimedia Commons
Arieh Warshel

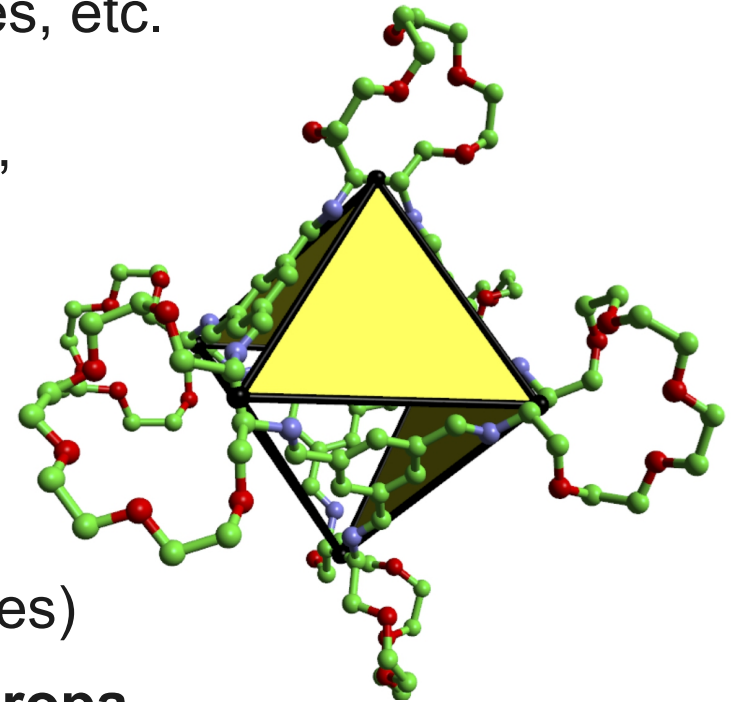
The Nobel Prize in Chemistry 2013 was awarded jointly to Martin Karplus, Michael Levitt and Arieh Warshel *“for the development of multiscale models for complex chemical systems”*.

MODELADO MULTIESCALA

Proyectos en Curso

“Estudio de líquidos complejos (soft matter) combinando simulaciones computacionales a gran escala y mecánica estadística”

- **Líquidos Complejos:** moléculas grandes, flexibles, interacciones intermoleculares, fluidez, mesofases, etc.
- **Proyectos:**
 - Dopantes en bio-membranas (nanopartículas, colorantes sensibles al voltaje)
 - Poración / electroporación de membranas
 - Péptidos de penetración celular
 - Líquidos con porosidad permanente
 - Tejidos biológicos blandos (esferoides celulares)
- **Colaboraciones:** UNC, UBA, UNSL, IHEM y Europa



Métodos, Herramientas y Recursos Disponibles

- **Métodos:**

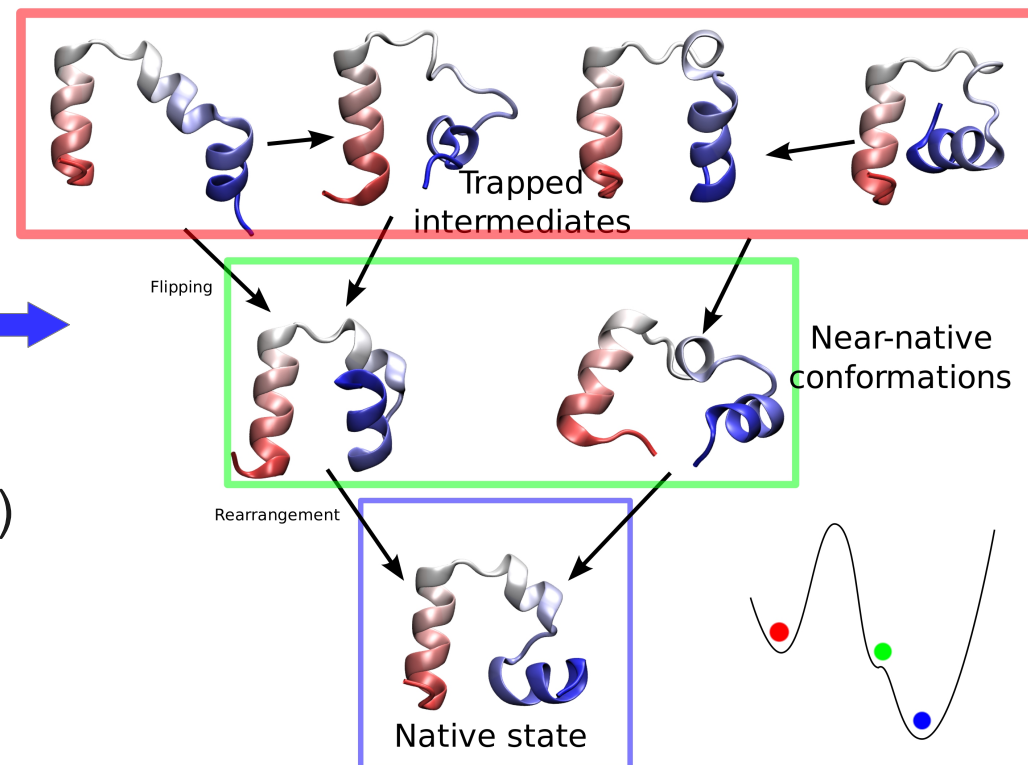
- Dinámica Molecular, Dinámica de Partículas Disipativas
- Métodos de Monte Carlo
- Cálculos de Energía Libre (muestreo estadístico muy costoso)
- Sistemas con miles de átomos, tiempos ~100 ns
- Interacciones de largo alcance (PME)

- **Códigos:**

- GROMACS, DLPOLY, LAMMPS, NAMD, PLUMED
- Códigos propios (MC)
- Paralelización MPI (CPU)

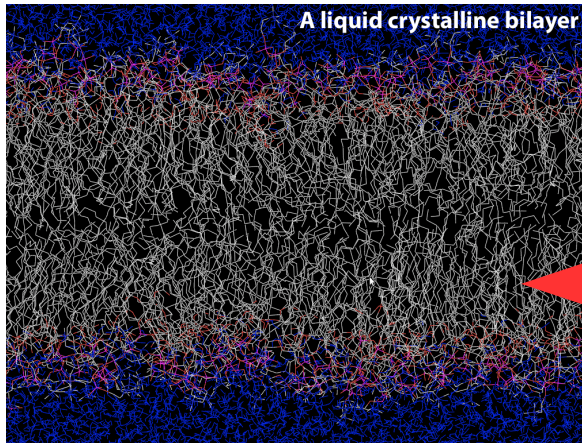
- **Recursos:**

- Cluster ICB-ITIC (UNCUYO)
- Cristina
- Centro de Cómputos de QUB

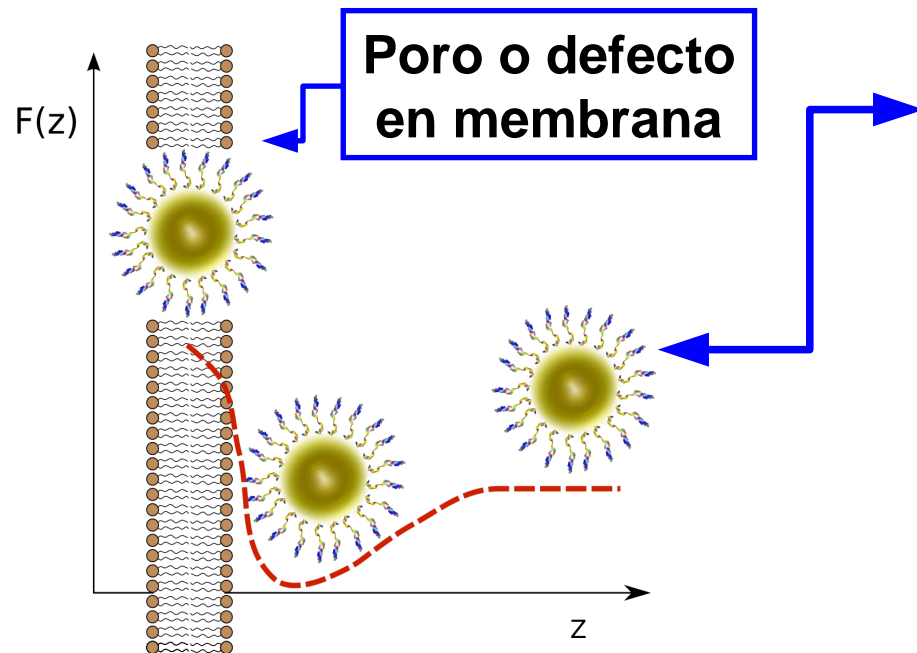
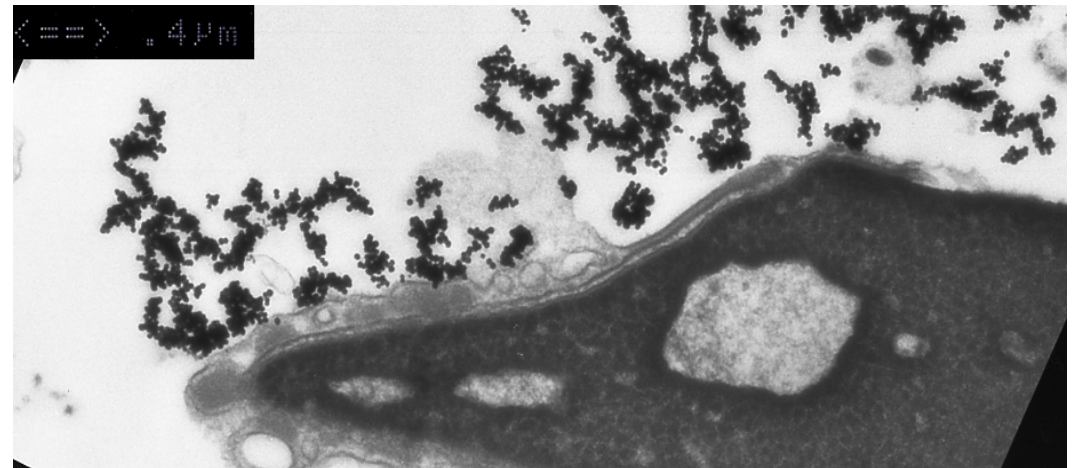
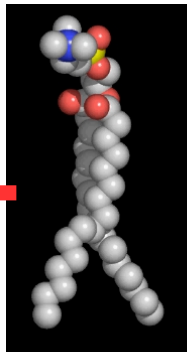


- Proyecto Folding@Home (computación distribuida) - GROMACS
- Corre en CPUs, GPUs, PS3
- 23 Septiembre 2013: ~473000 CPU cores y 29700 GPUs

Nanopartículas y Biomembranas



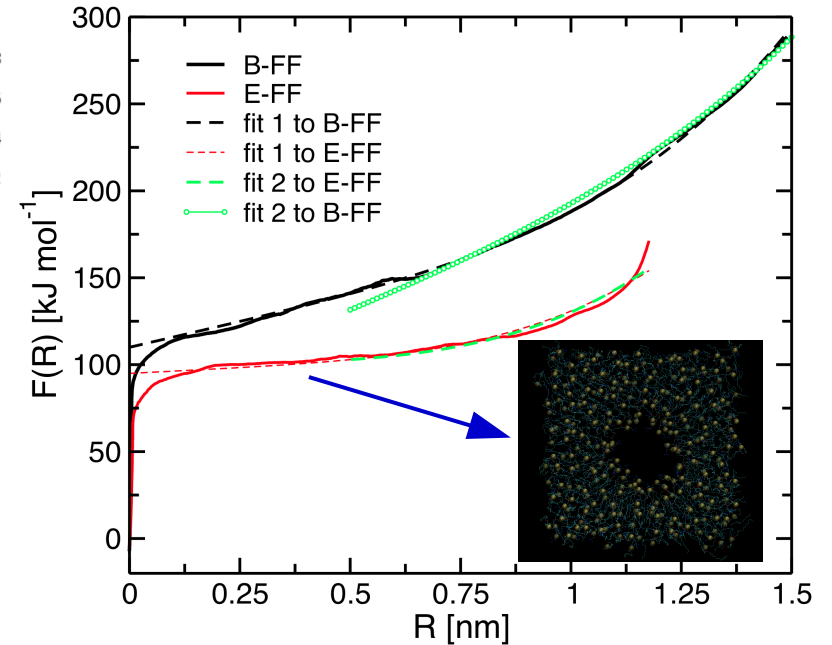
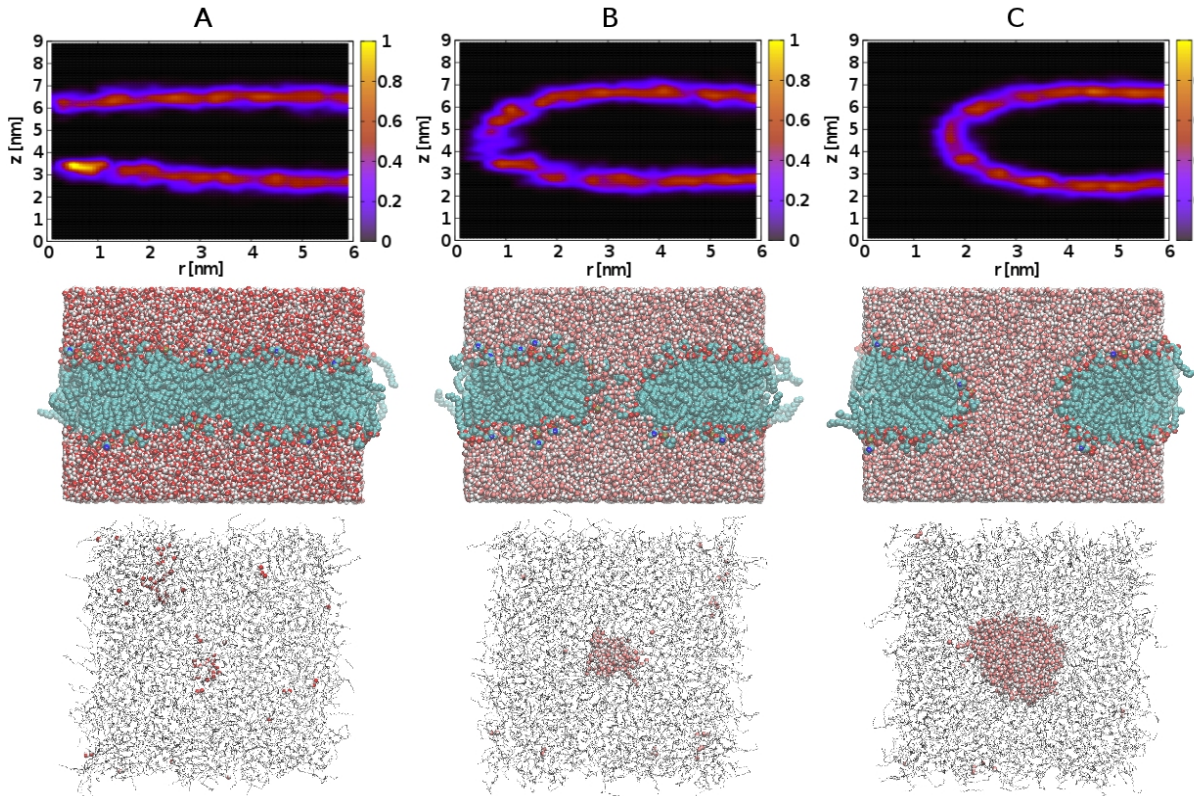
Lípido



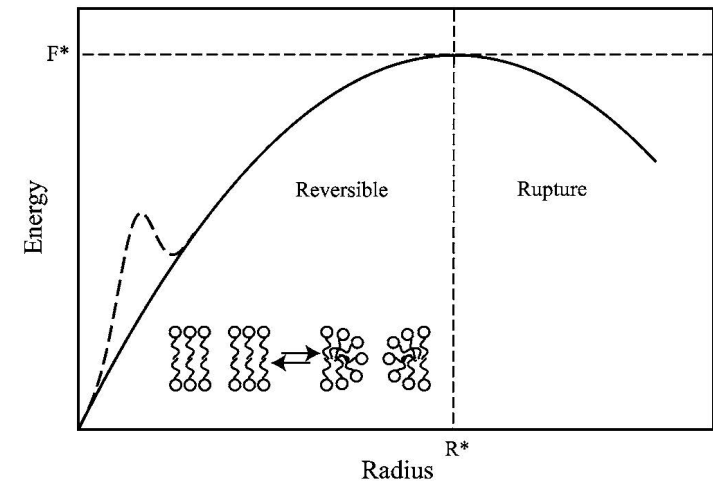
Nanopartículas de oro recubiertas con péptido de penetración celular (CPP), en contacto con un espermatozoide humano. Notar como las NP se pegan y penetran la membrana celular.

Foto. Cortesía de Victoria Berberían y Luis Mayorga (IHEM, Mendoza)

Nucleación de Poros en Biomembranas

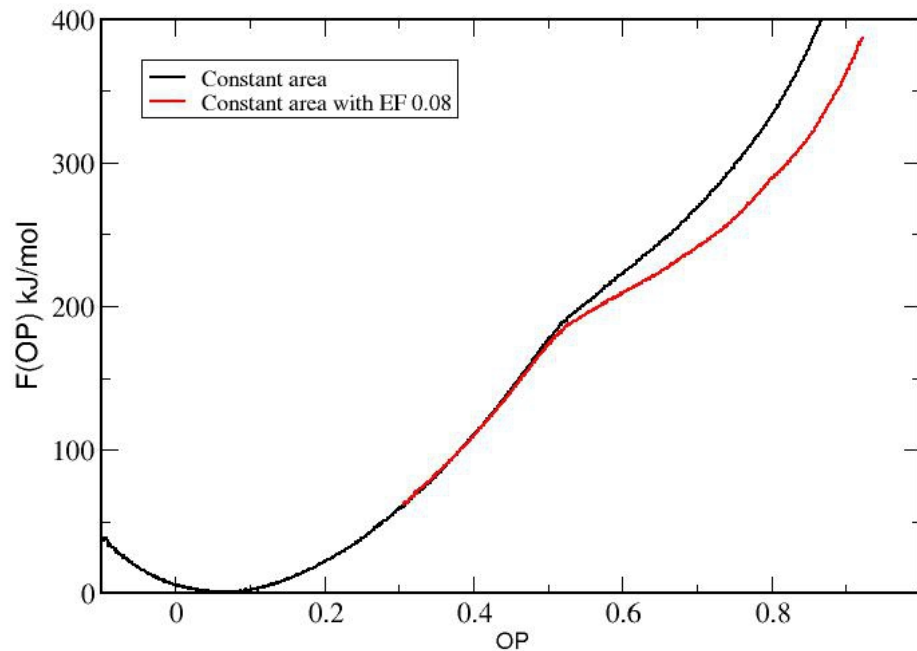


- Implementación en GROMACS-PLUMED
- Simulaciones con resolución atómicas
- Obtención de tensión lineal y parámetros mecánicos de membrana



Qué Ocorre al Aplicar un Campo Eléctrico ?

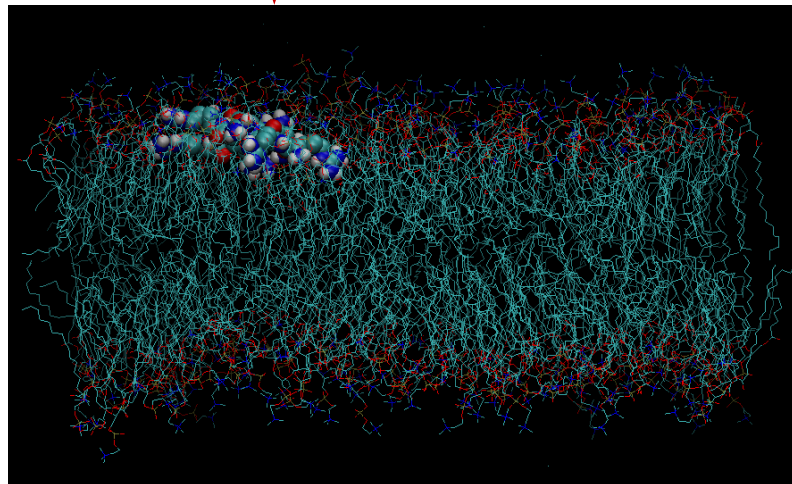
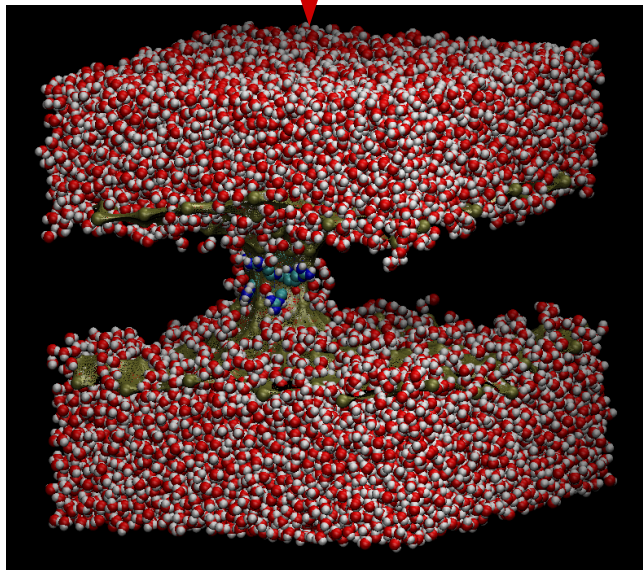
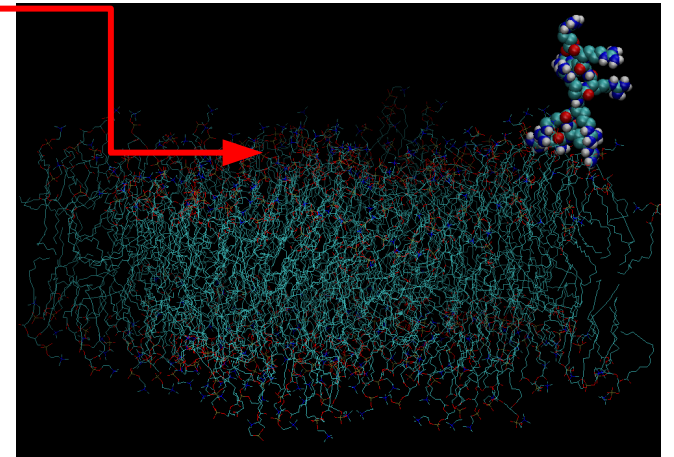
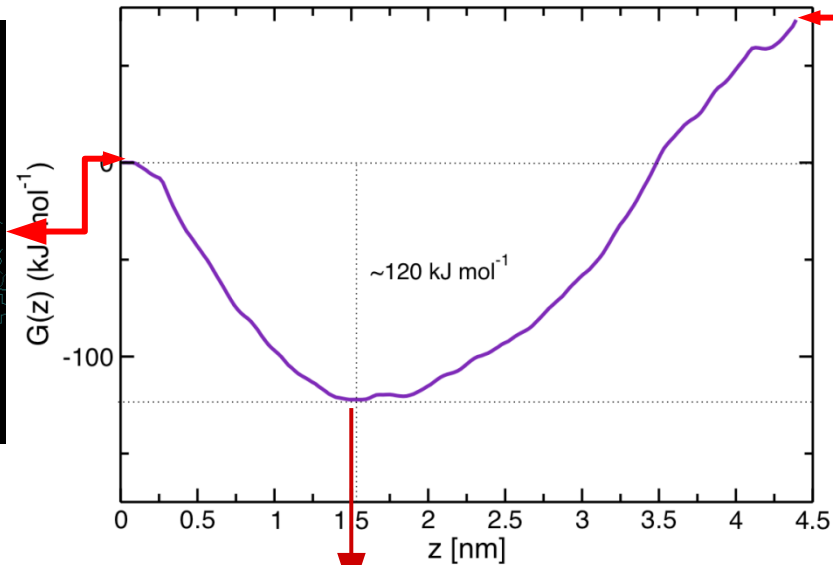
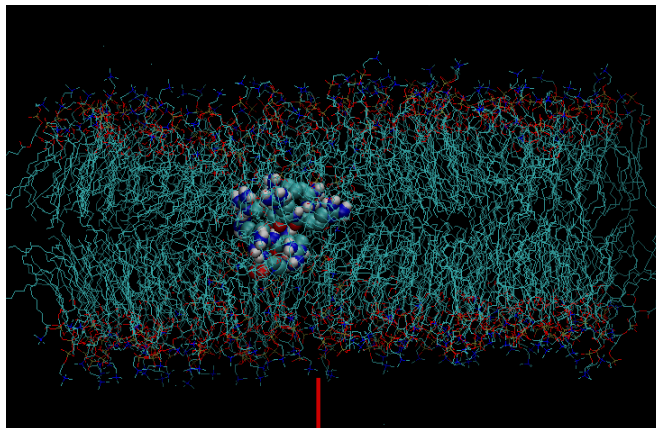
- Electroporación -



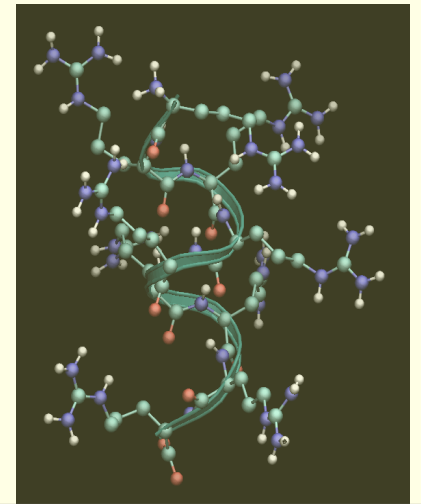
- Implementación en GROMACS-PLUMED
- Modelo CG (MARTINI) – 100 ns/ventana
- Campo perpendicular a la bicapa disminuye costo de crear un poro
- Correlación entre posición de poro y radio de curvatura de la bicapa



Interacción de CPP con Bicapa Lipídica



Arginina-9
Homo-oligómero de 9 arg
carga +9 a pH 7

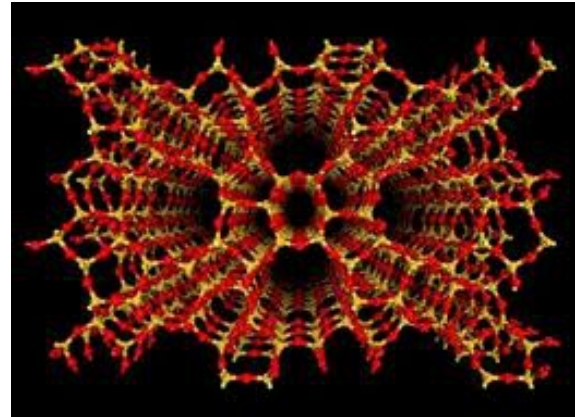


Umbrella Sampling con resolución atómica – cientos de ns !!

Diseño y Caracterización Computacional de Líquidos con Microporosidad Intrínseca

Materials Porosos Tradicionales

- Sólidos (Zeolitas, etc)
- Arreglo ordenado de cavidades intersticiales
- Múltiples usos en industria y laboratorio

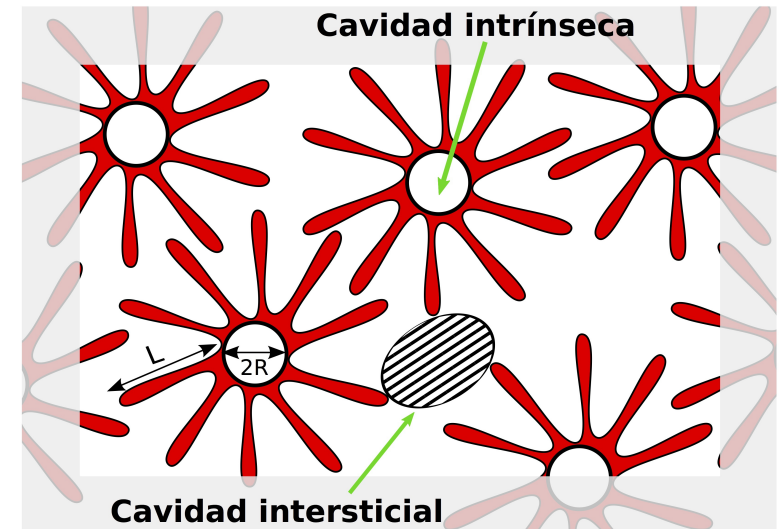


Líquidos

- Exhiben *cavidades (poros) dinámicas* según densidad y temperatura



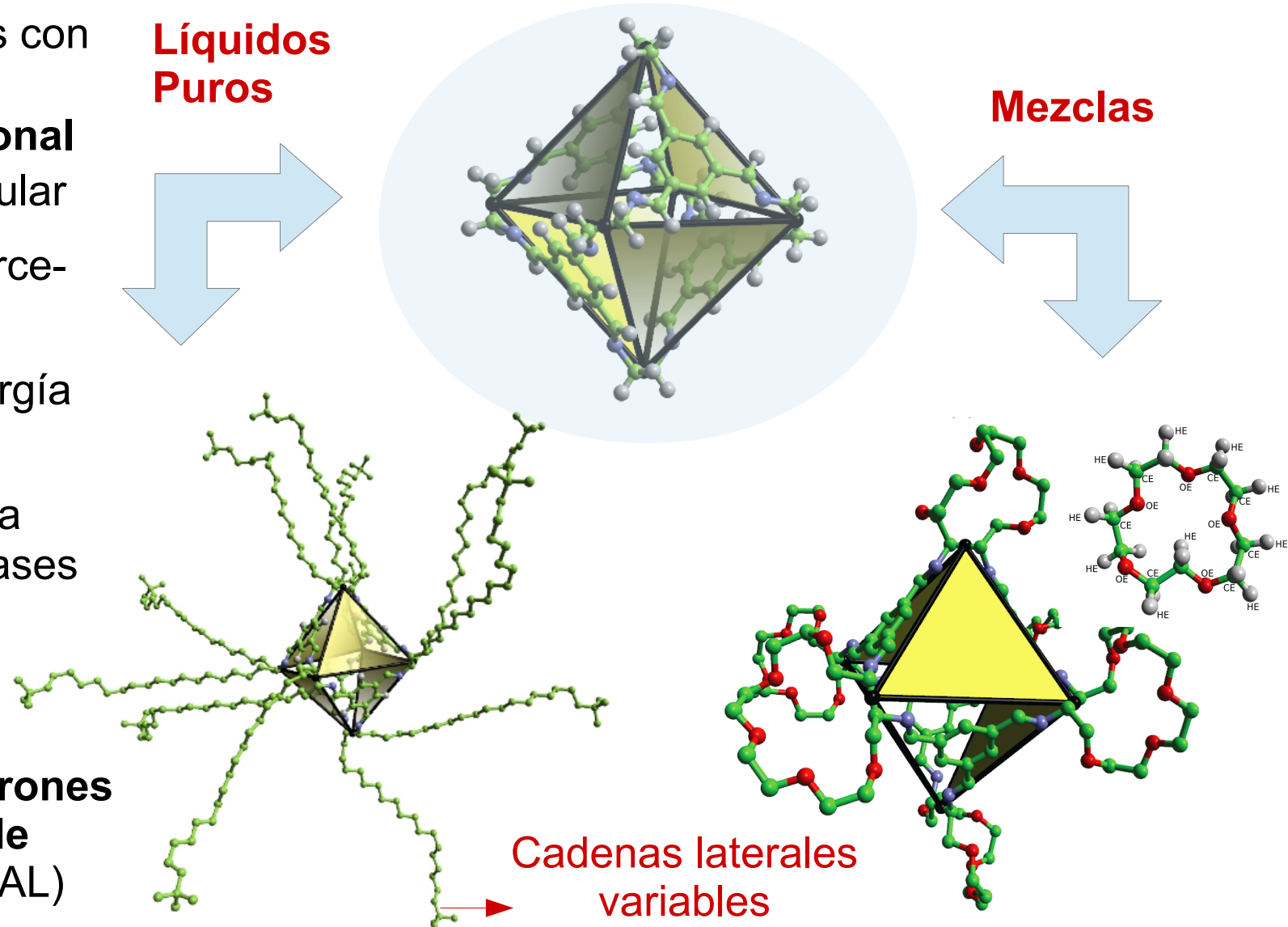
Objetivo: diseñar, sintetizar y caracterizar líquidos con porosidad permanente



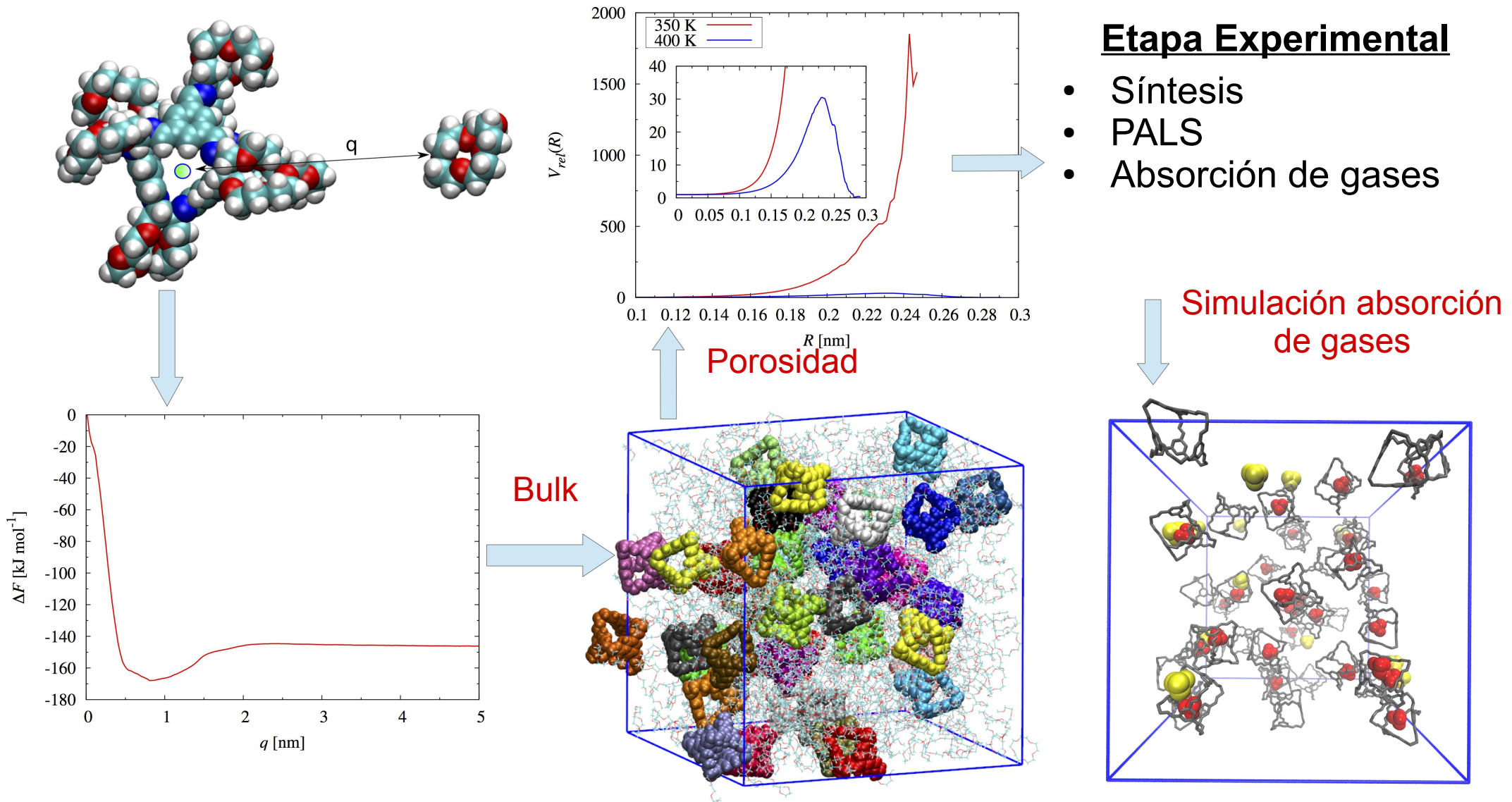
- Incorporar cavidades en estructura molecular
- Tamaño, forma y fluidez controlables

Diseño y Caracterización Computacional de Líquidos con Microporosidad Intrínseca

- Moléculas orgánicas con cavidad intrínseca
- **Diseño computacional**
 - Dinámica Molecular
 - Desarrollo de force-fields
 - Cálculos de energía libre
 - Monte Carlo para solubilidad de gases
 -
- **Síntesis (UK), neutrones (UK), solubilidad de gases (FR), PALS (AL)**



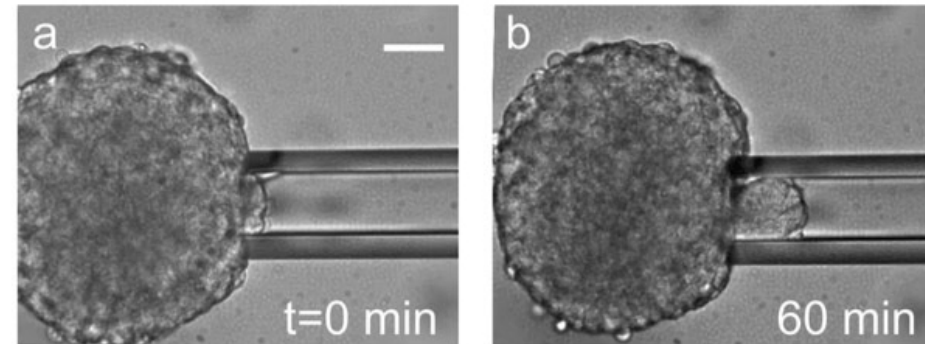
Mezclas Líquidas con Porosidad Intrínseca



Conclusiones y Agradecimientos

Hacia donde vamos ?

- Simulación de estructuras cada vez más complejas
 - **Organelas, células, agregados celulares o tejidos**
- Mayores escalas temporales y espaciales
- Modelos físicos más realistas ... y más costosos en tiempo de cálculo



Recursos a futuro ..., necesidad actual

- Mayor acceso a tiempo de cómputo en Argentina

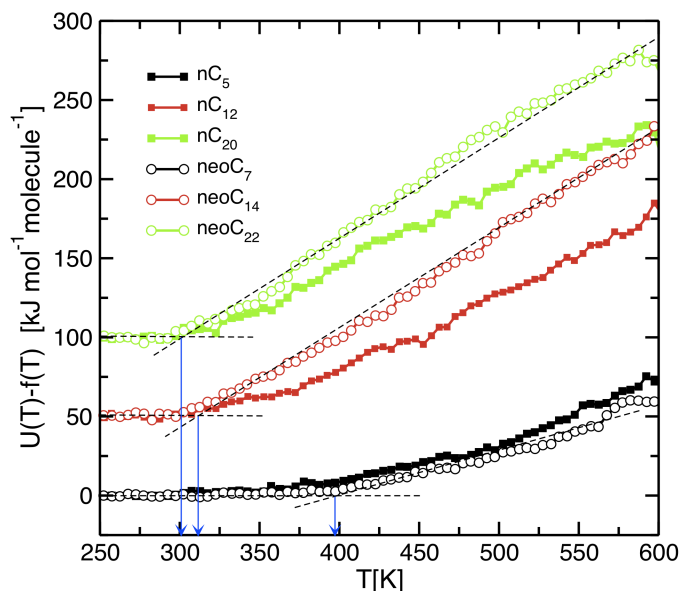


Silvina Moyano

Gracias !!

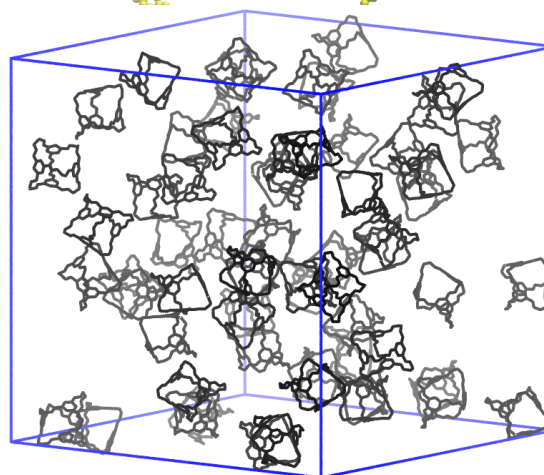
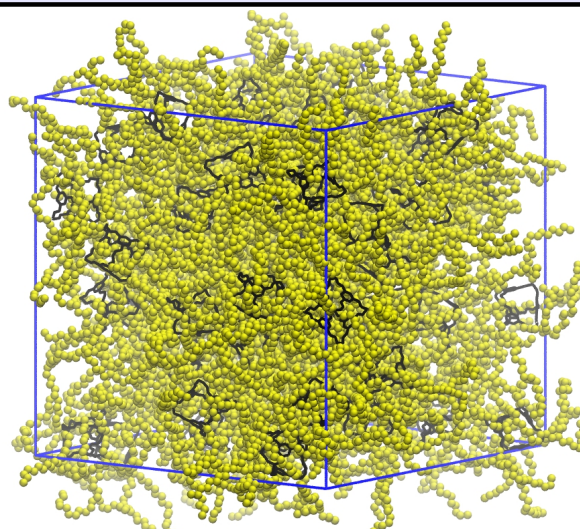


Líquidos Puros con Porosidad Intrínseca

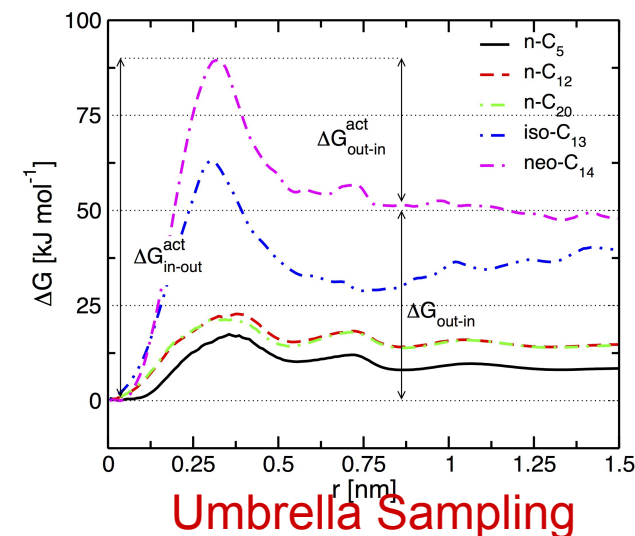


Templado simulado – 10 sistemas diferentes – GROMACS (MPI)

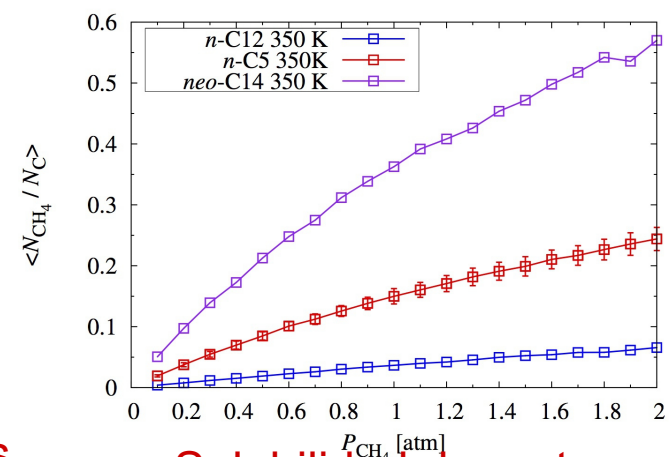
	Sim (K)	Exp (K)
Short	~400	~420
Medium	310-320	313-320
Long	300-310	?



MD - 100ns – 70000 átomos (decenas de trayectorias)



Umbrella Sampling



Solubilidad de metano (GCMC – código propio)