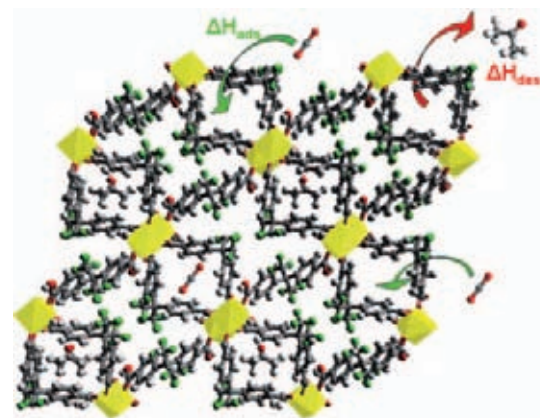


# 14 grups de recerca posen a prova el nou Bull

Un cop instal·lat el Bull NovaScale, els usuaris que van sol·licitar-hi hores per a proves han pogut comprovar el rendiment que aquest nou sistema proporciona a aplicacions com ara Gaussian03, VASP, NWChem, CHARMM i ADF amb treballs de fins a 64 processadors. En total, han estat més de 130.000 hores computacionals entre 14 grups de recerca que treballen en àrees com ara l'enginyeria química, la ciència de materials, l'astrofísica i la farmacologia.



Alguns exemples de la recerca feta durant aquest període de proves són els treballs dels grups encapçalats per M. Ángeles Monge, de l'Institut de Ciència de Materials de Madrid del CSIC en col·laboració amb Víctor A. de la Peña, de l'IMDEA Energia, amb aplicacions en catalitzadors, tamisos moleculars, emmagatzematge de gasos i alliberació controlada de fàrmacs, i per Josep M. Lluch, del grup de Dinàmica i Meca-

nismes de les Reaccions Químiques i Bioquímiques de la UAB, relacionat amb l'estudi de la gènesi de l'aterosclerosi, un procés d'envelliment, enduriment i degeneració de la paret de les artèries que sobrevé amb els anys, tot i que també pot afectar persones relativament joves, a causa d'algunes malalties i a alteracions que afecten els teixits de la part interna de la paret de l'artèria.

Durant les últimes dècades, el disseny de nous materials híbrids organo-inorgànics nanoestructurats ha estat a bastament estudiat a causa, sobretot, de les interessants propietats que presenta aquest tipus de materials (magnètiques, luminescents, catalítiques i de sorció, entre d'altres). El grup del CSIC ha realitzat una sèrie d'estudis teòrics basats en mètodes DFT utilitzant VASP, que suposen un major enteniment del comportament del metall com a centre actiu i permeten contribuir al disseny de noves estructures amb propietats catalítiques controlades, així com materials selectius en l'adsorció tant de gasos com de vapors.

Com explica Víctor A. de la Peña, de l'IMDEA, "els càlculs, realitzats amb 32 i 64 processadors en sistemes metal·orgànics d'entre 250 i 400 àtoms, s'han centrat en la determinació de l'estabilitat estructural de diferents polímers de coordinació organo-inorgànics. Gràcies a aquests estudis, s'ha determinat la relació estructura-energia de diferents estructures, estudis que són de gran utilitat a l'hora de predir l'estabilitat d'una fase cristal·lina i l'efecte de les condicions de síntesi. També s'han determinat les energies requerides en processos d'adsorció-desorció de diferents gasos i solvents, així com s'ha determinat l'energia d'activació dels canvis de fase associats a aquests processos".

Per la seva part, el grup de Josep M. Lluch està realitzant simulacions computacionals de l'enzim lipoxigenasa-15 de mamífers, que pertany a una família d'enzims encarregats de catalitzar la reacció d'oxidació de compostos lipídics, perquè a llarg termini s'obtingui un complex enzim-substrat vàlid que permeti l'estudi del mecanisme del primer pas de la reacció d'oxidació. Per a això, s'han pres conformacions del substrat obtingudes d'una sèrie de càlculs d'acoblament (*docking*), analitzats sota criteris estructurals (dades experimentals) i, posteriorment, s'han realitzat simulacions del complex Michaelis-Menten.

Com explica Lea Toledo, de la UAB, "aquest grup ha considerat sis models a les simulacions, que corresponien a conformacions del substrat que, tot i diferents, estan en concordança a les dades experimentals. Les simulacions sobre el complex enzim-substrat consisteixen en portar l'estructura cristal·logràfica a condicions experimentals, usant eines computacionals de simulació. S'ha usat el programa CHARMM, que permet preparar el sistema, solvatar-lo, equilibrar-lo, i generar dades de la dinàmica molecular que simula el comportament enzim-substrat".

En la segona etapa, cada sistema és solvatarat amb una caixa d'aigües pre-equilibrades usant condicions periòdiques de contorn i que, en aquest cas, implica treballar amb un sistema de 72.057 àtoms, 10.583 dels quals corresponen a àtoms de la proteïna, 53 al substrat, 3 als cofactors i 61.418 a les aigües (cristal·logràfiques i de solvatació). Fins ara, la simulació tracta tots els àtoms del sistema amb mecànica molecular, però per a l'estudi de la reactivitat, el següent pas seran dinàmiques que combinen mecànica quàntica amb mecànica molecular, anomenats mètodes QM/MM.

## Grups participants en el període de prova

**Carlos Alemán**, Enginyeria Química (UPC)

**José G. de la Campa**, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC)

**Enrique García**, Fundació Observatori Esteve Duran

**Jesús Giraldo**, Medicina Preventiva i de Salut Pública (UAB)

**Francesc Illas**, Institut de Recerca de Química Teòrica i Computacional (UB)

**Jordi Isern**, Institut d'Estudis Espacials de Catalunya (IEEC-CSIC)

**F. J. Luque / M. Orozco**, Fisicoquímica, Bioquímica i Biologia Molecular (UB)

**Josep M. Lluch**, Química Física (UAB)

**M. Ángeles Monge**, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC)

**Eliseo Ruiz**, Química Inorgànica (UB)

**Eduard Salvador**, Astronomia i Meteorologia (UB)

**Blai Sanahuja**, Astronomia i Meteorologia (UB)

**Mariona Sodupe**, Química Física (UAB)

**Miquel Solà / M. Duran**, Institut de Química Computacional (UdG)