

ATENCIÓN
M. En C. José Luis Gordillo Ruiz
Coordinación de Supercómputo
DGTIC - UNAM



Comité Académico de Supercómputo de la UNAM

En atención a su amable solicitud, presentamos a ustedes el siguiente reporte de las actividades realizadas en nuestro proyecto de investigación y en las que contamos con el apoyo de los recursos del Centro de Supercómputo Miztli de DGTIC durante el periodo anterior de febrero de 2016 a enero de 2017.

Es importante mencionar que en el mes de septiembre de 2016 la responsable del proyecto, Dra. Vivianne Marquina, ingresó al hospital por complicaciones respiratorias donde falleció de manera triste y repentina. De modo que nuestra actividad disminuyó de manera considerable en el último tramo del año.

REPORTE

1. Título:

“Nanocápsulas de Carbono
para dirigir medicamentos a zonas específicas del cuerpo”.

2. Resumen (1 o 2 párrafos):

Nuestro proyecto consiste, principalmente, en la realización de simulaciones de sistemas moleculares conformados con nanocápsulas basadas en fullerenos de carbono en diferentes modalidades y otros compuestos con la finalidad de estudiar su viabilidad para el combate de tumores mediante el suministro de radiodosis localizadas en diferentes partes del cuerpo humano. Los métodos de investigación empleados requieren de una buena cantidad de cálculos computacionales muchos de los cuales se realizan en supercómputo y se complementan con otros realizados con procesamiento simple. Adicionalmente se utilizan otras herramientas computacionales para realizar todos los post procesos y hacer los análisis de la información.

Una parte importante de nuestro trabajo está comprometida con la docencia, de manera que tenemos el cometido de tratar de enseñar nuestra metodología tanto a alumnos como a profesores interesados en la realización de cálculos y simulaciones basadas en la aplicación de la Teoría de la Funcional de la Densidad electrónica y el análisis de orbitales para el mejor estudio de sistemas moleculares.

3. Breve descripción de avances (1 cuartilla):

Con la ayuda de los recursos de supercómputo ha sido posible tan solo en el último año:

- Publicar 2 artículos en revistas arbitradas de prestigio.
- Dejar en revisión un tercer artículo.
- Se realizó el diseño e impartición del Taller de Química Computacional con título:

“Taller de Uso de Software para Realizar Cálculos de Estructura Electrónica”.

y se creó la infraestructura correspondiente: material didáctico, página web, base de datos, repositorio de software y documentación, etc.

El taller se impartido en la Sala de Conferencias del Instituto de Investigación en Materiales de la UNAM a miembros del posgrado de Ciencia e Ingeniería de Materiales e invitados del 16 de febrero al 12 de abril con una duración aproximada de 20 hrs. En el Taller se facilitó el uso de recursos de supercómputo a los participantes y se revisaron la instalación y aplicación de variados softwares para la realización de simulaciones moleculares tanto para procesamiento simple como en paralelo. Adicionalmente se les dio acceso a software libre, documentación y métodos generales para la realización de simulaciones moleculares.

Cabe mencionar que convendría repetir el taller pues pone al alcance de los participantes herramientas poderosas para complementar los sus trabajos de investigación y no bastan unas pocas horas para dominarlas.

- Llevamos resultados de frontera al XXV Congreso Internacionales de Investigación en Materiales, IMRC – 2016, a nombre del Posgrado de Ciencia e Ingeniería de Materiales en la Facultad de Ciencias con el auspicio de Conacyt y el apoyo del Centro de Supercómputo Miztli de DGTIC.
- Se inició el desarrollo de una nueva metodología para realizar cálculos de parámetros Mössbauer para el Laboratorio de Física Atómica Molecular de la Facultad de Ciencias, con la metodología propuesta por el Instituto Max Planck a través de su software de procesamiento en paralelo ORCA.

Se ha podido realizar la caracterización de algunos compuestos, como el FeCl_3 para comparar la metodología de cálculo numérico con los resultados experimentales que ya se tienen, pero aun continuamos en la fase inicial y falta realizar más cálculos y producir los artículos correspondientes.

- También nos hace falta hacer las simulaciones del acoplamiento de las nanocápsulas multicapa con los minerales de hueso, hidroxapatita; y terminar de explorar el posible arrastre de las nanocápsulas mediante la inclusión de sistemas magnéticos.

4. Cálculos realizados (1 cuartilla):

Los cálculos realizados para llevar a cabo el estudio de los sistemas moleculares incluyen la realización y análisis de simulaciones estándar basadas en optimizaciones geométricas (GO) y dinámicas moleculares (MD) obtenidas principalmente con códigos para procesamiento en paralelo y complementados con códigos estándar de procesamiento simple:

- En nuestro caso, dado que los sistemas moleculares que estudiamos son finitos, para la integración de los cálculos de estructura electrónica en la zona de Brillouin implementamos súper celdas con la aproximación a la función de la ocupación usando el método de Methfessel y Paxton entre otros.
- Adicionalmente, para muchos de los sistemas estudiados realizamos cálculos del tipo escalar relativista de espín polarizado y no-espín polarizado.
- Los datos obtenidos son procesados para obtener parámetros de caracterización como pueden ser espectros infrarrojos, Raman, etc.
- Los análisis de espectros y orbitales los realizamos con ayuda del software Gaussian corriendo tanto en paralelo como de forma simple.
- Muchos de los cálculos están enfocados a la prueba de nuevos sistemas moleculares y al estudio de su comportamiento con la temperatura.
- Para muchos de los sistemas moleculares cubiertos en nuestra investigación se realizan análisis de la distribución de carga Mulliken, para lo que también usamos el software de procesamiento simple Amsterdam Density Functional (ADF) versión 2009.01 de Scientific Computing & Modelling.

Incluimos dentro de nuestras investigaciones algunos sistemas interesantes que han quedado al alcance de nuestra metodología, como son:

1. Diseño de redes cristalinas y cálculos para la determinación de los parámetros Mössbauer de diferentes sistemas moleculares.
2. Sistemas basados en grafeno con características magnéticas,
3. Membranas activas a base de nanoconos para filtrar agua y,
4. El desarrollo de metodología para el estudio de materiales fotovoltaicos basada en el análisis de orbitales moleculares.

5. Software utilizado:

En la supercomputadora Miztli básicamente utilizamos los siguientes softwares:

- **Quantum Espresso en su versión 5.0.2:** corriendo PWscf (pw.x) en el modo auto consistente la aplicación de la Teoría de la Funcional de la Densidad (DFT) con la aproximación Born-Oppenheimer y pseudo potenciales (PP's) de conservación de norma eficientes para cálculos de conjuntos de ondas planas (PW's) con el método de Martins-Troullier básicamente, para representar las interacciones electrón-ión; y funcionales de intercambio y correlación del tipo Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) entre otros.
- **ORCA 3.0.2:** Programa para el cálculo de estructura electrónica.
- **Gaussian 09:** Para el modelado electrónico de la estructura.

6. Recursos utilizados. (NO ES NECESARIO).

7. Lista de colaboradores:

RESPONSABLE DEL PROYECTO

Dra. Vivianne Marquina

Prof. Tit. C de T.C.

A CARGO DE LOS RECURSOS MIZTLI:

Dr. Alejandro Valderrama

Inv. Estancia Posdoc.

COLABORADORES

M. en C. Raúl Gómez

Prof. Tit. C de T.C.

Fís. Ma. Luisa Marquina

Prof. Tit. B de T.C.

M. en C. José Luis Pérez-Mazariego

T.A. Tit B de T.C.

Dr. Martín Romero

Prof. Asociado de Carrera

8. Lista de artículos publicados:

1. A. Valderrama, R. Reynoso, Raúl W. Gómez, Vivianne Marquina (2016). *Self-stability of C₆₀ nanocapsules with radio-iodide content and its interaction with calcium atoms*. Journal of Molecular Modeling, Springer Berlin Heidelberg. DOI: 10.1007/s00894-015-2898-4.
<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00894-015-2898-4>
2. Valderrama, A., Reynoso, R., Gómez, R.W. et al. *Interactions of calcium with the external surfaces of fullerenes and endofullerenes doped with radioactive sodium iodide*. J Mol Model (2017) 23: 15. DOI:10.1007/s00894-016-3187-6. First Online: 29 December 2016.
<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00894-016-3187-6>

9. Lista de alumnos graduados:

10. Lista de congresos nacionales e internacionales y participantes:

Participación en el XXV Congreso Internacional de Investigación en Materiales, IMRC – 2016, con el poster titulado:

SELF-STABILITY OF C₆₀@C₁₈₀ DOUBLE LAYER NANOCAPSULES

Con la participación de:

Dr. Alejandro Valderrama, M. en C. Raúl Gómez, Dra. Vivianne Marquina.

En representación del Posgrado de Ciencia e Ingeniería de Materiales en la Facultad de Ciencias con el auspicio de Conacyt y soporte del Centro de Supercómputo Miztli de DEGTC.

Y con agradecimientos explícitos:

“Acknowledgements: Special thanks to Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología for the financial support given to this work in the National Postdoctoral Program and to NES-Miztli Supercomputer Center of the Dirección General de Tecnologías de la Información y Comunicación, Universidad Nacional Autónoma de México for their technical support on many of the computations performed.”

Agradeciendo su atención a esta líneas,



Dr. Alejandro Valderrama
C. SNI