

Escuela de Simulación Computacional Avanzada en Química

Convocatoria para participar y solicitar becas de traslado

El Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva (MINCYT), a través del Centro Latinoamericano de Formación Interdisciplinaria (CELFI), convoca a jóvenes investigadores especialistas en el campo de la Química, Bioquímica, Biología, Física, Computación, Ingeniería, Materiales y afines para participar en la “Escuela de simulación avanzada en química” que se llevará a cabo en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires, Ciudad de Buenos Aires, del 4 al 16 de julio de 2016.

Esta iniciativa se financiará conjuntamente por el Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva y el Banco de Desarrollo de América Latina (CAF).

Convocatoria calendario:

Apertura de postulación a becas: 06/05/2016

Cierre de postulación a becas: 22/05/2016

Fecha de publicación de los seleccionados: entre el 13 y el 17/06/2016.

Fecha de la actividad: 4 al 16 de julio de 2016

Resumen de la Actividad

Fechas: 4 al 16 de julio de 2016.

Sede: Ciudad Autónoma de Buenos Aires

Responsables: Darío Estrin, Damián Scherlis, Luciana Capece, Marcelo Martí y Adrián Turjanski (Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires)

Regreso a lugar de origen: posterior al 16 de julio de 2016.

Detalle de la actividad

La “Escuela de Simulación Avanzada en Química” tiene como objetivos dotar a estudiantes de posgrado y jóvenes investigadores latinoamericanos en las áreas de Bioquímica, Química Biología, Física, Computación, Ingeniería, Materiales, Biotecnología y afines de los conceptos teóricos y herramientas necesarias para utilizar los métodos de Simulación Computacional en el desarrollo de sus temas de investigación. El curso está orientado tanto a personas que trabajen en las áreas de simulación computacional, como a aquellas que emplean herramientas experimentales, pero que deben familiarizarse con la simulación computacional como herramienta accesoria.

El curso a desarrollarse en el CELFI-DATOS está organizado en dos semanas, con una primera semana con los fundamentos de las técnicas de simulación computacional en química, seguida de una segunda semana en la cual se proponen dos alternativas, una centrada en el estudio de materiales, y la otra centrada en aplicaciones en biomoléculas. Los participantes de la Escuela deberán elegir una de las dos alternativas para la segunda semana. En cuanto a infraestructura, se empleará un laboratorio de 30 estaciones de trabajo, disponible en el Departamento de Computación de la FCEN y recursos de cómputo del CECAR (Centro de Computación de Alto Rendimiento) de la FCEN.

En forma complementaria los dos últimos días de la escuela consistirán en un workshop que reunirá a expertos de nivel en el área de la simulación computacional en química en Latinoamérica, para poder mejorar los vínculos y establecer posibles colaboraciones. El mismo constará de conferencias plenarias, simposios y presentaciones de pósters. Los simposios estarán agrupados temáticamente y contarán con invitados internacionales. Los simposios culminarán en una mesa redonda donde se rediscutirán las presentaciones previas destacando tanto los distintos tipos de herramientas empleadas, como las peculiaridades de los sistemas estudiados, estableciendo puentes conceptuales entre las ponencias y explorando potenciales estrategias de colaboración a futuro.

Se destinará un extenso período de tiempo para la discusión en las sesiones de pósters, de manera que la actividad resulte rica para los estudiantes y los investigadores jóvenes que presenten su trabajo de investigación en esta modalidad.

PROGRAMA DE LA ESCUELA:

FUNDAMENTOS

- 1) Concepto de simulación computacional en Ciencia: relación entre experimento, teoría y simulación. Simulación computacional en Química y Bioquímica. Modelos existentes para la determinación de la superficie de energía potencial. Planteo de estrategias de simulación para responder interrogantes de interés químico y bioquímico.
- 2) Métodos ab-initio. Ecuaciones de Hartree-Fock. Funciones de base. Determinación de propiedades moleculares. Métodos semiempíricos. Idea general e implementaciones CNDO, MNDO, INDO. Modelos semiempíricos basados en parametrización: Métodos AM1 y PM3. Teoría del funcional de la densidad. Teoremas fundamentales. Implementación de Kohn y Sham. Rango de aplicabilidad, ventajas y desventajas de las distintas técnicas de estructura electrónica.
- 3) Métodos de campos de fuerzas parametrizados. Campos de fuerzas para agua. Modelos de campo medio. Modelos de solvente, explícitos, implícitos, modelos de agua (TIP3P, TIP4P, SPC, modelos de carga fluctuante). Campos de fuerzas para biomoléculas. Potenciales AMBER y CHARMM. Construcción de un Campo de Fuerzas y Derivación de parámetros (Parámetros de unión y no-unión y determinación de cargas parciales mediante ajuste a potencial electrostático).
- 4) Termodinámica estadística. Conceptos básicos. Aplicación a técnicas de simulación. Ensamblés. Función de partición y propiedades termodinámicas. Hipótesis ergódica. Esquema de simulación de Monte Carlo. Esquema de

Dinámica Molecular. Detalles técnicos. Métodos de integración de las ecuaciones de Newton para la dinámica molecular. Condiciones periódicas de contorno (PBC) y sumas de Ewald. Ejemplos de simulaciones de Monte Carlo y Dinámica Molecular. Determinación de propiedades estructurales y dinámicas. Termostatos (Berendsen, Nose). Dinámica de Langevin.

- 5) Cálculos de energía libre: Funciones termodinámicas Energía y Entropía. Métodos de muestreo sesgado (Umbrella Sampling). Métodos basados en transformaciones termodinámicas (integración termodinámica, teoría de perturbaciones FEP). Dinámica Molecular Guiada y aproximaciones de no equilibrio, relación entre trabajo y reversibilidad: ecuación (igualdad) de Jarzynski. Violaciones a la segunda ley. Muestreo de ligando implícito (ILS). Metadinámica.
- 6) Métodos de multi-escala: Métodos Híbridos Cuántico-Clásicos. Modelado de fenómenos reactivos. Efectos del entorno. Modelos del continuo. Esquemas de Onsager y esquema PCM. Métodos híbridos cuántico-clásico (QM-MM). Esquemas aditivos. Acoplamiento entre subsistemas. Esquemas sustractivos (Oniom).

OPCIÓN BIOMOLECULAS:

- 7) Dinámica de Proteínas. Estabilidad de la Dinámica proteica y su caracterización. Cálculo de las desviaciones cuadráticas medias (RMSD). Cálculo de la Fluctuación media (RMSF). Clusterización, Modos normales y Modos Esenciales. Correlación de Movimientos. Coeficientes de involucramiento. Modelos de Alosterismo, cambio poblacional vs estereoquímico La hemoglobina como ejemplo de proteína alostérica.
- 8) Métodos de predicción de complejos Macromoleculares Interacción proteína ligando, métodos de predicción y cálculo de afinidades. Contribuciones a la energía libre de unión. Cálculo del término de energía, predicción del cambio en la entropía de unión, predicción del cambio en la energía libre de solvatación. Métodos de Poisson Boltzman y Generalizado de Born

(mmpb(gb)sa). Métodos de predicción del complejo basados en algoritmos genéticos (Autodock). Métodos basados en transformadas de Fourier (FFT). Uso de grillas (FT-Dock). Funciones de Scoring (Métodos de partición electrostática, de contacto-vdw y solvatación, uso de energías atómicas de contacto (ACE)). Interacción proteína-proteína. Métodos de predicción de complejos proteína-proteína, homo y heterodímeros, formación de multímeros. Métodos de clusterización (Clus-pro). Métodos de complementaridad de superficie (Patch-Dock). Caracterización de los complejos. Interacción proteína-proteína en complejos de transferencia electrónica.

- 9) Modelos de multiescala y de Grano-Grueso. Modelos de Grano-Grueso y multiescala. Introducción a las simulaciones de Grano-Grueso (GG). Derivación de modelos y parámetros siguiendo estrategias bottom-up y top-down. Modelos GG para membranas, proteínas, ADN, polisacáridos y solvente acuoso para dinámica molecular. Métodos Multiescala para solutos atómicos con solvente GG o soluto atómico/GG. Ejemplos de campos de fuerza GG. El campo de fuerza SIRAH y ejemplos de aplicación. Limitaciones de las aproximaciones GG.

- 10) Simulaciones de membrana: Bicapas lipídicas como modelo de membranas biológicas. Transiciones de fase de bicapas lipídicas. Estudio de propiedades físicas de bicapas mediante simulaciones de dinámica molecular clásica: correlación con experimentos. Bicapas asimétricas. Formación de poros. Aplicaciones bio-medicas: interacción de fármacos con membranas y sistemas de Drug delivery. Otros métodos para el estudio de membranas mediante simulaciones.

OPCION MATERIALES

- 7) Cálculo de Materiales. Estructura electrónica de sistemas extendidos: polímeros, sólidos y superficies. Funciones de Bloch. Diagramas de bandas y

nivel de Fermi. Densidad de estados. Implementación metodológica: funciones de base deslocalizadas y pseudopotenciales. Cálculo de la energía superficial, reconstrucciones, función trabajo, energía de adsorción. Dinámica Molecular de Car-Parrinello.

8) Dinámica cuántica y transporte electrónico en materiales y en nanoestructuras. Cálculo de la conductancia cuántica a través de funciones de Green de no equilibrio, y formalismo de Landauer-Buttiker. Evolución en tiempo real por medio de la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (RT-TDDFT).

9) Magnetismo dentro del formalismo DFT y herramientas de cálculo para el estudio de sistemas polarizados en spin. Mapeo de las interacciones magnéticas en modelos de Heisenberg. Materiales que requieren extensiones al intercambio y correlación: aproximación DFT+U. El caso de los óxidos simples y el rol de las vacancias de oxígeno en sus propiedades magnéticas. El ejemplo de los nitruros y el rol de las impurezas magnéticas.

MODALIDAD DE LOS TRABAJOS PRÁCTICOS:

Los trabajos prácticos consistirán en el 50% del tiempo del curso. En los mismos el alumno aprenderá en una primera etapa a utilizar las herramientas básicas genéricas para la realización de a) simulaciones cuánticas o ab-initio (utilizando los programas programa Gaussian, Quantum Espresso, SIESTA, y/o Lio) b) Simulaciones Clásicas (Biomoléculas y clusters) utilizando el programa Amber. c) Desarrollo y la obtención de parámetros específicos para un sistema de interés. d) la predicción de propiedades estructurales y reactividad mediante cálculos de energía libre utilizando diferentes esquemas de muestreo.

Primera semana

TP1 – Estructura electrónica de sistemas pequeños (4,5 horas).

TP2 – Bases de dinámica molecular clásica (4,5 horas).

TP3 – Dinámica molecular avanzada, métodos de análisis, modos normales.
(4,5 horas.)

TP4 – Simulaciones de Monte Carlo – Packmol (4,5 horas)

TP5 - Parametrización de potenciales atomísticos (4,5 horas).

Segunda semana

Opción Materiales

TP6 – Estructura electrónica de sistemas extendidos (4., horas).

TP7 – Método de Car-Parrinello (4,5 horas).

TP8 – Transporte cuántico (4,5 horas).

Opción Biomoléculas

TP6 – Dinámica molecular coarse grain – Aplicación a ácidos nucleicos (4,5 horas).

TP7– Métodos de determinación de energía libre (integración termodinámica, dinámicas guiadas, umbrella sampling) (4,5 horas).

TP8 – Métodos híbridos QM-MM. (4,5 horas).

Listado de docentes:

- Xavier Barril, Universidad de Barcelona, España.
- Leandro Martinez, UNICAMP, Brasil.
- Pablo Dans-Puigross, Institute for Research in Biomedicine, Barcelona, España.
- Valeria Ferrari, Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina.
- Cristian Sánchez, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.
- Mónica Pickholz, FFyB-UBA, Argentina.
- Darío Estrín, FCEN-UBA, Argentina.

- Damián Scherlis, FCEN-UBA, Argentina.
- Adrián Turjanski, FCEN-UBA, Argentina.
- Marcelo Martí, FCEN-UBA, Argentina.
- Luciana Capece, FCEN-UBA, Argentina.

[Beca para estudiantes latinoamericanos](#)

En el marco de la presente actividad el CELFI financiará hasta 30 becas para que profesionales egresados de las carreras elegibles, de América Latina (incluida Argentina si residen a más de 70 km de la sede del CELFI-DATOS) puedan participar de la actividad.

Aquellos interesados en la actividad que no cumplan con los requisitos para postularse a una beca, pero de todas formas estén interesados en participar de la misma, deben contactar directamente a los responsables de la actividad dado que esta convocatoria es exclusivamente para la asignación de becas. Ante dudas o consultas utilice el botón de “Contacto” de la página web del CELFI.

La beca se compondrá de:

- Pasaje ida y vuelta desde el lugar de residencia del postulante a Buenos Aires;
- Seguro de salud;
- Estipendio: PESOS ARGENTINOS SEIS MIL TREINTA Y SIETE CON VEINTIOCHO CENTAVOS (\$ 6037,28) (Monto de referencia: 50% de Beca Doctoral de CONICET para la Ciudad de Buenos Aires);
- Viáticos: PESOS ARGENTINOS SEICIENTOS NOVENTA Y OCHO X NOCHE (\$ 698 X NOCHE) (Decreto 969/2015 ANEXO II). Se contarán las noches de estadía en Buenos Aires.
- Matrícula: PESOS ARGENTINOS DOS MIL PESOS (\$2.000) que deberán posteriormente ser abonados por el becario a la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires en concepto de gastos asociados a las actividades.

Pasaje:

El Programa CELFI adquiere los pasajes aéreos electrónicos según lo establecido en el Decreto N° 1191/2012 en función de la disponibilidad de vuelos y las posibilidades de los asistentes. El Programa remite los pasajes electrónicos y los asistentes presentan como rendición de gastos los boletos de embarque.

En caso de ser necesario el uso de otro tipo de transporte (no aéreo) los gastos son reembolsados durante la estadía en Buenos Aires, previa presentación de los comprobantes. Esto rige también para el tramo de vuelta, el cual deberá ser comprado con anterioridad y rendido al inicio de la estadía. Los traslados desde y hacia los aeropuertos correrán por cuenta de los becarios.

Estipendio y Viáticos:

El Programa CELFI abona los viáticos y estipendios antes mencionados, y cada asistente se aloja donde desea y cubre todos sus gastos, incluidas las comidas. En caso de requerir asistencia para contratar alojamiento, sugerimos contactar a los organizadores del evento (simulacion@qi.fcen.uba.ar)

Criterios de selección para Becas para estudiantes latinoamericanos

Los postulantes a las becas serán seleccionados de acuerdo a los siguientes criterios:

- Afinidad e impacto entre la actividad a la que se postula y las actividades laborales/ investigación que realiza
- Impacto de la actividad a realizar por el postulante en su ámbito de actividad local

Requisitos de admisión

- Estar graduado en alguna de las carreras seleccionadas como prioritarias para esta actividad.

- Encontrarse realizando un posgrado o estar trabajando en temas vinculados con la temática a desarrollar en la presente actividad.
- Tener nacionalidad y residencia en países de Latinoamérica.
- Completar en el formulario, en forma detallada, la afinidad e impacto que generará esta actividad en la investigación que realiza.
- Completar en el formulario, en forma detallada, el impacto que generará esta actividad en el ámbito de actividad local.
- Presentar, adjunto con el formulario de inscripción, toda la documentación que respalde los antecedentes mencionados.
- No haber sido beneficiado con una beca del CELFI durante los últimos 12 meses.

Carreras elegibles: Egresados de Carreras de Grado de Bioquímica, Biología, Química, Física, Computación, Farmacia, Ciencias de Materiales, Biotecnología, Ingeniería Química y afines.

Inscripción a las becas

Las solicitudes electrónicas deberán incluir los siguientes documentos, con carácter de declaración jurada:

1. Currículum vitae, con especial énfasis en las asignaturas, cursos, conferencias y los trabajos publicados en temas relacionados con el curso.
2. Nota del candidato indicando el impacto esperado en términos de incorporación de valor agregado al estudio, especialización o proyecto de investigación que desarrolla (una página como máximo).
3. Carta de recomendación del supervisor o autoridad inmediata superior (una página como máximo).
4. Copia del título correspondiente a alguna de las carreras elegibles.
5. Fotocopia del pasaporte o documento de identidad válido para ingresar a la República Argentina.

Importante: Se deberán adjuntar estos documentos **en un único** archivo, en formato PDF.

En caso de quedar seleccionados, al inicio de la actividad se deberán presentar:

- Copia firmada en original de estas bases y condiciones, en conformidad con las mismas.
- Copia firmada en original de toda la documentación remitida electrónicamente: a) Currículum vitae; b) Nota del candidato indicando el impacto esperado; y c) Carta de recomendación del supervisor o autoridad inmediata superior.
- Copia del título correspondiente a alguna de las carreras elegibles, certificada por la entidad académica emisora.

Presentación de solicitudes

Los interesados deberán registrarse en la página web del CELFI, www.celfi.gov.ar, e inscribirse en la actividad seleccionada hasta el 22 de mayo de 2016 a las 23:59 hs de la República Argentina.

Las dudas o consultas relacionadas con las becas deberán tramitarse a través del botón de “Contacto” de la página web del CELFI.

Evaluación de las becas

La evaluación de los candidatos y la elección de los postulantes será realizada por el Consejo de Administración Académica del Programa CELFI con la asistencia de expertos convocados ad hoc de considerarlo conveniente.

Los resultados serán comunicados a través de la web www.celfi.gov.ar entre el 13 y el 17 de junio de 2016.