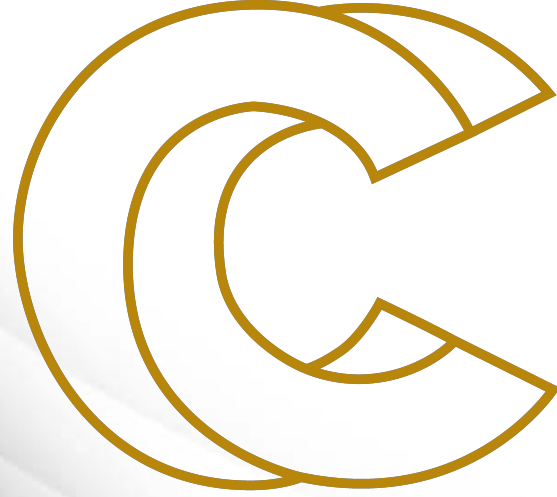


PRACE Bařarı Hikayeleri

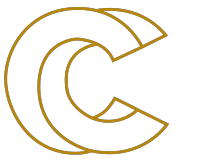


EURO

Özlem SARI

TÜBİTAK ULAKBİM

PRACE Başarı Hikayeleri



EURO



PARTNERSHIP FOR ADVANCED
COMPUTING IN EUROPE

Proje Adı

Ağır Metal Kirliliğine Karşı Yeni Bir Önlem: Doğal Malzemelerin Sudaki Ağır Metalleri Nasıl Yakaladığını Gösteren Simülasyonlar

Proje Türü

PRACE Project Access

Verilen Kaynak

12. çağrı: 63.7 milyon çekirdek saat - FERMI - CINECA, İtalya

Araştırma Alanı

Kimya & Malzeme Bilimi

PRACE Başarı Hikayeleri

- Kirleticiler; kurşun, kadmiyum veya cıva gibi ağır metaller
- Kurşun kemikte, dişlerde ve beyin dokusunda birikebilir, sinir sistemi ve kas dokusunda bozukluklara neden olabilir.
- Kadmiyum, genetik materyalimize zarar verebilir ve kansere, anemiye, kemik kırıklarına, sindirim sistemi veya kemik iliği hastalıklarına neden olabilir.



Dünya Sağlık Örgütü'nün (WHO) tahminine göre, 844 milyon insan hala temiz içme suyuna erişemiyor.

PRACE Başarı Hikayeleri

Ağır metalleri sudan uzaklaştırmak için çeşitli teknolojiler mevcuttur.

Membran filtrasyonu

Aktif karbon adsorpsiyonu

Elektrokoagülasyon

Karmaşık ve
Pahalı

Düşük Maliyetli Bir Alternatif

Meyve kabukları, kullanılmış kahve telvesi ve çay yaprakları gibi bazı organik atık türleri, sudaki ağır metalleri yakalama yeteneğine sahiptir.

2018'de Hindistan'da yapılan bir araştırma, kullanılmış kahve telvesinin kirlenmiş sudaki kurşunu yüzde 90 verimlilikle çıkarabildiğini gösterdi.

2020'de Türk bilim insanları, bir su örneğinden dört farklı ağır metali başarılı bir şekilde çıkarmak için demlenmiş çay atıklarını kullandılar.

PRACE Başarı Hikayeleri



Moleküler Dinamik Simülasyonları



PARTNERSHIP FOR ADVANCED
COMPUTING IN EUROPE

- İsviçre Federal Teknoloji Enstitüsü'nde (EPFL) fizik profesörü *Wanda Andreoni*
"Bu ucuz ve bolca bulunan doğal malzemelerin bunu nasıl yaptığını anlamak ve onlardan ilham almak istedik"
- PRACE süper bilgisayar hesaplama kaynakları kullanılarak hem ab initio hem de klasik MD simülasyonları gerçekleştirdiler.
- Meyve kabukları veya kullanılmış kahve ve çay atıkları binlerce farklı kimyasal bileşen içerirken, hemiselüloz bunlardan en yaygın olanıdır.
- Simülasyonlar için → farklı şeker zincirlerinden oluşan hemiselüloz

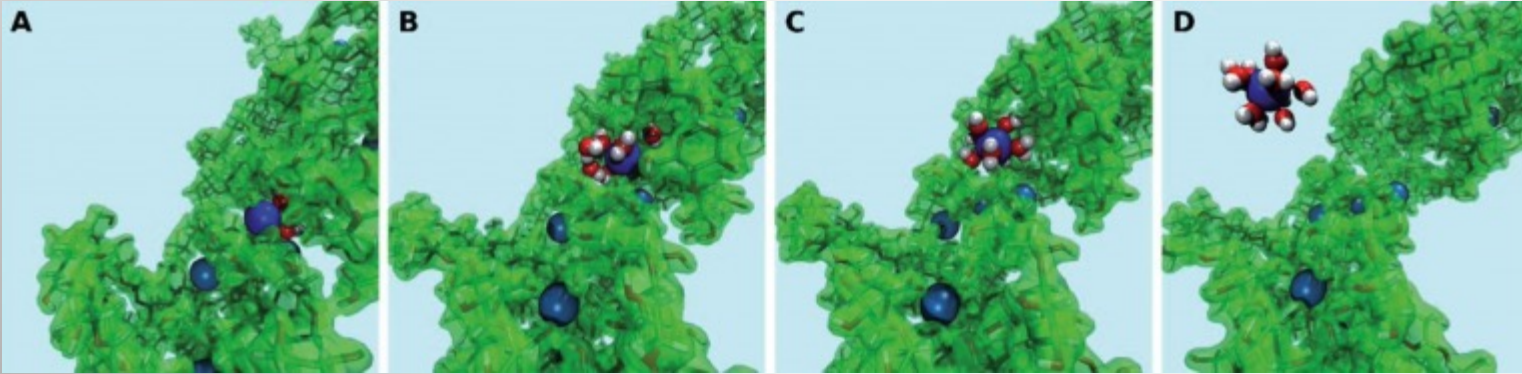
PRACE Başarı Hikayeleri

Moleküler Dinamik Simülasyonları



PARTNERSHIP FOR ADVANCED
COMPUTING IN EUROPE

- Simüle edilmiş hemiselüloz modelleri, ab initio hesaplamaları için **840**'tan fazla atom içeren dört zincirden oluşmaktadır. Klasik moleküler dinamik simülasyonları için, **200**'den fazla monosakkaritten ve dolayısıyla **30.000**'den fazla su molekülü dahil binlerce atomdan oluşan, çok daha büyük bir model kullanılmıştır.



Şekil A'da hemiselüloza (yeşil) güçlü bir şekilde bağlı kurşun iyonları (mavi) gösterilmektedir.

Şekil D'de kurşunlardan biri suda tamamen çözünür. (unbinding path)

-Klasik moleküler dinamik simülasyonundan alınan anlık görüntüler

PRACE Başarı Hikayeleri



Moleküler Dinamik Simülasyonları



PARTNERSHIP FOR ADVANCED
COMPUTING IN EUROPE

- Hemiselülozun kurşun iyonlarını sudan emmesi için serbest enerji bariyerlerinin ihmal edilebilir olduğunu, onları suya geri salmanın enerjisel olarak oldukça yüksek olduğunu göstermiştir.
- Bu mekanizmadan sorumlu olan gruplar çoğunlukla şekerlerin karboksilat grupları (R-COO-) ve biraz daha az ölçüde onların hidroksi gruplarıdır (R-OH).

Andreoni, "*Bu bulgular artık daha karmaşık senaryolara genişletilebilir*" diyor.

PRACE Başarı Hikayeleri



Chemical
Science



EDGE ARTICLE

View Article Online
View Journal | View Issue



How natural materials remove heavy metals from water: mechanistic insights from molecular dynamics simulations†

Fabio Pietrucci, ^a Mauro Boero ^b and Wanda Andreoni ^{cd}

Water pollution by heavy metals is of increasing concern due to its devastating effects on the environment and on human health. For the removal of heavy metals from water sources, natural materials, such as spent-coffee-grains or orange/banana/chestnut peels, appear to offer a potential cheap alternative to more sophisticated and costly technologies currently in use. However, in order to employ them effectively, it is necessary to gain a deeper understanding – at the molecular level – of the heavy metals-bioorganic-water system and exploit the power of computer simulations. As a step in this direction, we investigate *via* atomistic simulations the capture of lead ions from water by hemicellulose – the latter being

Cite this: *Chem. Sci.*, 2021, 12, 2979

All publication charges for this article have been paid for by the Royal Society of Chemistry



PARTNERSHIP FOR ADVANCED
COMPUTING IN EUROPE

Faydalar



- Bu araştırmanın çıktıları kullanılarak yeni malzemeler rasyonel olarak tasarlanabilir.
- Ekonomik bir yöntem.
- Nihayetinde gelişmekte olan ülkelerde temiz su kaynakları artırılabilir.

PRACE Başarı Hikayeleri



Proje Adı

Karbondioksitin Ayrışma Reaksiyonunda Kullanılan Altın Nanocluster'ın Yapı Tahmini Üzerine Bilgisayar Simülasyonları

Proje Türü

PRACE Project Access

Verilen Kaynak

Finlandiya'nın Sisu süper bilgisayarları & BSC Mare Nostrum süper bilgisayarları

Araştırma Alanı

Kimya ve Malzeme Bilimi

PRACE Başarı Hikayeleri

⊕ Atomik olarak hassas metal nanoclusterlar, kesin olarak tanımlanmış sayıda atoma ve düzinelerce metal atomundan oluşan bir çekirdeğe sahip ligand korumalı kümelerden oluşur. Koruyucu tabaka kükürt veya fosfin ligandlarından oluşur.

⊕ Altın veya gümüş nanoclusterlar birçok kimyasal reaksiyonu hızlandırabilir.

Amaç



⊕ Bu nanocluster'ların kristal yapıları çözüldüğünden, nanokataliz hakkında temel bir anlayışa atomik düzeyde ulaşılabilir.

⊕ Finlandiya, Jyväskylä Üniversitesi'nde Sami Kaappa, doktora tezinde nanometre boyutundaki altın nanocluster'ları DFT ile araştırdı.

PRACE Başarı Hikayeleri

Karşılaşılan Zorluk

⊕ Bir katalizörün hangi atomlarının katalitik performansına en fazla katkıda bulunabileceğini belirlemek son derece zordur çünkü gözlemlenen performans katalizördeki tüm atomların bir ortalamasını yansıtır.

⊕ Nanocluster katalizörlerinin iç atomlarının veya boşluklarının katalitik işlemlere katkılarını ortaya çıkarmak oldukça önemli.

⊕ 11 altın atomlu bir cluster'ın yapısını anlamak için, deney gruplarıyla iş birliği yapıldı. Deneyselciler bu cluster'ı sentezleyebildiler, ancak atom-hassas yapı (atom-precise structure) o noktada belirlenemedi.

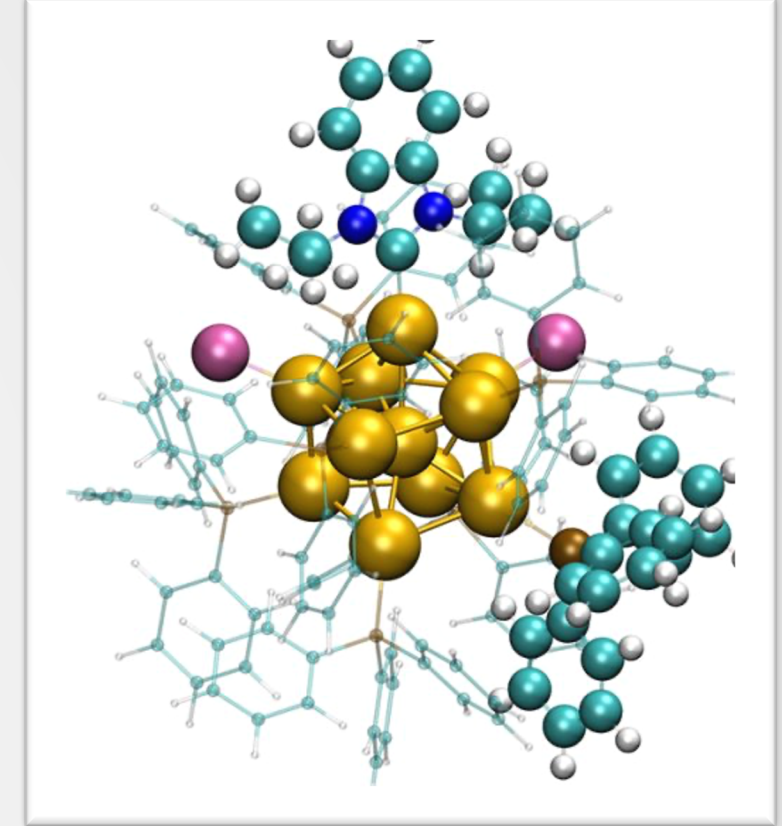
⊕ Hesaplama yöntemleri kullanılarak bazı olası yapılar bulundu ve bir yapı diğerlerine göre daha uygun olduğunu sonucuna ulaşıldı ve daha sonra da deneysel çalışmalar bunu doğruladı.

PRACE Başarı Hikayeleri

Faydalar

Karbondiyoksit Ayrışması Reaksiyonu

- ⊕ Bu clusterda fosfin ligandlarından biri karben ile değiştirilebilir ve yeni bir ligand oluşturulur.
- ⊕ Bu çalışmanın en ilginç sonucu ise karbondiyoksitin ayrışması reaksiyonunun bu cluster ile daha da hızlandırıldığı.
- ⊕ Bu katalitik aktivite zararlı maddelerin geri dönüştürülmesi için yeni teknolojilerin geliştirilmesine katkıda bulunabilir.
- ⊕ Yeni katalizörlerin geliştirilmesinde kullanılabilir.



CO₂'nin ayrışmasını elektrokatalize eden, N-heterosiklik karben korumalı bir altın küme görülmektedir.

PRACE Başarı Hikayeleri



Proje Adı

Openfoam ile Temiz Oda Hava Akışı Simülasyonları için Ağ/Mesh ve Çözücü Parametrelerini Optimize Etme

Proje Türü

PRACE SHAPE Pilot Project

Verilen Kaynak

50 000 çekirdek saat GCS, HLRS, Almanya

Araştırma Alanı

Mühendislik ve Enerji

PRACE Başarı Hikayeleri

OpenFOAM ile temiz oda hava akışı simülasyonları için ağ/mesh ve çözücü parametrelerini optimize etme

Almanya'da bulunan OPTIMA Pharma GmbH, steril ve steril olmayan iç içe şırıngalar, dökme şırıngalar, flakonlar, şişeler, temiz oda ve muhafaza teknolojisi üretir ve geliştirir. **OPTIMA**



Temiz oda (cleanroom), üretim ve/veya araştırma amacıyla kurulan, havadaki toz ve diğer parçacıklardan mümkün olduğunca arındırılmış sıcaklık ve nem kontrollü çalışma ortamıdır.

Temiz oda için birçok kirletici kaynağı bulunur. (mikroorganizmalar, partiküller, odanın yapısı, ortama dışarıdan getirilen ürünler vs.) ve bu kirleticilerin steril malzemelere ulaşması engellenmelidir.

Tüm bu parametrelerin test edilmesi ve ölçümü çok zaman, emek ve yoğun bir çalışma gerektirir. Bu analizler, üç boyutlu hava akış modelleri ile yapılabilir.



PRACE SHAPE ve OPTIMA Pharma - Daha Temiz «Temiz Odalar»

PRACE Başarı Hikayeleri

Amaç



Tüm temiz odadaki hava akışını simüle edebilen ve endüstriyel üretimin gereksinimlerini karşılayan uygun CFD modeli bulmaktır.

Karşılaşılan Zorluk



PC Kümesinde yapmış oldukları çalışmalar temiz odadaki akışın detaylarını çözmek için 500 milyon hücreli bir mesh/ağa ihtiyaçları olduğunu göstermiştir. Buradaki en büyük zorluk ise bu meshlerin ayrıştırılması, yeniden yapılandırılması ve paralel mesh'lerin oluşturulması.

Faydalar



+ OPTIMA Pharma, SHAPE projesi ile modellerini **1024** çekirdeğe kadar ölçeklendirebildi.

+ CFD analizi için önemli ölçüde azaltılmış kaynak miktarı

+ Gelecekte CFD, üretim makinelerinde yapılan pahalı duman çalışmalarının yerini alabilir. Deneme yanılma yöntemleri ve pahalı tasarımlar da bu sayede en aza indirilebilir.

PRACE Başarı Hikayeleri



Proje Adı

Hibrit Nanoparçacık Yapıları Tahmin Etmede Yapay Zeka Kullanımı

Proje Türü

PRACE Project Access

Verilen Kaynak

CSC, Finlandiya ve Barcelona Supercomputing Center (BSC), İspanya

Araştırma Alanı

Yapay Zeka ve Malzeme Bilimi

PRACE Başarı Hikayeleri



[nature](#) > [nature communications](#) > [articles](#) > [article](#)

Article | [Open Access](#) | [Published: 03 September 2019](#)

A method for structure prediction of metal-ligand interfaces of hybrid nanoparticles

[Sami Malola](#), [Paavo Nieminen](#), [Antti Pihlajamäki](#), [Joonas Hämäläinen](#), [Tommi Kärkkäinen](#) & [Hannu Häkkinen](#)

[Nature Communications](#) **10**, Article number: 3973 (2019) | [Cite this article](#)

5082 Accesses | **14** Citations | **83** Altmetric | [Metrics](#)

Abstract

Hybrid metal nanoparticles, consisting of a nano-crystalline metal core and a protecting shell of organic ligand molecules, have applications in diverse areas such as biolabeling, catalysis, nanomedicine, and solar energy. Despite a rapidly growing database of experimentally determined atom-precise nanoparticle structures and their properties, there has been no successful, systematic way to predict the atomistic structure of the metal-ligand interface. Here, we devise and validate a general method to predict the structure of

+ Baz alınan çalışmada, nanoparçacık referans sistemleri üzerinde halihazırda yayınlanmış deneysel yapısal bilgileri kullanılmıştır.

+ Yapay zeka aracılığıyla, hibrit metal nanoparçacıklarda bulunan metal-molekül arayüzündeki moleküllerin bağlanma bölgelerini tahmin eden bir algoritma geliştirilmiştir.

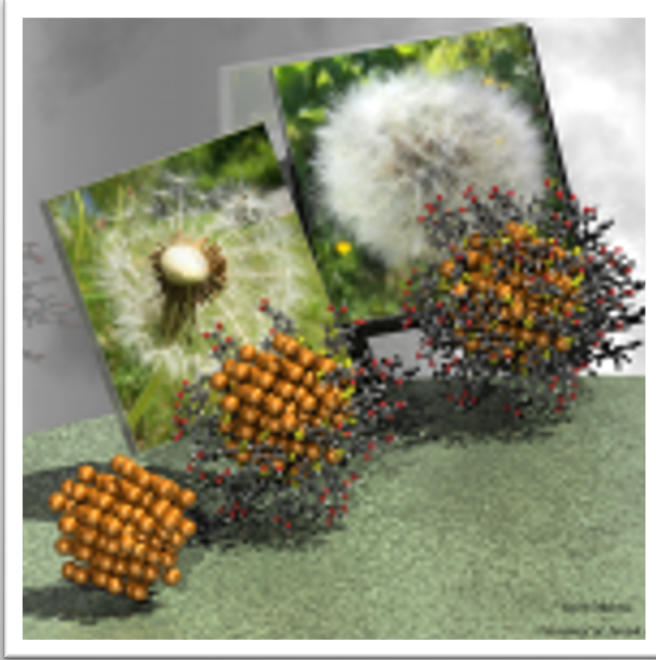
PRACE Başarı Hikayeleri



Yapılan Çalışmalar



- + Çalışma-->Finlandiya, Jyväskylä Üniversitesi'ndeki Nanobilim Merkezi ve Bilgi Teknolojisi Fakültesi'ndeki araştırmacılar
- + Nanometre boyutundaki hibrit metal nanopartiküller, kataliz, nanoelektronik, nanotıp ve biyolojik görüntüleme dahil olmak üzere farklı proseslerde birçok uygulamaya sahiptir.
- + Algoritmalarının arkasındaki temel fikir, atomlar arasındaki kimyasal bağlar iyi tanımlanmış bağ açlarına ve bağ mesafelerine sahiptir. Güvenilir deneylerden elde edilen her nanoparçacık yapısı, metal-molekül ara yüzünün kimyası hakkında önemli bilgiler verir.



Hibrit metal nanoparçacıkların yapısını tahmin etmek, "rüzgarda uçmuş" bir karahindiba çiçeğın tüylerini tamamlamaya benzer bir problemdir.

Metal bir çekirdeğın (bu durumda altın, turuncu küreler) üzerine moleküller (gri) eklemek için en uygun yerler nelerdir?

Yapılan Çalışmalar



- + Yapısal tahminler için yapay zeka uygulamalarıyla ilgili ilginç soru şudur: Yeni ve bilinmeyen nanoparçacıklar için tahminlerin güvenilir hale gelmesi için yapısı bilinen kaç tane yapı bilmemiz gerekiyor?
- + Academy of Finland'dan Sami Malola «sadece birkaç düzine bilinen yapıya ihtiyacımız var» diye belirtmiştir.

PRACE Başarı Hikayeleri

Faydalar

+ Projenin bir sonraki fazında makine öğrenmesi yöntemleri kullanılarak hibrit nanoparçacıklar için atomik etkileşim modelleri oluşturulacaktır.

+ Bu modeller parçacık-parçacık reaksiyonlarının incelenmesinde ve nanoparçacıkların küçük ilaç moleküllerinde taşıyıcı olma yetenekleri üzerine araştırmalar yapılmasına olanak verecektir.

PRACE Başarı Hikayeleri



Proje Adı

Gizli ilaç Bağlanma Ceplerine Nasıl Bakılır?

Proje Türü

PRACE Project Access

Verilen Kaynak

16.8 milyon çekirdek saat MareNostrum, BSC, İspanya
20 milyon çekirdek saat Piz Daint CSCS, İsviçre

Araştırma Alanı

Kimya

PRACE Başarı Hikayeleri



Uzun bir süredir, bazı proteinlerin ve protein ailelerinin 'undruggable' yani farmakolojik olarak hedeflenemeyen proteinler olduğu varsayılmıştır.

Profesör Francesco Gervasio, "Bu proteinlerin çoğunun gizli ceplere sahip olduğunu artık biliyoruz" diyor.

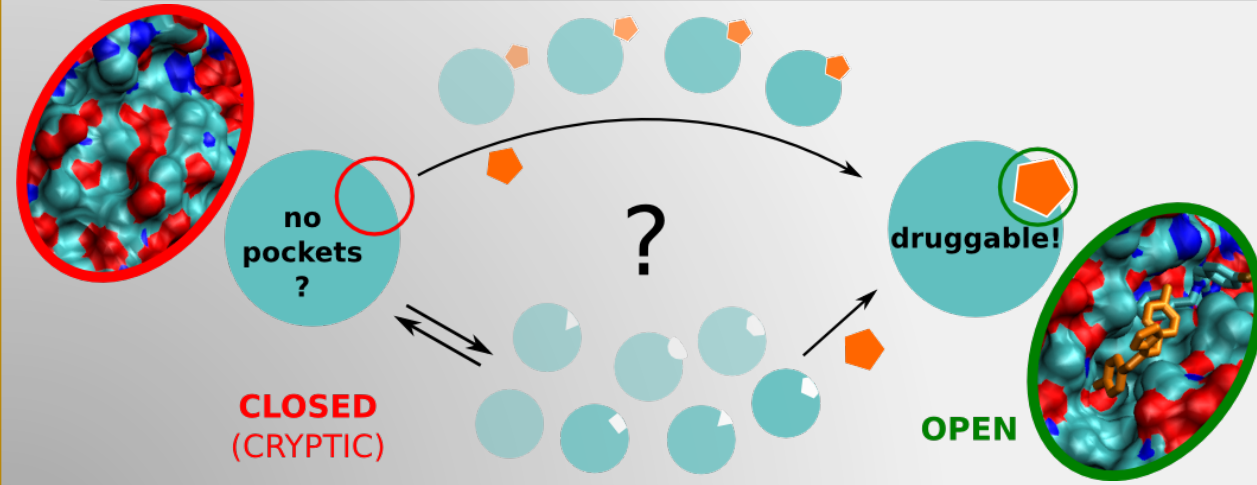
Bu cepler gizlidir ve yalnızca bir ligand molekülü gerçekten bağlandığında görünür. Bu nedenle şimdiye kadar sadece tesadüfen bulunmuşlardır ve geleneksel ilaç geliştirme yöntemleriyle hedef alınamazlar. Ancak yeni bulgular, bunların akılcı MD simülasyonları ile keşfedilebileceğini kanıtlıyor.

PRACE Başarı Hikayeleri

Yapılan Çalışmalar



- + Bu projede gizli cepleri keşfetmek için bir örnekleme simülasyon yöntemi geliştirildi. Hedef proteinlerin konformasyonel değişikliklerini örnekleme için -Hamiltonian replica exchange-based approach- bir yaklaşım kullandılar.
- + Suyun hidrofobikliği artar, böylece protein ve su arasındaki etkileşim artar. Birçok çeşit küçük organik moleküllerin de sisteme eklenmesiyle birlikte, bu yaklaşım sonucunda gizli ceplerin açılmasına yardımcı olunuyor.



Bağlı molekül yoksa, kriptik cepler görünmezdir. Francesco Gervasio'nun gelişmiş örnekleme yaklaşımıyla, bu tür gizli bağlama ceplerini bulmak ve karakterize etmek mümkündür.

RETURN TO ISSUE | < PREV ARTICLE NEXT >

Investigating Cryptic Binding Sites by Molecular Dynamics Simulations

Antonija Kuzmanic, Gregory R. Bowman, Jordi Juarez-Jimenez, Julien Michel, and Francesco L. Gervasio*

Cite this: *Acc. Chem. Res.* 2020, 53, 3, 654–661
Publication Date: March 5, 2020
https://doi.org/10.1021/acs.accounts.9b00613
Copyright © 2020 American Chemical Society
RIGHTS & PERMISSIONS

Article Views 2250
Altmetric 24
Citations 23
LEARN ABOUT THESE METRICS

Share Add to Export
RIS

Read Online

PDF (3 MB)

SUBJECTS: Ligands, Mathematical methods, v

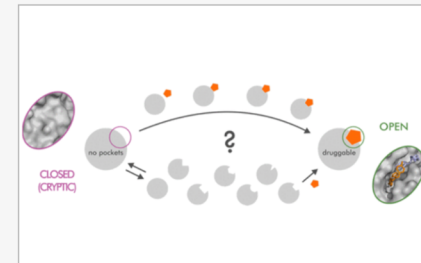


Accounts of Chemical Research

Abstract

Conspectus

This Account highlights recent advances and discusses major challenges in investigations of cryptic (hidden) binding sites by molecular simulations. Cryptic binding sites are not visible in protein targets crystallized without a ligand and only become visible crystallographically upon binding events. These sites have been shown to be druggable and might provide a rare opportunity to target difficult proteins. However, due to their hidden nature, they are difficult to find through experimental screening. Computational methods based on atomistic molecular simulations remain one of the best approaches to identify and characterize cryptic binding sites. However, not all methods are equally efficient. Some are more apt at quickly probing protein dynamics but do not provide thermodynamic or druggability information, while others that are able to provide such data are demanding in terms of time and resources. Here, we review the recent contributions of mixed-solvent simulations, metadynamics.



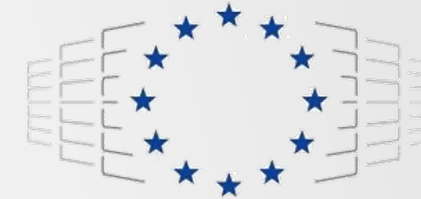
PRACE Başarı Hikayeleri

Faydalar



- + K-RAS proteini kendisine o kadar güçlü bağlanan doğal bir liganda sahiptir ki şimdiye kadar test edilen hiçbir ilaç adayı onunla rekabet edememiştir.
- + Deneysel sonuçlar ve PRACE'deki Gervasio'nun yöntemi birleştirildiğinde K-RAS proteininde ikinci bir gizli bağlanma cebi buldu - ve bu da proteini hedeflemek için ikinci bir şans olması anlamında oldukça önemlidir.
- + Bu yaklaşım SARS-CoV-2 koronavirüs tedavisi için kullanılmaktadır. SARS-CoV-2 yapısal olmayan protein 1'in (Nsp1)'i, COVID-19'a karşı antiviral tedavi için bir potansiyel bir hedef proteindir.
- + Nsp1 proteininde bir ligandın bağlanabileceği hiçbir görünür boşluğa yani cebe sahip değildir, bu nedenle gizli bir bağlama cebi arayışı, etkili tedavi anlamında belirleyici olabilir.

Teşekkürler!



EuroHPC
Joint Undertaking

This project has received funding from the European High-Performance Computing Joint Undertaking (JU) under grant agreement No 951732. The JU receives support from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme and Germany, Bulgaria, Austria, Croatia, Cyprus, Czech Republic, Denmark, Estonia, Finland, Greece, Hungary, Ireland, Italy, Lithuania, Latvia, Poland, Portugal, Romania, Slovenia, Spain, Sweden, United Kingdom, France, Netherlands, Belgium, Luxembourg, Slovakia, Norway, Switzerland, Turkey, Republic of North Macedonia, Iceland, Montenegro