



Contribution ID: 8

Type: **not specified**

Computación Cuántica en Plegamiento de Proteínas: ¿Suficientes Qubits para Tantos Átomos?

Wednesday 25 October 2023 13:00 (15 minutes)

En nuestra empresa nos dedicamos principalmente al diseño y optimización de nuevos principios activos y formulaciones en la industria farmacéutica a partir de la caracterización de sus interacciones con otras moléculas y agregados supramoleculares de diferente grado de organización, como por ejemplo membranas celulares. En particular, estamos interesados en la comprensión de la interacción entre péptidos del sistema inmunológico innato (los llamados péptidos antimicrobianos) y membranas con composiciones lipídicas patológicas. Estas interacciones dependen de la conformación de la secuencia de aminoácidos, que a menudo adquiere una forma de hélice- α durante su función lítica. El plegamiento de proteínas, que transforma una cadena de polipéptidos en su estructura tridimensional funcional, representa un desafío central en biología molecular, especialmente en interfases como la superficie de una membrana celular. A pesar de su papel clave en numerosos mecanismos biológicos, los detalles cinéticos y dinámicos de estos procesos siguen sin entenderse. La paradoja de Levinthal, que destaca la imposibilidad de que las cadenas de aminoácidos encuentren su conformación nativa y funcional en un periodo biológicamente relevante si tuvieran que explorar todas las configuraciones posibles, ilustra esta complejidad. Tradicionalmente, las simulaciones computacionales utilizando superordenadores clásicos han tenido dificultades para abordar esta difícil tarea. En este punto, la computación cuántica ofrece una ventana de oportunidad. Recientemente, IBM liberó un código destinado a resolver el problema del plegamiento de péptidos en medios homogéneos para cadenas de aminoácidos relativamente cortas utilizando esta tecnología. Su enfoque se basa en varias aproximaciones, incluida la representación de los residuos peptídicos usando esferas que interactúan bajo el potencial de Miyazawa-Jernigan, y la discretización de grados de libertad, que se reducen a una red tetraédrica. Nosotros hemos modificado el Hamiltoniano empleado por el grupo de computación cuántica de IBM para incluir una interfase continua entre un medio hidrofóbico y un medio hidrofílico, modelando así la superficie de una membrana lipídica. Tras implementar esta modificación en la versión pública del código, calculamos la conformación óptima para tres secuencias de péptidos de 10 aminoácidos en interfases con diferentes gradientes de polaridad. Las tres secuencias empleadas fueron diseñadas para ser principalmente hidrofóbicas, hidrofílicas y altamente anfipáticas, mostrando así diferentes comportamientos en los modelos de interfase. Aquí presentaremos los resultados obtenidos con nuestra aproximación utilizando el emulador cuántico disponible en CESGA.

Presenter: (MD-USE), Angél Piñeiro Guillen (MD-USE)

Session Classification: Proyectos de computación cuántica