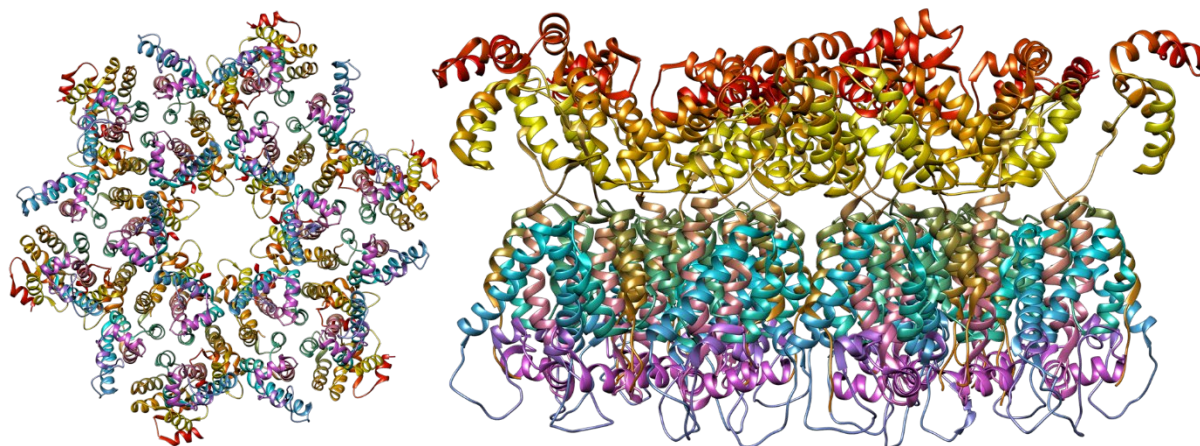


2024 연세대학교 양자컴퓨터 활용 기본 교육

5 주차 – Group Challenge + Q&A

Group Challenge 3: Lab - Quantum Chemistry for HIV



개요	<p>HIV 는 전세계적으로 공공보건의 큰 난제중 하나입니다. HIV 에 연관되어 발생하게 되는 질병의 역학은 영양, 의료시설로의 접근성, 교육 및 연구 지원을 포함한 다양한 사회적 문제를 유발합니다. 바이러스의 빠른 변이는 문제를 더 어렵게 만드는 요인 중 하나입니다. 특히 HIV-1-C 및 HIV-2 변종이 주로 아프리카에서 우세합니다. 자금 지원의 차이로 인해 아프리카 변종 치료를 위한 연구는 다른 프로그램에 비해 뒤쳐지고 있습니다. 2021 Africa Challenge 는 이러한 상황에서 아프리카 연구자들은 이러한 불균형을 해결하기 위해 노력하고 있으며 도구 키트에 양자 컴퓨팅과 같은 최신 기술을 사용하는 것을 지역 사회에 촉구합니다.</p> <p>퀀텀 컴퓨팅은 약물 설계에서 크게 기여할 것으로 기대되고 있습니다. 특히 새로운 항레트로바이러스를 설계하기 위해서는 화학적 시뮬레이션을 수행하여 항레트로바이러스가 바이러스 단백질과 결합하는지 확인하는 것이 중요합니다. 이러한 시뮬레이션은 고전적인 슈퍼컴퓨터에서는 어렵고 때로는 효과적이지 않은 것으로 악명이 높습니다. 양자 컴퓨터는 더 나은</p>
----	--

	<p>약물 설계 작업 흐름을 가능하게 하는 더 정확한 시뮬레이션을 가능하게 할 것으로 기대되고 있습니다.</p> <p>항레트로바이러스제는 단백질분해효소라고 불리는 바이러스 단백질과 결합하고 이를 차단하는 약물로, 바이러스 다단백(polyproteins)을 더 작은 단백질로 절단하여 처리할 수 있도록 해줍니다. 이 단백질분해효소는 화학적 가위로 생각될 수 있습니다. 항레트로바이러스제는 가위가 절단하는 능력을 방해하는 끈적한 장애물로 생각될 수 있습니다. 이 단백질분해효소가 차단되면, 이 바이러스는 더 이상 자신을 복제할 수 없습니다.</p> <p>바이러스 단백질분해효소의 돌연변이는 특정 항레트로바이러스의 결합력을 변화시킵니다. 따라서 돌연변이가 발생하여 항레트로바이러스가 더 이상 잘 결합하지 않을 때는 항레트로바이러스 분자가 다시 강하게 결합하도록 조정하는 것이 필요합니다.</p> <p>이 챌린지의 주요 목표는 가상의 항레트로바이러스 분자가 가상의 바이러스 단백질분해효소와 결합하는지 여부를 탐구하는 것입니다.</p>
목표	<ol style="list-style-type: none"> 1. 챌린지 문제를 완료합니다. 2. 문제를 어떻게 이해했는지, 어떻게 풀었는지 발표합니다.
참고자료	<ul style="list-style-type: none"> • (Original) IBM Quantum Challenge Africa: Quantum Chemistry for HIV https://github.com/qiskit-community/ibm-quantum-challenge-africa-2021/blob/main/content/lab3/lab3.ipynb