

CAIO FONSECA NUNES (00336853)

GUILHERME ANTÔNIO RIBEIRO LARANJEIRA (E0507418)

GUILHERME DE MORAES BRANCO (00339163)

HENRIQUE TEIXEIRA MARTINS (E0531896)

KLEBER MOLINA KARDEL (E0505372)

MATHEUS RIBEIRO DOS SANTOS CORDOVIL (E0417953)

THAIS NASCIMENTO DA COSTA (E0510301)

Bacharelado em Ciências da Computação

Desafios e Desenvolvimento da Indústria Farmacêutica através do Uso da Computação Quântica

Trabalho apresentado ao Centro Universitário das
Américas – FAM como requisito para obtenção
do título de Bacharel em Ciências da Computação

Centro Universitário das Américas – FAM

2025

DESAFIOS E DESENVOLVIMENTO DA INDÚSTRIA FARMACÊUTICA ATRAVÉS DO USO DA COMPUTAÇÃO QUÂNTICA

Caio Fonseca Nunes; Guilherme Antônio Ribeiro Laranjeira; Guilherme de Moraes Branco;
Henrique Teixeira Martins; Kleber Molina Kardel; Matheus Ribeiro dos Santos Cordovil;
Thais Nascimento da Costa.

Acadêmicos do curso de Bacharelado em Ciências da Computação. Centro Universitário das
Américas – FAM

RESUMO

Com o avanço da tecnologia quântica, criam-se soluções novas para problemas já conhecidos. Uma das principais limitações dos computadores clássicos está em seu nível limitado de processamento, que por sua vez limita também a eficiência de simulações usadas na descoberta de novos fármacos. Este artigo tem como objetivo explorar o potencial da tecnologia quântica, e sua capacidade de resolver problemas de precisão e velocidade na criação de novos remédios, destacando sua capacidade de simular interações moleculares e modelar sistemas biológicos complexos. A metodologia baseou-se em revisão bibliográfica e análise de artigos científicos. Os resultados demonstram avanços significativos, mas também apontam limitações, como decoerência, erros de operação e escalabilidade. Conclui-se que, apesar dos desafios atuais, a computação quântica tem potencial para transformar a indústria farmacêutica, contribuindo para avanços na saúde global.

PALAVRAS-CHAVE: Computação quântica; Indústria farmacêutica; Simulações moleculares; Descoberta de fármacos; Algoritmos quânticos.

1. INTRODUÇÃO

A indústria farmacêutica é um dos pilares da saúde pública, responsável pela pesquisa, desenvolvimento e produção de medicamentos essenciais para o tratamento de doenças e melhoria da qualidade de vida da população. No entanto, o processo de descoberta de novos fármacos é notoriamente demorado, complexo e financeiramente custoso. Estima-se que o desenvolvimento de um novo medicamento possa levar de 10 a 15 anos e demandar investimentos da ordem de bilhões de dólares, como destaca Paul et al (2010).

Nesse contexto, a computação quântica surge como uma alternativa promissora para acelerar esse processo, oferecendo capacidade computacional superior à dos sistemas tradicionais em tarefas específicas, como simulações moleculares complexas. De acordo com Cao et al. (2019), com base nas propriedades da mecânica quântica, como superposição e entrelaçamento, os computadores quânticos podem realizar cálculos de alta complexidade em escalas significativamente menores de tempo, o que tem despertado o interesse de grandes empresas e centros de pesquisa farmacêutica.

Este trabalho propõe uma análise sobre as possíveis contribuições da computação quântica para a indústria farmacêutica, especialmente na etapa de descoberta de novos medicamentos, utilizando revisão bibliográfica e exemplos práticos de algoritmos aplicados.

1.1 Tema e Justificativa

O tema deste trabalho é a aplicação da computação quântica na descoberta de fármacos, com foco na simulação molecular e triagem de compostos. A justificativa reside na necessidade de acelerar o desenvolvimento de medicamentos pela relevância científica e social da pesquisa por medicamentos mais eficazes e seguros, aliada ao potencial transformador da computação quântica nesse processo. Segundo Kandala et al (2017), apesar de ainda estar em estágio experimental, essa tecnologia já apresenta avanços consideráveis, como a simulação de moléculas simples e o uso de algoritmos variacionais que permitem estimar estados de energia de compostos químicos com maior precisão.

Além disso, o tema é relevante para o avanço da ciência da computação, pois estimula o desenvolvimento de novos modelos de algoritmos e arquiteturas voltadas para problemas reais, como os enfrentados pela indústria farmacêutica.

1.2 Objetivo da pesquisa

O objetivo geral deste trabalho é investigar as contribuições da computação quântica para a indústria farmacêutica, especialmente no processo de descoberta de fármacos. Os objetivos específicos, destacam-se:

- Explorar os fundamentos da computação quântica, incluindo os conceitos de superposição, emaranhamento e interferência, e sua relação com simulações moleculares;
- Investigar casos concretos de aplicação da computação quântica no desenvolvimento de medicamentos, como o uso do VQE para cálculos de estrutura eletrônica e do Algoritmo de Grover na otimização de ligantes;
- Discutir os desafios tecnológicos enfrentados atualmente, como a decoerência, erros operacionais, limitações de escalabilidade e estratégias de mitigação de erros, como os códigos de correção quântica.

1.3 Metodologia da pesquisa

A metodologia adotada neste trabalho é de natureza qualitativa e exploratória, com foco na revisão bibliográfica sistemática e na análise de estudos de caso relacionados à aplicação da computação quântica na indústria farmacêutica. O objetivo é compreender tanto os fundamentos teóricos quanto as aplicações práticas dessa tecnologia no processo de descoberta e desenvolvimento de fármacos.

Foram consultadas fontes acadêmicas relevantes, como livros, artigos científicos, publicações em revistas especializadas e relatórios técnicos. As bases utilizadas incluem o Google Acadêmico, ResearchGate e IEEE Xplore, a fim de garantir atualidade e relevância dos dados analisados. Os critérios de inclusão consideraram trabalhos que abordassem diretamente aspectos técnicos, desafios, algoritmos e aplicações práticas da computação quântica em contextos biomoleculares.

Além da fundamentação teórica, foram analisados exemplos de algoritmos quânticos aplicados em simulações moleculares, tais como o Algoritmo de Deutsch-Jozsa e o Variational Quantum Eigensolver (VQE), ambos testados por meio da plataforma IBM Quantum Experience de acordo com o estudo de OLIVEIRA et al. (2021).

Para reforçar a análise, foram incluídos estudos sobre mitigação de erros em circuitos quânticos, como as técnicas descritas por Temme et al. (2017), e estratégias como o uso de simuladores quânticos para contornar as limitações do hardware físico. Como apontam Porto et al. (2023), “o uso de simuladores permite validar algoritmos em ambiente controlado, sem interferências de decoerência ou ruídos”.

Essa abordagem metodológica visa integrar teoria e prática, oferecendo uma visão crítica e fundamentada sobre o uso da computação quântica no contexto farmacêutico, além de identificar as perspectivas e limitações da tecnologia para aplicações futuras.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Princípios da Computação Quântica

A computação quântica é um tipo de tecnologia que processa informações de maneira diferente dos computadores tradicionais, usando unidades chamadas qubits. Enquanto um bit em um computador comum só pode ser 0 ou 1, um qubit pode representar ambos ao mesmo tempo, graças a um fenômeno chamado superposição. Isso significa que o qubit está em uma mistura de estados, escrita como $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$, onde a e b são números que indicam a probabilidade de cada estado. Esses números seguem uma regra: a soma de suas probabilidades ($|a|^2 + |b|^2$) deve ser igual a 1, de acordo com Rieffel (2011). A Figura 1 mostra como os estados de um qubit podem ser representados. A Tabela 1 compara os conceitos básicos de computadores clássicos e quânticos.

Tabela 1 – Tabela comparativa entre computadores clássicos e quânticos.

Aspectos	Computadores Clássicos	Computadores Quânticos
Unidade de informação	Bits (0 ou 1).	Qubits (superposição de 0 e 1).
Processamento	Sequencial, baseado em lógica binária.	Paralelo, baseado em estados quânticos.
Base teórica	Lógica clássica.	Mecânica quântica.

Fonte: Adaptado de Rieffel (2011).

Segundo Nielsen (2010), outro conceito importante é o emaranhamento, que conecta dois ou mais qubits de forma especial. Quando qubits estão emaranhados, o estado de um deles depende diretamente do estado do outro, mesmo que estejam muito distantes.

De acordo com Oliveira et al., (2022), para realizar cálculos, a computação quântica usa operações chamadas portas quânticas. Um exemplo é a porta Hadamard, que coloca um qubit em superposição, transformando o estado $|0\rangle$ em uma combinação igual de $|0\rangle$ e $|1\rangle$, escrita como $\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$. Outra porta comum é a CNOT, que altera o estado de um qubit com base no estado de outro.

Quando vários qubits são usados juntos, seus estados são combinados por uma operação matemática chamada produto tensorial. Por exemplo, o estado de n qubits é escrito como $|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle$, formando um sistema maior. Esse sistema vive em um espaço matemático que cresce muito rápido: com n qubits, há 2^n estados possíveis. Isso permite que a computação quântica realize muitos cálculos ao mesmo tempo, um conceito chamado paralelismo quântico, segundo Cao et al. (2019).

2.2 Conceitos de Simulação Molecular na Descoberta de Fármacos

A simulação molecular consiste no estudo das interações entre átomos e moléculas, focando em propriedades como energias de ligação e distribuições eletrônicas. Esses cálculos envolvem sistemas com milhares de partículas, cujas dinâmicas são regidas pela mecânica quântica PAUL et al. (2010). Computadores clássicos enfrentam limitações teóricas devido ao crescimento exponencial do número de operações com o aumento da complexidade do sistema, associado à solução das equações de Schrödinger, de acordo com McArdle et al. (2020).

Na computação quântica, os qubits representam estados quânticos de moléculas com base em propriedades como spin e orbitais, permitindo uma descrição teórica das interações moleculares em nível atômico. Essa abordagem utiliza modelos matemáticos para caracterizar sistemas químicos complexos, explorando o potencial do paralelismo quântico para processar múltiplas configurações simultaneamente, informa OLIVEIRA et al. (2022).

3. MATERIAIS E MÉTODOS E RESULTADOS

Este tópico tem como objetivo detalhar os métodos utilizados para atingir o entendimento de cada assunto, neste artigo encontra-se o resultado de uma pesquisa exploratória. Foram realizados estudos, leituras e análise de conteúdo, no sentido de atingir um

entendimento do tema quântico quando inserido na área farmacêutica, mais especificamente na criação de novos remédios por meio de simulações moleculares.

3.1 Aplicações em Química e Farmacêutica

A simulação de moléculas é uma das aplicações mais promissoras da computação quântica. O método Variational Quantum Eigensolver (VQE) foi usado para calcular energias eletrônicas de moléculas como H₂ e He₂, com resultados convergentes em 30–55 iterações de, segundo Porto et al. (2023, p. 7). Além disso, algoritmos quânticos foram aplicados para otimizar ligantes que se ligam ao receptor de dopamina D₂, um alvo importante no tratamento de doenças neurológicas, como esquizofrenia e Parkinson de acordo com Olivera et al. (2021).

3.2 Resultados e Aplicações.

A “computação quântica transforma a descoberta de medicamentos representando moléculas em suas formas mecânicas fundamentais”. Conforme estudo de Chen et al. (2024). De acordo com este estudo, a computação quântica tem potencial para acelerar e aprimorar diversas etapas do ciclo de desenvolvimento de medicamentos, como simulações moleculares e previsão de interações.

3.3 Uso de Simuladores Quânticos:

Para contornar os erros em dispositivos quânticos reais, simuladores quânticos configurados sem erros de decoerência e de medidas podem ser usados. Porto et al. (2023, p. 7) destacam que esses simuladores são úteis para testar algoritmos como o VQE antes de sua implementação em hardware real.

3.4 Limitações

Duas principais limitações persistem nas simulações biomoleculares: o custo e o desempenho. Os altos custos estão associados à necessidade de trilhões de etapas para realizar simulações em escalas de tempo biologicamente relevantes, como, por exemplo, em milissegundos. Além disso, a paralelização é limitada pela comunicação entre os processadores e pela dependência sequencial dos cálculos, o que impede que o aumento do número de núcleos resulte em uma melhora proporcional no desempenho destaca BIOBOOT (2012).

3.4.2 Escalabilidades e mitigação de erros

De acordo com Kuman et al. (2024) a computação quântica, apesar de seu potencial revolucionário, enfrenta uma série de desafios tecnológicos que ainda limitam sua adoção generalizada e sua aplicação prática em áreas como a indústria farmacêutica. Esses desafios podem ser divididos em categorias principais, como escalabilidade e mitigação de erros.

3.4.2.1 Escalabilidade

A modelagem de sistemas moleculares complexos com computação quântica ainda enfrenta limitações importantes, principalmente relacionadas à escalabilidade. Processadores quânticos possuem uma quantidade limitada de qubits, e depende de avanços tecnológicos significativos para atender as demandas das aplicações na descoberta de novos medicamentos, segundo Kuman et al. (2024).

3.4.2.2 Mitigação de erros

A mitigação de erros representa um dos maiores desafios na aplicação da computação quântica à descoberta de medicamentos, devido à sensibilidade dos computadores quânticos a fatores ambientais e às imperfeições nas portas lógicas. De acordo com Kuman et al. (2024), para garantir simulações confiáveis, é fundamental o desenvolvimento de algoritmos mais robustos e de técnicas eficazes de correção de erros, além da criação de ambientes controlados que reduzam interferências externas.

3.4.3 Restrições de hardware

De acordo com Kuman et al. (2024), as limitações de hardware e software são fatores centrais na aplicação da computação quântica à descoberta de fármacos. A baixa contagem de qubits, a conectividade restrita, os altos índices de erro e os curtos tempos de coerência limitam a capacidade dos dispositivos atuais em simular sistemas moleculares complexos. Além disso, o desenvolvimento de algoritmos quânticos eficazes exige conhecimento especializado tanto em física quântica quanto nas demandas computacionais da área biomolecular.

3.5 Resultados da Aplicação da Computação Quântica na Descoberta de Medicamentos

A computação quântica tem o potencial de transformar o setor farmacêutico, reduzindo custos, acelerando o desenvolvimento de fármacos e abordando desafios complexos, como inibidores para Câncer. Vamos analisar como essa tecnologia pode ajudar a identificar

compostos promissores mais rapidamente, prever a eficácia de um medicamento em potencial com maior precisão e abordar desafios como a resistência microbiana.

Além disso, vamos discutir como a computação quântica pode reduzir custos e acelerar o desenvolvimento de fármacos, tornando o processo de descoberta de medicamentos mais eficiente e eficaz. Com a capacidade de processar informações em escala atômica, a computação quântica pode revolucionar a descoberta de medicamentos e permitindo simulações mais precisas. Vejamos alguns resultados dessas aplicações.

3.5.1 Potencial na Otimização de Leads e Triagem de Compostos

A otimização de leads e a triagem de compostos representam etapas cruciais no desenvolvimento de novos medicamentos. A otimização de leads envolve o refinamento de moléculas iniciais para melhorar suas propriedades farmacológicas, como afinidade pelo alvo biológico, biodisponibilidade e segurança. Por sua vez, a triagem de compostos consiste na avaliação de grandes bibliotecas de substâncias para identificar aquelas com potencial terapêutico. A computação quântica tem o potencial de revolucionar essas etapas ao permitir análises mais rápidas e precisas de vastos conjuntos de dados moleculares. Algoritmos quânticos podem simular interações entre moléculas e alvos biológicos com maior fidelidade do que os métodos computacionais clássicos, reduzindo o tempo necessário para identificar candidatos a fármacos viáveis segundo Cao et al. (2019).

Pesquisas recentes indicam que a computação quântica está sendo explorada para acelerar a triagem virtual de compostos, permitindo a avaliação de milhares ou até milhões de moléculas em um período significativamente menor de acordo com Cao et al. (2019). Essa capacidade é particularmente relevante em um contexto em que os recursos computacionais tradicionais limitam o número de compostos que podem ser testados anualmente. Além disso, a computação quântica pode aumentar a diversidade de compostos avaliados, tendo o potencial de levar à descoberta de fármacos mais inovadores e eficazes. No entanto, é importante ressaltar que a tecnologia ainda enfrenta desafios, como a escalabilidade dos qubits e a correção de erros, que precisam ser superados para sua aplicação prática em larga escala, informa Cao et al. (2019).

3.5.2 Aceleração do Desenvolvimento Farmacêutico e Redução de Custos

O desenvolvimento de um novo medicamento é um processo notoriamente longo e dispendioso, frequentemente exigindo mais de uma década e investimentos na ordem de bilhões de dólares. A computação quântica oferece o potencial de reduzir significativamente esses tempos e custos ao otimizar diversas fases do desenvolvimento farmacêutico. Na fase de descoberta, por exemplo, simulações quânticas podem prever com maior precisão o comportamento de moléculas em organismos, diminuindo a dependência de testes experimentais custosos e demorados. Na fase de desenvolvimento clínico, a análise quântica de dados pode aprimorar o design de ensaios clínicos, aumentando a eficiência e as taxas de aprovação de acordo com McKinsey & Company (2021).

Estudos sugerem que a integração da computação quântica na indústria farmacêutica, pode gerar benefícios financeiros substanciais. Projeções indicam que o mercado de computação quântica em saúde, pode alcançar quase US\$ 700 bilhões até 2035, refletindo a redução de custos e a capacidade de desenvolver medicamentos mais rapidamente, para atender às crescentes demandas por inovação na saúde. Além disso, benefícios de curto prazo já estão sendo observados em áreas como fabricação e cadeia de suprimentos, onde a otimização quântica pode melhorar a eficiência operacional. Esses avanços sublinham a importância estratégica da computação quântica para o setor farmacêutico, embora sua adoção em larga escala ainda dependa de avanços tecnológicos, segundo McKinsey & Company (2021).

3.5.3 Simulação de Interações Moleculares Complexas

A capacidade da computação quântica de simular interações moleculares complexas é um de seus aspectos mais promissores para a descoberta de medicamentos. Sistemas que envolvem íons metálicos, reações enzimáticas ou ligações covalentes, são particularmente desafiadores para os métodos de simulação clássicos, devido à sua natureza quântica. A mecânica quântica governa o comportamento das partículas subatômicas, sendo essencial para compreender como as moléculas interagem em nível atômico. No entanto, simular esses sistemas com computadores clássicos exige um poder computacional que cresce exponencialmente com o tamanho do sistema, tornando o processo ineficiente.

A computação quântica, ao operar segundo os princípios da mecânica quântica, pode realizar essas simulações de forma mais eficiente e precisa. Pesquisas recentes destacam seu uso na modelagem de sistemas bioquímicos complexos, como a ligação de ligantes a proteínas ou a dinâmica de reações enzimáticas, fornecendo insights valiosos para o design de fármacos,

de acordo com Hassanzadeh & Hunter (2020). Essas simulações permitem prever a estrutura e as propriedades de moléculas com maior fidelidade, potencialmente reduzindo os efeitos colaterais e aumentando a eficácia dos medicamentos desenvolvidos. Apesar de promissora, a aplicação prática dessa capacidade ainda está limitada pela imaturidade da tecnologia quântica.

3.5.4 Colaboração entre Setores para Maximizar o Impacto

O sucesso da computação quântica na descoberta de medicamentos depende significativamente da colaboração entre empresas farmacêuticas, startups de tecnologia quântica e instituições acadêmicas. Essa parceria é essencial para superar os desafios técnicos, como a escalabilidade de hardware quântico, e para desenvolver aplicações específicas para o setor farmacêutico. Iniciativas recentes, como colaborações entre grandes empresas e fornecedores de tecnologia quântica, demonstram o crescente interesse em integrar essa tecnologia à pesquisa de medicamentos, como informa Wogan (2020).

A institucionalização da computação quântica na pesquisa farmacêutica é um processo em andamento, comparável à adoção do design assistido por computador (CADD) nos anos 1990 e da inteligência artificial nos anos 2010. Esse processo requer alinhamento entre pesquisadores e gestores, alocação de recursos e identificação de problemas específicos que a computação quântica pode resolver. A colaboração interdisciplinar é crucial para traduzir avanços tecnológicos em benefícios práticos, como o desenvolvimento de novos tratamentos e a melhoria da eficiência na indústria farmacêutica de acordo com Wogan (2020).

3.5.5 Aplicações Específicas: Combate à Resistência a Antibióticos

A resistência a antibióticos representa uma das maiores ameaças à saúde global, com estimativas sugerindo que, se não for enfrentada, poderá causar mais mortes do que o câncer até 2050. A descoberta de novos antibióticos é essencial, mas o processo é lento e caro, com poucos novos compostos aprovados nas últimas décadas. A computação quântica oferece uma ferramenta promissora para acelerar esse processo, melhorando a eficiência das simulações computacionais usadas na identificação de compostos promissores, segundo Alves et al. (2022).

Algoritmos quânticos podem simular interações entre antibióticos potenciais e bactérias resistentes, permitindo a identificação de moléculas eficazes em menos tempo. Essa capacidade é particularmente relevante para patógenos da classe ESKAPE, responsáveis por muitas infecções hospitalares resistentes. Além disso, a computação quântica pode ajudar a identificar

padrões e mecanismos de resistência que são difíceis de detectar com métodos clássicos, contribuindo para o desenvolvimento de estratégias mais eficazes contra a resistência antimicrobiana de acordo com Alves et al. (2022).

3.5.6 Geração de Novos Inibidores para Câncer via Modelos Híbridos

A geração de novos inibidores para câncer é um desafio contínuo na pesquisa oncológica. Modelos híbridos que combinam técnicas de aprendizado de máquina quântico têm demonstrado potencial na criação de moléculas com alta especificidade para alvos como a proteína KRAS, frequentemente mutada em cânceres humanos. Esses modelos aproveitam a capacidade quântica de processar vastas combinações moleculares para propor compostos que seriam difíceis de identificar com métodos clássicos. A proteína KRAS é um alvo difícil devido à sua estrutura complexa e à falta de sítios de ligação bem definidos, mas os modelos quânticos híbridos podem explorar espaços químicos mais amplos, aumentando as chances de encontrar compostos eficazes, como demonstra Hoffmann et al. (2025).

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O presente trabalho analisou como a computação quântica pode contribuir para o desenvolvimento da indústria farmacêutica, especialmente na descoberta de novos medicamentos. Foi possível observar que, mesmo sendo uma tecnologia ainda em fase inicial, já existem aplicações práticas que demonstram seu potencial, como as simulações de interações moleculares e a triagem de compostos.

Apesar dos avanços, ainda existem desafios importantes que precisam ser superados, principalmente relacionados às limitações de hardware, como a baixa quantidade de qubits estáveis, além de dificuldades com correção de erros e escalabilidade. Esses fatores dificultam a adoção da computação quântica em larga escala e reforçam a necessidade de investimentos em pesquisa, inovação e desenvolvimento tecnológico. Outro ponto importante é a colaboração entre empresas, universidades e startups, que será fundamental para acelerar o desenvolvimento de soluções mais robustas e práticas para o setor farmacêutico.

Além disso, ao considerar as tendências para o futuro, fica evidente que novas tecnologias estão mudando a maneira como vivemos e trabalhamos, trazendo tanto desafios quanto oportunidades. Neste cenário, a computação quântica tem papel estratégico, e seu uso em áreas como saúde e indústria farmacêutica pode trazer ganhos importantes.

Por isso, reforça-se a importância de continuar investindo em pesquisas voltadas a algoritmos híbridos, que combinam métodos clássicos e quânticos, e em projetos que busquem aplicar essas tecnologias em problemas atuais, como a resistência antimicrobiana e o desenvolvimento de terapias mais personalizadas.

Em resumo, a computação quântica tem potencial para transformar a indústria farmacêutica, contribuindo para processos mais rápidos, eficientes e econômicos, com impactos positivos para a saúde global. No entanto, para que isso se concretize, será preciso superar os desafios técnicos atuais e fortalecer as parcerias entre os setores envolvidos.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALVES, V. M. et al. **Using computers to ESKAPE the antibiotic resistance crisis.** Drug Discovery Today, v. 27, n. 1, p. 99-109, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.drudis.2021.09.013>>. Acessado em: 19 de abril de 2025.

BIOBOOT. **Biomolecular Simulation.** 2012. Disponível em: <https://bioboot.github.io/bioinf525_w17/class-material/Biomolecular_Simulation.pdf> Acessado em: 27 de abril de 2025.

CAO, Y. et al. **Quantum computing for near-term applications in generative chemistry and drug discovery.** Drug Discovery Today, v. 28, n. 8, 103664, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.drudis.2023.103664>>. Acessado em: 19 de abril de 2025.

CAO, Yudong et al. **Quantum Chemistry in the Age of Quantum Computing.** Chemical Reviews, v. 119. N. 19, 10856-10915, 2019. <<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00803>> Acessado em: 27 de abril 2025.

CHEN, Zhihao et al. **Quantum-machine-assisted drug discovery: survey and perspective.** arXiv preprint arXiv:2408.13479, 2024. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2408.13479>> Acessado em: 27 de abril de 2025.

FENG, Yexin; et. al. **Molecular dynamics simulations of wild-type and drug-resistant HIV-1 protease: insight into the mechanism of drug resistance.** Scientific Reports, v. 5, 10517, 2015. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/srep10517>> Acessado em: 27 de abril de 2025.

HASSAN, Ali. **Quantum computing and AI in healthcare: Accelerating complex biological simulations, genomic data processing, and drug discovery innovations.** World Journal of Advanced Research and Reviews, v. 20(02), 1466-1484, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.30574/wjarr.2023.20.2.2325>> Acessado em: 27 de abril de 2025.

HASSANZADEH, P.; HUNTER, J. **User-Friendly Quantum Mechanics: Applications for Drug Discovery.** In: HIRST, J. D. (Ed.). Computational Drug Discovery and Design. New York: Humana, 2020. p. 225-241. (Methods in Molecular Biology, v. 2114). Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-1-0716-0282-9_15>. Acessado em: 19 de abril de 2025.

KANDALA, A. et al. **Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets**. Nature, v. 549, p. 242-246, 2017. Disponível em: <Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets | Nature> Acessado em: 27 de abril de 2025.

KUMAN, G; et. al. **Recent Advances in Quantum Computing for Drug Discovery and Development**. IEEE Access, vol. 12, pp. 64491-64509, 2024. Disponível em: <<https://ieeexplore.ieee.org/document/10466774>> Acessado em: 28 de abril de 2025.

MCARDLE, Sam et al. **Quantum computational chemistry**. Reviews of Modern Physics, v. 92, n. 1, 015003, 2020. Disponível em: <<https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.92.015003>> Acessado em: 28 de abril de 2025.

MCKINSEY & COMPANY. **Pharma's digital Rx: Quantum computing in drug research and development**. 2021. Disponível em: <<https://www.mckinsey.com/industries/life-sciences/our-insights/pharmas-digital-rx-quantum-computing-in-drug-research-and-development>> Acesso em: 19 de abril de 2025.

OLIVEIRA, A. N. et al. **Algoritmos quânticos com IBMQ Experience: Algoritmo de Deutsch-Jozsa**. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 44, 2021. Disponível em: https://www.academia.edu/102016876/Algoritmos_qu%C3%A2nticos_com_IBMQ_Experience_Algoritmo_de_Deutsch_Jozsa . Acessado em: 10 de abril de 2025.

PAUL, S. M. et al. **How to improve R&D productivity: the pharmaceutical industry's grand challenge**. Nature Reviews Drug Discovery, v. 9, n. 3, p. 203-214, 2010. Disponível em: <DOI: 10.1038/nrd3078> Acessado em: 27 de abril de 2025..

PORTO, C. M. et al. **Computação quântica em química: Aplicações práticas e desafios**. Química Nova, v. 48, n. 2, p. 6-7, 2025. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20250072>> Acessado em: 10 de abril de 2025.

RIEFFEL, Eleanor G.; POLAK, Wolfgang H. **Quantum Computing: A Gentle Introduction**, 1ª ed, Cambridge: MIT Press, 2011.

TEMME, K. et al. **Error mitigation for short-depth quantum circuits.** *Physical Review Letters*, v. 119, n. 18, p. 180509, 2017. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1705.04660>> Acessado em: 13 de abril de 2025.

UK RESEARCH AND INNOVATION (UKRI). **Quantum Technologies for Health and Industry.** Disponível em: <https://www.ukri.org> . Acesso em: 13 de abril de 2025.

WANG, Nick X.; ZHENG, Jie J. **Computational analysis of drug resistance mutations in influenza virus H5N1 neuraminidase.** *Protein Science*, v. 18, n. 4, p. 707–715, 2009. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/pro.77>> Acessado em: 27 de abril 2025.

WOGAN, T. **Let's talk about quantum computing in drug discovery.** *Chemical & Engineering News*, v. 98, n. 35, 2020. Disponível em: <https://cen.acs.org/business/informatics/Lets-talk-quantum-computing-drug/98/i35>. Acessado em: 19 de abril de 2025.