

[Centro de Información de COVID \(CIC\): Charlas científicas de relámpago](#)

Transcripción de una presentación de Wai-Yim Ching (Universidad de Missouri- Kansas City), 13 de enero de 2021



Título: [Refinamiento estructural y unión intramolecular en la proteína SARS-CoV-2](#)

[Perfil de Wai-Yim Ching en la base de datos del CIC](#)

Subvención de La Fundación Nacional de Ciencias (NSF, por sus siglas en inglés) #: 2028803

[Grabación de YouTube con diapositivas](#)

[Información del seminario web del CIC de enero 2021](#)

Editora de la Transcripción: Rhyley Vaughan

Editora de la Traducción: Isabella Graham Martínez

Transcripción

Wai-Yim Ching:

Diapositiva 1

Soy Wai-Yim Ching de la Universidad de Missouri-Kansas City, y soy un teórico, un teórico computacional, y así mi resultado sería muy condensado. Creo que si alguien está interesado, envíame un correo electrónico. Responderé a todas sus preguntas. Tenemos un equipo muy pequeño que consiste en el Dr. Adhikari y dos estudiantes de posgrado muy capaces- Ph.D. estudiantes, el Sr. Jawad y el Sr. San, y un estudiante de pregrado, la Sra. Namiq. Contamos con el apoyo de un proyecto NSF RAPID que se encuentra en la sección de Teoría de Materia y Materiales Condensados de la NSF. Puesto que somos científicos computacionales, tenemos que confiar una cantidad enorme en recursos computacionales. Esto fue proporcionado por el Departamento de Centro de Supercomputadora de Energía y se llama el NERSC. Quería empezar la siguiente diapositiva.

Diapositiva 2

Diré algo sobre los antecedentes y por qué queremos estudiar la proteína de pico, porque esta proteína se une al receptor de la célula huésped. La mayoría de la gente sabe lo que está pasando allí. Juega un papel crítico en la infección. La estructura y las propiedades de esta unión interna no se entienden completamente. Así que tenemos que usar las instalaciones de supercomputadoras de clase mundial

para hacer un cálculo inicial basado en la teoría funcional de la densidad para este gran sistema molecular. Este tipo de cálculo tiene muchas capas porque consume muchos recursos y es muy desafiante. Nuestro objetivo es tener un entendimiento fundamental basado en métodos de mecánica cuántica y la red de aminoácidos inter-atómicos e intra-atómicos, incluyendo el enlace de hidrógeno. También, por supuesto, el enfoque principal es entrenar a la próxima generación de científicos en esta área tan importante de la ciencia de los materiales, porque me formé como investigador de materiales y trabajo en metafísica condensada en química y biofísica. Los biomateriales son muy importantes.

Diapositiva 3

Quiero informar primero algunos de los últimos logros. Tenemos la optimización estructural de siete dominios de estructura básica en la proteína de la espiga, que está aquí. Estas son las tres cadenas. La cadena A tiene siete dominios diferentes, y cada uno de ellos consta de varios miles de átomos. Tenemos que hacer el cálculo de todos estos siete dominios juntos e investigar su enlace covalente e hidrógeno y las distribuciones de carga parcial. También desarrollamos un parámetro clave llamado pares de enlaces de aminoácidos, que nos permitiría hacer interacciones de aminoácidos tridimensionales. Hasta ahora, hemos publicado tres artículos. Si alguno de ustedes está interesado, por favor envíenme un correo electrónico.

Diapositiva 4

Actualmente, el proyecto en curso que hicimos es el modelado de interfaces, en el que combinamos la dinámica molecular del cálculo de DFT, y esto es aún más difícil. También tratamos de calcular la rigidez de cada uno de sus dominios spike. La rigidez es muy importante en cualquier sistema biológico cuando están bajo cambio de temperatura o estrés. También estamos trabajando actualmente en el modelado de mutaciones, que es el D614G. Si A está en las noticias, esas son las variantes de diferentes coronavirus, y está en las noticias casi todos los días. También queremos mejorar los métodos computacionales y los códigos utilizados para la generación de datos de gran tamaño. Esta es una figura sobre el modelo de mutación con moléculas de agua incluidas, y este es el resultado preliminar sobre la rigidez. Actualmente tenemos tres manuscritos en preparación. El trabajo nos lleva al menos dos o tres meses. Esto se reduce a una de las últimas diapositivas.

Diapositiva 5

Nuestro proyecto finalizará el 31 de mayo, que es solo un proyecto de un año para el NSF RAPID. Antes de terminar el proyecto, ampliaremos nuestro modelado computacional al diseño de medicamentos de algunos modelos seleccionados mediante la adición de péptidos muy cortos. Este es un ejemplo de dos modelos que empezamos a modelar. Se llama LCB1 y LCB3. Estos son los dos péptidos más cortos que se insertan en la interfaz. También trabajamos en el modelado de mutaciones extensivas y en el análisis de los siguientes casos. Además del que estamos trabajando actualmente, hay muchas variantes nuevas, según el informe B.1.1.7 de COG-UK. Estos son los cuatro ejemplos, y hay muchos más. El objetivo más largo es extender el modelado computacional para cubrir sistemas biomoleculares mucho más grandes. A pesar de que estamos haciendo nuestro cálculo inicial, y en este momento es uno de los cálculos más

grandes que se pueden imaginar, somos más ambiciosos. Queremos ampliarlo a sistemas aún más grandes. Por otra parte, somos muy ambiciosos. Queremos abogar por el uso de modelos computacionales a gran escala para sistemas biomoleculares que puedan competir o incluso complementar las técnicas experimentales en precisión y a un costo mucho menor. Muchas gracias a todos. Ese es el final de mi presentación.