

## AQuaRef: machine learning accelerated quantum refinement of protein structures

### Autorzy

Roman Zubatyuk  
Małgorzata Biczysko  
Kavindri Ranasinghe  
Nigel W. Moriarty  
Hatice Gokcan  
Holger Kruse  
Billy K. Poon  
Paul D. Adams  
Mark P. Waller  
Adrian E. Roitberg  
Olexandr Isayev  
Pavel V. Afonine

### Rok wydania

2025

### Czasopismo

Nature Communications

### Numer woluminu

16

### Strony

9224/1-9224/12

### DOI

10.1038/s41467-025-64313-1

### Kolekcja

Naukowa

### Streszczenie

Cryo-EM and X-ray crystallography provide crucial experimental data for obtaining atomic-detail models of biomacromolecules. Refining these models relies on library-based stereochemical data, which, in addition to being limited to known chemical entities, do not include meaningful noncovalent interactions. Quantum mechanical (QM) calculations could alleviate these issues but are too expensive for large molecules. Here we present a novel AI-enabled Quantum Refinement (AQuaRef) based on AIMNet2 machine learned interatomic potential (MLIP) mimicking QM at substantially lower computational costs. By refining 41 cryo-EM and 30 X-ray structures, we show that this approach yields atomic models with superior geometric quality compared to standard techniques, while maintaining an equal or better fit to experimental data. Notably, AQuaRef aids in determining proton positions, as illustrated in the challenging case of short hydrogen bonds in the parkinsonism-associated human protein DJ-1 and its bacterial homolog YajL.

### Słowa kluczowe

Cryoelectron microscopy, Machine learning, Proteins

### Licencja otwartego dostępu

### CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1038/s41467-025-64313-1>

Plik został wygenerowany dnia 2026-04-24 00:15:57

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/ilxbLuG>.