



DESIGN DE DROGAS DE NOVO E INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL CONTRA A TUBERCULOSE: INIBIDORES DA ENZIMA INHA

Pedro Paulino João ¹
Maryan Angelica Seixas Ayrán ²
Joseano João André Rodrigues ³
Pitra Pedro José Lopes ⁴
Aluisio Marques Da Fonseca ⁵

RESUMO

A tuberculose, provocada por *Mycobacterium tuberculosis*, continua sendo um problema crítico de saúde pública, reforçando a necessidade do desenvolvimento de novos fármacos contra alvos moleculares validados, como a enzima InhA (enoil-ACP redutase). Este estudo teve como objetivo a triagem e avaliação in silico de moléculas candidatas com potencial inibitório para essa proteína. A triagem virtual foi conduzida com o MolAICal, gerando compostos inovadores a partir de estratégias de design molecular e inteligência artificial. As estruturas obtidas foram analisadas por meio de docking molecular, empregando o software AutoDock, com critérios rigorosos de seleção, incluindo energia mínima de ligação, presença de íons metálicos, cavidades acessíveis a solventes e desvio RMS inferior a 2 Å. Foram elaborados gráficos estatísticos de pontuação para a comparação entre os principais ligantes identificados. Adicionalmente, foram realizadas análises conformacionais das estruturas proteína-ligante, visando compreender as interações estabilizadoras no sítio ativo e identificar compostos com maior potencial inibitório. Os resultados obtidos consolidam uma etapa essencial da prospecção computacional de novos candidatos a fármacos contra a tuberculose e fornecem subsídios para estudos futuros de validação experimental.

Agradecimentos:

Agradeço à Unilab pelo financiamento da pesquisa intitulada “Desbravando novos horizontes na batalha contra a Tuberculose: Design de drogas De Novo e inteligência artificial na busca por inibidores da enzima InhA de *Mycobacterium tuberculosis*”, executada entre 01/09/2024 e 30/09/2025, por meio do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (Pibic) e Tecnológica (Pibiti).

Palavras-chave: tuberculose; InhA; docking molecular.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, ICEN, Discente, pedropaulinojo434@gmail.com¹

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, ICEN, Discente, maryan@aluno.unilab.edu.br²

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, ICEN, Discente, jjoseano58@gmail.com³

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, ICEN, Discente, pitralopes1996@gmail.com⁴

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, ICEN, Docente, aluisiomf@unilab.edu.br⁵