

A IA que amamos! De anos a apenas meses para descobrir uma molécula

Data: 2025-10-04 19:29:24

Autor: Inteligência Against Invaders

Redazione RHC:4 Outubro 2025 21:29

Os antibióticos para a doença inflamatória intestinal podem ser uma faca de dois gumes. Enquanto suprimem a inflamação, eles também matam bactérias benéficas, não apenas as prejudiciais. Isso geralmente piora os sintomas. Nessa situação, os medicamentos genéricos se mostram uma ferramenta menos eficaz.

Cientistas do Instituto de Tecnologia de Massachusetts (MIT) e da Universidade McMaster [denunciaram](#) a descoberta de um **nova molécula chamada enterololin**. Ele funciona seletivamente, suprimindo as bactérias associadas aos surtos da doença de Crohn (DII), deixando o resto do microbioma intestinal praticamente inalterado.

Para entender seu mecanismo de ação, os pesquisadores *utilizou o modelo de IA generativa DiffDock*, o que reduziu o tempo da pesquisa para a análise para alguns meses, em vez dos anos habituais.

Em experimentos com camundongos, a droga supriu seletivamente *Escherichia coli*, o que aumenta a inflamação, e ajudou os animais a se recuperarem mais rapidamente. Além disso, o microbioma permaneceu significativamente mais saudável do que o tratamento com o antibiótico padrão vancomicina.

DiffDock previu que a molécula se liga ao **LoICDE** complexo proteico, responsável por *Transporte de lipoproteínas em bactérias*. Essa pista permitiu que os pesquisadores testassem sua hipótese em laboratório: eles criaram cepas de *E. coli* resistentes à enterolina, conduziram sequenciamento de RNA e usaram CRISPR para confirmar o mecanismo de ação.

Todos os experimentos *demonstraram que a droga efetivamente interrompe as vias associadas ao transporte de lipoproteínas, conforme previsto pela IA*.

Os autores observam que *Tradicionalmente, a pesquisa sobre os mecanismos de ação de novos antibióticos leva até dois anos e custa milhões de dólares*. Neste caso, **a inteligência artificial reduziu o tempo para seis meses**, reduzindo significativamente os custos.

Stoked Bio, fundada por um dos autores do estudo, *está atualmente desenvolvendo a enterolilina e preparando-a para testes em humanos*. Também estão em andamento pesquisas sobre derivados da molécula contra outros patógenos perigosos, incluindo ***Klebsiella pneumoniae***.

A promessa de antibióticos direcionados é particularmente importante para pacientes com doença

de Crohn e outras doenças inflamatórias intestinais: *Novos medicamentos podem reduzir os sintomas sem alterar o microbioma*. Em uma escala maior, **Tais desenvolvimentos podem fornecer uma resposta à crescente ameaça de resistência bacteriana aos antibióticos existentes.**

Os cientistas enfatizam que não é apenas uma única molécula que importa. A abordagem em si é crucial: *Uma combinação de inteligência artificial e métodos laboratoriais permite o esclarecimento rápido do funcionamento de medicamentos em potencial.* Isso pode transformar o processo de descoberta de novos medicamentos para muitas doenças.

Os pesquisadores publicaram os dados de sequenciamento em repositórios públicos e **tornou o código DiffDock-L de código aberto** no GitHub.

Redação

A equipe editorial da Red Hot Cyber é composta por um grupo de indivíduos e fontes anônimas que colaboram ativamente para fornecer informações e notícias antecipadas sobre segurança cibernética e computação em geral.

[Lista degli articoli](#)