

OS IMPACTOS DO ALPHAFOLD E DA INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NA DESCOBERTA DE MEDICAMENTOS: PERSPECTIVAS E DESAFIOS

Resumo

Objetivos: Identificar e analisar os estudos que abordam as contribuições do AlphaFold, modelo de Inteligência Artificial (IA) voltado para a predição estrutural de proteínas, e sua potencialidade para os avanços no desenvolvimento de novos medicamentos. **Metodologia:** Trata-se de uma revisão de escopo estruturada segundo o framework PCC (População, Conceito e Contexto), conduzida na base PubMed e abrangendo publicações entre 2020 e 2025. Foram utilizados os descritores “AlphaFold”, “Drug Discovery” e “Artificial Intelligence”, combinados por operadores booleanos (AND, OR). Incluíram-se artigos que aplicaram o AlphaFold à predição de estruturas proteicas com impacto farmacológico, publicados em inglês ou português e com texto completo disponível. Excluíram-se cartas, relatos de caso e publicações sem dados empíricos ou teóricos relevantes. Foram identificados 64 artigos na busca inicial, dos quais 11 atenderam aos critérios de elegibilidade e foram analisados qualitativamente com base em fichas padronizadas, considerando objetivo, metodologia, resultados, limitações e desafios relatados pelos autores. **Resultados:** Os estudos revisados destacam o AlphaFold como avanço expressivo na predição de estruturas proteicas, pela capacidade de gerar modelos tridimensionais de alta precisão e prever o proteoma humano, possibilitando compreensão ampliada de mecanismos moleculares relevantes à farmacologia. Aplicações incluem receptores acoplados a proteínas G e outras proteínas-alvo. Entre as limitações observadas estão a dificuldade na modelagem de proteínas dinâmicas ou desordenadas e a representatividade restrita dos dados de treinamento, que afetam a generalização dos modelos. Aponta-se ainda a necessidade de validação experimental para assegurar aplicabilidade clínica e farmacêutica. **Conclusões:** O AlphaFold constitui ferramenta de grande impacto na bioinformática e na descoberta de fármacos, ao permitir mapeamento estrutural preciso e racionalizar o processo de desenvolvimento de medicamentos. Contudo, seu uso pleno depende de aprimoramentos em bases de dados, modelagem dinâmica e integração entre predições

computacionais e validação experimental. Destaca-se como limitação desta revisão o uso exclusivo da base PubMed e o recorte temporal de 2020 a 2025, fatores que restringem o alcance dos resultados. Em perspectiva, o uso do AlphaFold apresenta potencial inovador para acelerar as etapas de descoberta, validação e desenvolvimento biofarmacêutico, fortalecendo a interface entre biologia estrutural, bioinformática e farmacologia computacional em benefício da saúde pública.

Palavras-chave: AlphaFold; Bioinformática; Descoberta de Medicamentos; Inteligência Artificial.