

**Relato de caso:** Mulher cisgênero, 28 anos, com epilepsia controlada, sem outras comorbidades, trabalha como vendedora em praça pública, internada em 04/2024 em unidade hospitalar externa devido à lesão pustular fronto-temporal direita, evolução de 2 dias, que progrediu com sinais de infecção secundária e celulite periorbitária. Esta regrediu completamente com antibioticoterapia, porém houve progressão da lesão primária associada a vesículas em dedos e região perianal. Aventada hipótese de mpox, foi transferida para este centro, onde se observou lesão vegetante e crostosa em fronte, duas lesões vesiculares em região metacarpofalangeana e uma em região interfalangeana distal, além de lesão em linha média torácica e outra em região perianal, ambas de centro ulcerado e indolores. A paciente negou contato com pessoas com quadro semelhante e exposição sexual nos últimos 3 anos. O rastreamento infeccioso foi negativo para infecções fúngicas e ISTs. PCR MPXV foi detectável em swabs coletados em todas as lesões e PCR para varicela zoster foi não detectável. Recebeu suporte clínico e orientações de isolamento domiciliar e encaminhada para seguimento ambulatorial.

**Comentários:** O relato aponta diagnóstico de mpox em mulher cis, com lesão inicial extragenital, sem contato sexual e provável aquisição comunitária (já que trabalha em praça pública). Desde 10/2023, o Rio de Janeiro apresenta transmissão sustentada de mpox, e profissionais de saúde precisam estar atentos para evoluções atípicas e oligossintomáticas, possibilitando identificação e diagnóstico adequados. Medidas de prevenção, como campanhas de vacinação, precisam ser implementadas sobretudo para as populações mais vulnerabilizadas.

**Palavras-chave:** Mpox, Transmissão, Comunitária.

**Conflitos de interesse:** Informo que não possuo conflitos de interesses relacionados a este trabalho.

**Ética e financiamentos:** Declarações de interesse: nenhuma.

**Declarações de interesse:** Nenhum.

<https://doi.org/10.1016/j.bjid.2024.104451>

## TUBERCULOSE E OUTRAS MICOBACTERIOSES

### MODELAGEM IN SILICO DAS PROTEÍNAS RV0678 E MMPL5 PARA ANÁLISE DOS MECANISMOS DE RESISTÊNCIA À BEDAQUILINA EM MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS

Danna Karen Corrêa dos Santos<sup>a</sup>,  
Davi Josué Marcon<sup>a</sup>, Abhinav Sharma<sup>b</sup>,  
Alex Brito Souza<sup>a</sup>, Ana Judith Pires Garcia<sup>a</sup>,  
Emilyn Costa Conceição<sup>b</sup>,  
Karla Valéria Batista Lima<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Instituto Evandro Chagas - Pará (IEC-PA), Ananindeua, PA, Brasil

<sup>b</sup> DST/NRF Centre of Excellence for Biomedical Tuberculosis Research, South African Medical Research Council (SAMRC) Centre for Tuberculosis Research, Division of Molecular Biology and Human Genetics, Faculty of Medicine and Health Sciences, Stellenbosch University, Cape Town, South Africa

**Introdução/objetivo:** O surgimento de estirpes na tuberculose multirresistente e extensivamente resistente agravou os desafios terapêuticos e a resistência à drogas recém introduzidas, como a bedaquilina (BDQ). Assim, a análise estrutural in silico oferece uma abordagem promissora para identificar mutações que conferem resistência à BDQ. O presente estudo buscou analisar o impacto de polimorfismos na estrutura terciária das proteínas dos genes Rv0678 e mmpl5 em *Mycobacterium tuberculosis* (MTB) associadas à resistência à BDQ.

**Métodos:** Foram utilizados dados de sequenciamento do Consórcio CRYPTIC para 3 cepas de MTB resistentes à BDQ. As leituras foram processadas com Trimmomatic, FastQC e MultiQC. O alinhamento e a chamada de polimorfismos de nucleotídeo único utilizaram BWA/SAMtools e MAGMA. As sequências foram traduzidas com EMBOSS Transeq. A modelagem e dinâmica molecular das variantes foram realizadas com SWISS-MODEL e subworkflow AlphaFold2 por meio do servidor web TBvar3D.

**Resultados:** As proteínas analisadas obtiveram score global QMEANDisCo > 0.8 e estatísticas de Ramachandran > 90%, indicando confiança muito alta na predição. Em uma cepa, foi detectada variante de resistência em Rv0678 que apresentou a substituição de Ser por Arg na posição 63 e score PROVEAN (sP) de -4.98, o que está relacionado à mutação com perda de função em Rv0678, incidindo no aumento da concentração inibitória mínima da BDQ. Nas outras duas cepas, as mutações ocorreram em mmpl5, um componente de bomba de efluxo relacionada à exportação de sideróforos pela bactéria, sendo que em uma delas, foram encontradas duas variantes, com a substituição de Gly por Ser na posição 246 com sP de 1.33 e predição não associada à resistência, porém, a substituição de Asp por Asn na posição 767 revelou mutação de efeito deletério, com sP de -4.90. Já na outra cepa, houve substituição Ala por Thr na posição 359 com sP neutro de 1.14, e novamente, Asp por Asn na posição 767 com sP de -4.90.

**Conclusão:** A análise in silico identifica mutações críticas como as com sP ≤ -2.282 associadas à resistência à BDQ em MTB. As variantes de substituição detectadas nas cepas analisadas demonstraram impacto relevante na função proteica e resistência à droga. Tais achados destacam o valor das ferramentas de modelagem molecular com alta confiabilidade para prever e compreender mecanismos de resistência, o que em última análise fornecerá uma base sólida para novos alvos e estratégias terapêuticas.

**Palavras-chave:** Tuberculose, Modelagem Computacional, Resistência a Drogas.

**Conflitos de interesse:** Não houve conflitos de interesse.

**Ética e financiamentos:** Financiamentos: IEC/SVSA/MS, CNPq e CAPES. Bolsa PIBIC/IEC, chamada 01/2023; Bolsa CAPES, chamada PPGbPA 120/2022; Bolsa DTI-C/CNPq, chamada 29/2023; Bolsa DTI-A/CNPq, chamada 29/2023; Bolsa Pq/CNPq, chamada 09/2022.

<https://doi.org/10.1016/j.bjid.2024.104452>