



**XXXIII SIC** SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2021
<b>Local</b>	Virtual
<b>Título</b>	Análise de agrotóxicos mediante (Q)SAR - predições in silico
<b>Autor</b>	LETICIA ALVES JACHSTET
<b>Orientador</b>	CARLA SIRTORI

## **Análise de agrotóxicos mediante (Q)SAR - predições *in silico***

Letícia Alves Jachstet, Carla Sirtori

Instituto de Química-UFRGS, Av. Bento Gonçalves, 9500, Porto Alegre-RS

Em âmbito nacional, o uso de agrotóxicos é muito relevante devido ao seu uso intensivo, principalmente por estar inserido num contexto de diminuição na regulação e controle sobre o uso de tais insumos. Tal fato gera grande preocupação quanto à dispersão destes contaminantes nas diferentes matrizes ambientais (água, ar, solo e sedimento). Por isso, é importante realizar a análise de risco que estes agrotóxicos podem trazer aos diferentes compartimentos ambientais. Para tal, há uma alternativa que quando comparada aos testes experimentais de toxicidade, é mais rápida, econômica e não faz uso de animais: (Q)SAR - “relação quantitativa estrutura/atividade”. Esta é uma ferramenta experimental *in silico* muito útil para previsão de persistência, biodegradabilidade e toxicidade de compostos. (Q)SAR é um modelo estatístico que relaciona um conjunto de descritores estruturais de um composto químico à sua atividade biológica. Eles são baseados no conceito de que a atividade de uma substância é uma função de sua estrutura e pode ser determinada com base em relações matemáticas desenvolvidas a partir de compostos semelhantes, ou seja, com estruturas químicas similares. Então, o intuito deste trabalho foi avaliar o risco ambiental de agrotóxicos identificados em águas superficiais mediante o uso de ferramentas *in silico* através dos softwares livres QSAR Toolbox, T.E.S.T, VEGA e EPI Suite™. Assim, foi necessário converter as estruturas químicas dos pesticidas estudados em SMILES e número CAS, utilizando a base de dados do PubChem, para na sequência serem submetidos a predições *in silico* para avaliação de persistência, toxicidade e mutagenicidade sob diferentes modelos. Portanto, foi possível concluir que os compostos avaliados de maior preocupação foram fipronil, promecarb e piretrina 1, visto que eles indicaram apresentar maior persistência, toxicidade e mutagenicidade entre todos os analitos estudados.