



Evento	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2022
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Análise de micropoluentes encontrados em água superficial da região noroeste do Rio Grande do Sul mediante (Q)SAR
Autor	LETICIA ALVES JACHSTET
Orientador	CARLA SIRTORI

Análise de micropoluentes encontrados em água superficial da região noroeste do Rio Grande do Sul mediante (Q)SAR

Letícia Alves Jachstet, Carla Sirtori

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

Dado que a água é um recurso fundamental para a vida, monitorar a sua qualidade é essencial, em virtude de estudos revelarem a presença de diferentes classes de microcontaminantes em matrizes aquáticas. Tais contaminantes são provenientes de atividades agrícolas, resíduos industriais, efluentes domésticos e efluentes hospitalares. Por conta de suas estruturas químicas e níveis de concentração que afetam sistemas biológicos, torna-se perceptível a importância do monitoramento destas substâncias. 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* 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, este trabalho tem como intuito avaliar o risco ambiental de micropoluentes identificados em águas superficiais mediante o uso de ferramentas *in silico* através dos softwares livres QSAR Toolbox, VEGA, Prometheus 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 previsões *in silico* afim de avaliar a persistência, toxicidade e mutagenicidade sob diferentes modelos. Portanto, ao analisar os resultados obtidos, foi possível apontar compostos de maior preocupação, visto que indicaram maior persistência, toxicidade e mutagenicidade entre todos os analitos estudados. Dentre eles, oito são fármacos: o isoniazida, nimesulida, cortisol, estradiol, metilprednisolona, fluconazol, 19-nortestosterona e cortisona; e dois agrotóxicos: naftalenoacetamida e carbendazim.