

ANEXO V – FORMULÁRIO INDICADORES DE IMPACTOS



UNIVERSIDADE FEDERAL DE LAVRAS
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO

Autor(a): **Antônio Pedro Lemos de Mesquita**

Orientador(a): **Teodorico de Castro Ramalho**

Programa de Pós-Graduação em: **Multicêntrico em Química de Minas Gerais**

Título: **THERMODYNAMIC POTENTIAL CALCULATIONS VIA CLASSICAL MOLECULAR DYNAMICS: A VIRTUAL SCREENING STRATEGY FOR IDENTIFYING mGluR7/8 AND 5-HT_{1A} AGONISTS FOR AUTISM SPECTRUM DISORDER**

Tipos de Impactos:

(X) sociais (X) tecnológicos () econômicos () culturais () outros: _____

Áreas Temáticas da Extensão:

- | | |
|-----------------------------------|------------------------------|
| () 1. Comunicação | () 5. Meio ambiente |
| () 2. Cultura | (X) 6. Saúde |
| () 3. Direitos humanos e justiça | (X) 7. Tecnologia e produção |
| () 4. Educação | () 8. Trabalho |

Objetivos de Desenvolvimento sustentável (ODS) da ONU impactados

- | | |
|---|---|
| () 1. Erradicação da pobreza | (X) 10. Redução das desigualdades |
| () 2. Fome zero e agricultura sustentável | () 11. Cidades e comunidades sustentáveis |
| (X) 3. Saúde e Bem-estar | () 12. Consumo e produção responsáveis |
| () 4. Educação de qualidade | () 13. Ação contra a mudança global do clima |
| () 5. Igualdade de Gênero | () 14. Vida na água |
| () 6. Água potável e Saneamento | () 15. Vida terrestre |
| () 7. Energia Acessível e Limpa | () 16. Paz, justiça e instituições eficazes |
| () 8. Trabalho decente e crescimento econômico | () 17. Parcerias e meios de implementação |
| (X) 9. Indústria, Inovação e Infraestrutura | |

Impactos sociais, tecnológicos, econômicos e culturais

Este trabalho apresenta impactos relevantes em potencial nas áreas tecnológica, social e de saúde, com ênfase na aplicação de métodos computacionais à descoberta de novos fármacos voltados ao tratamento de condições neuropsiquiátricas, como o transtorno do espectro autista (TEA). A utilização de protocolos eficientes de triagem virtual e cálculos termodinâmicos via simulações de dinâmica molecular com métodos clássicos e híbridos QM/MM-PB/GBSA, permite acelerar significativamente o processo de identificação de candidatos a fármacos, reduzindo os custos financeiros e o tempo normalmente demandado por métodos experimentais convencionais. Do ponto de vista tecnológico, os protocolos de triagem resultaram na identificação de seis candidatos a agonistas com alto potencial terapêutico (três duais para mGluR7/8 e três seletivos para 5-HT_{1A}), sendo dois deles já presentes em fases avançadas de testes clínicos, com potencial de reposicionamento. Tal

contribuição pode ser incorporada por centros de pesquisa, universidades e indústrias farmacêuticas que atuam na triagem de compostos neuroativos. Em relação aos impactos sociais e de saúde, destaca-se a importância da pesquisa voltada ao TEA, condição que afeta cerca de 1 em cada 100 crianças no mundo, segundo estimativas da OMS. Os resultados obtidos contribuem para a construção de soluções terapêuticas mais seguras e direcionadas, suprimindo lacunas críticas na farmacoterapia atual do autismo, que carece de tratamentos eficazes e com baixos efeitos colaterais. Potencialmente, esses impactos beneficiam populações em situação de vulnerabilidade, incluindo famílias de crianças autistas, profissionais da saúde e comunidades escolares. O trabalho se alinha prioritariamente à área temática 6 – Saúde, e secundariamente à área 7 – Tecnologia e Produção, conforme definido pela Política Nacional de Extensão Universitária. Quanto ao alinhamento com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) da Organização das Nações Unidas, este trabalho contribui diretamente com os seguintes: ODS 3 – Saúde e Bem-Estar: ao promover o desenvolvimento de alternativas terapêuticas seguras e eficazes para o TEA; ODS 9 – Indústria, Inovação e Infraestrutura: ao propor novos modelos computacionais aplicáveis na indústria farmacêutica; ODS 10 – Redução das Desigualdades: por buscar soluções terapêuticas acessíveis para populações com TEA.

Social, technological, economic and cultural impacts

This work presents significant potential impacts in the technological, social, and health domains, with emphasis on the application of computational methods to the discovery of new drugs targeting neuropsychiatric disorders, such as autism spectrum disorder (ASD). The use of efficient virtual screening protocols and thermodynamic calculations via molecular dynamics simulations and classical and hybrid QM/MM-PB/GBSA methods enables a substantial acceleration in the identification of drug candidates, reducing both financial costs and the time typically required by conventional experimental approaches. From a technological perspective, the screening protocols led to the identification of six agonist candidates with high therapeutic potential (three dual agonists for mGluR7/8 and three selective for 5-HT_{1A}), two of which are already in advanced stages of clinical trials, with repurposing potential. This contribution may be integrated into the workflows of research centers, universities, and pharmaceutical industries involved in the screening of neuroactive compounds. In terms of social and health impacts, the focus on ASD is particularly relevant, as it is a condition affecting approximately 1 in every 100 children worldwide, according to WHO estimates. The results contribute to the development of safer and more targeted therapeutic strategies, addressing critical gaps in current autism pharmacotherapy, which still lacks effective treatments with minimal side effects. Potentially, these impacts benefit vulnerable populations, including families of autistic children, healthcare professionals, and school communities. This work aligns primarily with Thematic Area 6 – Health, and secondarily with Thematic Area 7 – Technology and Production, as defined by the National Extension Policy for Brazilian Universities. Regarding the alignment with the United Nations Sustainable Development Goals (SDGs), this work contributes directly to the following: SDG 3 – Good Health and Well-being: by promoting the development of safe and effective therapeutic alternatives for ASD; SDG 9 – Industry, Innovation, and Infrastructure: by proposing new computational models applicable to the pharmaceutical industry; SDG 10 – Reduced Inequalities: by seeking accessible therapeutic solutions for populations affected by ASD.

Assinatura do(a) autor(a)

Assinatura do(a) orientador(a)