

ANEXO V – FORMULÁRIO INDICADORES DE IMPACTOS



UNIVERSIDADE FEDERAL DE LAVRAS
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO

Autor(a): Leticia Vitoria Miranda

Orientador(a): Elaine Fontes Ferreira da Cunha

Programa de Pós-Graduação em: Agroquímica

Título: Inibidores de segunda geração e a via PI3K/Akt/mTOR: Caracterização por modelagem molecular

Tipos de Impactos:

sociais tecnológicos econômicos culturais outros

Áreas Temáticas da Extensão:

- | | |
|--|--|
| <input type="checkbox"/> 1. Comunicação | <input type="checkbox"/> 5. Meio ambiente |
| <input type="checkbox"/> 2. Cultura | <input checked="" type="checkbox"/> 6. Saúde |
| <input type="checkbox"/> 3. Direitos humanos e justiça | <input checked="" type="checkbox"/> 7. Tecnologia e produção |
| <input type="checkbox"/> 4. Educação | <input type="checkbox"/> 8. Trabalho |

Objetivos de Desenvolvimento sustentável (ODS) da ONU impactados

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

Impactos sociais, tecnológicos, econômicos e culturais

Este estudo sobre inibidores seletivos e duais das enzimas PI3K α e mTOR, componentes fundamentais da via de sinalização PI3K/Akt/mTOR, amplia as perspectivas da pesquisa em saúde ao contribuir para o entendimento de mecanismos moleculares relacionados à proliferação celular e ao desenvolvimento do câncer, além de outras comorbidades. A investigação impulsiona a inovação científica e tecnológica ao empregar metodologias de modelagem molecular, ancoramento molecular e análise multivariada, permitindo uma análise abrangente das interações entre os ligantes e os sítios ativos das enzimas. Essa abordagem possibilita a proposição de modificações estruturais em protótipos moleculares com potencial inibitório otimizado, oferecendo subsídios teóricos para o desenvolvimento de fármacos mais eficazes e direcionados. O trabalho fortalece a interface entre ciência e aplicação prática, ao alinhar o conhecimento computacional à descoberta de compostos bioativos de interesse farmacêutico, promovendo o avanço de estratégias terapêuticas voltadas ao controle de doenças decorrentes de desordens desta via de sinalização celular. Além de gerar impacto acadêmico, a pesquisa favorece a aproximação entre universidade e sociedade, ao gerar a possibilidade de se estabelecer colaborações com centros de pesquisa e indústrias interessadas na inovação em saúde. Por se tratar de abordagens teóricas, os métodos empregados não requerem o uso de solventes, reagentes químicos ou experimentação animal, tornando o estudo ambientalmente responsável e alinhado aos princípios de sustentabilidade. A partir dessa integração entre ciência, tecnologia e ética ambiental, fomenta-se a difusão do conhecimento e o fortalecimento institucional na área de química computacional aplicada. O estudo se insere nas áreas temáticas Tecnologia e Produção e Saúde, conforme a Política Nacional de Extensão, e está alinhado aos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável da ONU, especialmente o ODS 3 (Saúde e Bem-Estar), o ODS 9 (Indústria, Inovação e Infraestrutura) e o ODS 12 (Consumo e Produção Responsáveis). Ao unir ciência, tecnologia e compromisso social, esta pesquisa reafirma o papel da Universidade Federal de Lavras como promotora de inovação e desenvolvimento sustentável no campo da saúde.

Social, technological, economic and cultural impacts

This study on selective and dual inhibitors of the PI3K α and mTOR enzymes, which are fundamental components of the PI3K/Akt/mTOR signaling pathway, broadens health research perspectives by contributing to the understanding of molecular mechanisms related to cell proliferation and cancer development, as well as other comorbidities. This investigation drives scientific and technological innovation through the use of molecular modeling, molecular docking, and multivariate analysis methodologies, enabling a comprehensive assessment of ligand–enzyme active site interactions. This approach allows for proposing structural modifications in molecular prototypes with optimized inhibitory potential, providing theoretical support for the development of more effective and targeted drugs. The work strengthens the interface between science and practical application by aligning computational knowledge with the discovery of bioactive compounds of pharmaceutical interest, promoting the advancement of therapeutic strategies aimed at controlling diseases arising from disorders in this signaling pathway. In addition to generating academic impact, the research fosters closer collaboration between university and society by creating opportunities for partnerships with research centers and industries interested in health innovation. As it involves theoretical approaches, the methods used do not require solvents, chemical reagents, or animal testing, making the study environmentally responsible and aligned with sustainability principles. Through this integration of science, technology, and environmental ethics, the research promotes knowledge dissemination and institutional strengthening in the field of applied computational chemistry. The study falls within the thematic areas of Technology and

Production and Health, according to the National Extension Policy, and aligns with the United Nations Sustainable Development Goals (SDGs), particularly SDG 3 (Good Health and Well being), SDG 9 (Industry, Innovation and Infrastructure), and SDG 12 (Responsible Consumption and Production). By uniting science, technology, and social commitment, this research reaffirms the role of the Federal University of Lavras as a promoter of innovation and sustainable development in the health sector.

Assinatura do(a) autor(a)

Assinatura do(a) orientador(a)