

ANEXO B – FORMULÁRIO DE INDICADORES DE IMPACTOS DA PESQUISA

Autor(a): Isabela Aparecida Militani

Orientador(a): Teodorico de Castro Ramalho

Programa de Pós-Graduação em: Agroquímica

Título do trabalho: **INVESTIGAÇÃO *IN SILICO* DO SISTEMA COLINÉRGICO**: DESENVOLVIMENTO DE ANTÍDOTOS CONTRA ARMAS QUÍMICAS E PROSPECÇÃO DE FÁRMACOS PARA A DOENÇA DE ALZHEIMER

Ação Climática:

- ☐ Agricultura de baixa emissão de carbono
- ☐ Uso sustentável da água e do solo
- ☐ Produção orgânica e sustentável
- ☐ Bioenergia, compostagem, biodigestores
- ☐ Energia limpa e renovável
- ☐ Eficiência energética ou inovação ambiental
- ☐ Manejo de resíduos ou recuperação de áreas degradadas
- ☒ Não se aplica.

Tipos de Impactos:

☒ sociais ☒ tecnológicos ☒ econômicos ☐ culturais ☒ outros: científicos

Áreas Temáticas da Extensão:

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

Objetivos de Desenvolvimento sustentável (ODS) da ONU impactados

- | | |
|---|--|
| ☐ 1. Erradicação da pobreza | ☐ 10. Redução das desigualdades |
| ☐ 2. Fome zero e agricultura sustentável | ☐ 11. Cidades e comunidades sustentáveis |
| ☒ 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 |
| ☒ 9. Indústria, Inovação e Infraestrutura | ☐ 18. Igualdade Étnico-Racial |

Impactos sociais, tecnológicos, econômicos e culturais

A pesquisa investigou, por meio de técnicas computacionais, o sistema colinérgico com dois objetivos principais: contribuir para o desenvolvimento de potenciais antídotos contra intoxicações por agentes organofosforados relacionados a armas químicas e prospectar compostos com potencial farmacológico para a doença de Alzheimer. Os resultados obtidos apresentam impactos predominantemente científicos e tecnológicos, com repercussões sociais e econômicas potenciais. Na investigação de antídotos contra intoxicações por agentes organofosforados, foram avaliadas interações moleculares entre colinesterases e oximas, buscando compreender os mecanismos envolvidos na reativação enzimática e fornecer subsídios para o planejamento racional de novas moléculas. Na prospecção de fármacos, a análise estrutural e energética de compostos frente à acetilcolinesterase permitiu identificar candidatos promissores, que apresentaram resultados favoráveis nas etapas de investigação molecular. A aplicação de técnicas como o *docking* molecular, cálculos QM/MM e dinâmica molecular contribuiu para ampliar a compreensão das relações entre estrutura molecular e atividade biológica. Do ponto de vista tecnológico, os resultados podem subsidiar futuras etapas de desenvolvimento e otimização de candidatos a antídotos e fármacos, além de demonstrar o potencial das ferramentas computacionais para reduzir tempo, custos e quantidade de experimentos nas fases iniciais da descoberta de moléculas bioativas, embora esses benefícios econômicos ainda sejam potenciais e não tenham sido mensurados diretamente neste estudo. Os possíveis impactos sociais estão relacionados à melhoria futura de estratégias terapêuticas para a doença de Alzheimer e à proteção de populações expostas a agentes organofosforados, com potencial alcance nacional e internacional. Não foram realizadas ações extensionistas diretas nem houve público externo beneficiado durante a execução da pesquisa, portanto, os impactos sociais e tecnológicos descritos são predominantemente potenciais. Nesse contexto, o trabalho está relacionado principalmente às áreas temáticas de Saúde e Tecnologia e Produção e apresenta alinhamento com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável 3 (Saúde e Bem-Estar), 9 (Indústria, Inovação e Infraestrutura) e 16 (Paz, Justiça e Instituições Eficazes).

Social, technological, economic and cultural impacts

The results obtained have predominantly scientific and technological impacts, with potential social and economic implications. In the investigation of antidotes against organophosphorus poisoning, molecular interactions between cholinesterases and oximes were evaluated to understand the mechanisms involved in enzymatic reactivation and to provide insights for the rational design of new molecules. In drug prospecting, the structural and energetic analysis of compounds against acetylcholinesterase enabled the identification of promising candidates that showed

favorable results throughout the molecular investigation stages. The application of techniques such as molecular *docking*, QM/MM calculations, and molecular dynamics contributed to a broader understanding of the relationships between molecular structure and biological activity. From a technological perspective, the results may support future stages of the development and optimization of candidate antidotes and drugs, in addition to demonstrating the potential of computational tools to reduce time, costs, and the number of experiments required during the early stages of bioactive molecule discovery, although these economic benefits remain potential and were not directly measured in this study. The potential social impacts are related to the future improvement of therapeutic strategies for Alzheimer's disease and the protection of populations exposed to organophosphorus agents, with potential national and international reach. No direct extension activities were conducted, and no external public was directly benefited during the research; therefore, the social and technological impacts described are predominantly potential. In this context, the study is primarily related to the thematic areas of Health and Technology and Production and is aligned with the United Nations Sustainable Development Goals 3 (Good Health and Well-Being), 9 (Industry, Innovation and Infrastructure), and 16 (Peace, Justice and Strong Institutions).

Assinatura Discente

Assinatura Orientador

Obs.: As assinaturas devem ser realizadas por meio da plataforma Gov.br, ICPEdu ou outra autenticável que contenha data.