

ANEXO B – FORMULÁRIO DE INDICADORES DE IMPACTOS DA PESQUISA

Autor(a): Gustavo de Almeida Andolpho

Orientador(a): Teodorico de Castro Ramalho

Programa de Pós-Graduação em: Agroquímica

Título do trabalho: INVESTIGATING PNICTOGEN BONDS: IMPACT ON MOLECULAR INTERACTIONS AND NMR PARAMETERS

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: _____

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 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 |

- () 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

Os resultados obtidos nesta tese apresentam impactos diretos nas esferas científica e tecnológica, com desdobramentos potenciais para a saúde pública e inovação industrial. A pesquisa gerou a publicação de dois artigos em periódicos internacionais de alto impacto, contribuindo para o avanço do conhecimento na fronteira da Química Computacional no avanço na Química Medicinal e Defesa, com o estudo sobre a inibição da acetilcolinesterase fornece uma nova compreensão sobre a ação de armas químicas organofosforadas. Este conhecimento é fundamental para o design de novos reativadores enzimáticos (oximas) mais eficazes, impactando diretamente a área de defesa química e toxicologia. Inovação em Computação Quântica: A proposta de novos qubits moleculares baseados em interações de pnictogênio oferece uma rota química para superar desafios de escalabilidade em computadores quânticos de RMN. A capacidade de "sintonizar" parâmetros de hardware através de engenharia molecular representa um avanço tecnológico significativo para o processamento de informação. Alinhamento com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) da ONU: O trabalho está alinhado com os seguintes objetivos: ODS 3, ao contribuir para o entendimento de mecanismos de toxicidade e desenvolvimento de antídotos para agentes neurotóxicos. ODS 9, ao propor novas tecnologias moleculares para a computação de alto desempenho, fomentando a inovação científica. Nas áreas temáticas da política nacional de extensão, os impactos desta pesquisa classificam-se primordialmente nas áreas de Tecnologia e Produção e Saúde, consolidando a colaboração internacional com grupos de pesquisa e fortalecendo a pós-graduação *Stricto sensu* da UFLA.

Social, technological, economic and cultural impacts

The results obtained in this thesis have direct implications for the scientific and technological fields, with potential implications for public health and industrial innovation. The research led to the publication of two articles in high-impact international journals, contributing to the advancement of knowledge at the frontier of Computational Chemistry and to progress in Medicinal Chemistry and Defense. The study on acetylcholinesterase inhibition provides new insights into the action of organophosphorus chemical weapons. This knowledge is fundamental for the design of new, more effective enzymatic activators (oximes), directly impacting the fields of chemical defense and toxicology. Innovation in Quantum Computing: The proposal for new molecular qubits based on pnictogen interactions offers a chemical route to overcome scalability challenges in NMR quantum computers. The ability to "tune" hardware parameters through molecular engineering represents a significant technological advance for information processing. Alignment with the UN Sustainable Development Goals (SDGs): The work aligns with the following goals: SDG 3, by contributing to the understanding of toxicity mechanisms and the development of antidotes for neurotoxic agents. SDG 9, by proposing new molecular

technologies for high-performance computing, fostering scientific innovation. Within the thematic areas of the national extension policy, the impacts of this research are primarily classified in the areas of Technology and Production and Health, consolidating international collaboration with research groups and strengthening UFLA's stricto sensu graduate programs.

Assinatura Discente

Assinatura Orientador

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