

ANEXO V – FORMULÁRIO INDICADORES DE IMPACTOS



UNIVERSIDADE FEDERAL DE LAVRAS
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO

Autor(a): Ingrid Vittoria Pereira Faria

Orientador(a): Matheus Puggina de Freitas

Programa de Pós-Graduação em: Agroquímica

Título: Estudos de modelagem molecular e simulação computacional das atividades antimicrobianas de 1,3,4-oxadiazóis contra *xanthomonas* sp. patógenas em citrus e arroz.

Tipos de Impactos:

(X) sociais (X) tecnológicos (X) econômicos () culturais ()

outros: _____

() 1. Comunicação

() 2. Cultura

() 3. Direitos humanos e justiça

() 4. Educação

(X) 5. Meio ambiente

() 6. Saúde

(X) 7. Tecnologia e produção

(X) 8. Trabalho

Áreas Temáticas da Extensão:

Objetivos de Desenvolvimento sustentável (ODS) da ONU impactados

() 1. Erradicação da pobreza

(X) 2. Fome zero e agricultura sustentável

() 3. Saúde e Bem-estar

() 4. Educação de qualidade

() 5. Igualdade de Gênero

() 6. Água potável e Saneamento

() 7. Energia Acessível e Limpa

(X) 8. Trabalho decente e crescimento econômico

(X) 9. Indústria, Inovação e Infraestrutura

(X) 10. Redução das desigualdades

() 11. Cidades e comunidades sustentáveis

(X) 12. Consumo e produção responsáveis

(X) 13. Ação contra a mudança global do clima

() 14. Vida na água

(X) 15. Vida terrestre

() 16. Paz, justiça e instituições eficazes

(X) 17. Parcerias e meios de implementação

Impactos sociais, tecnológicos, econômicos e culturais

O presente trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de modelos preditivos por meio da abordagem MIA-QSAR, aliados a estudos de ancoramento molecular e dinâmica molecular, visando à identificação de compostos com potencial atividade antibacteriana contra bactérias do gênero *Xanthomonas*, responsáveis por importantes doenças em culturas agrícolas, como citros e arroz. Os impactos tecnológicos concentram-se na aplicação de ferramentas avançadas de química computacional, incluindo modelos de mínimos quadrados parciais (PLS) e máquinas de vetores de suporte (SVM), que apresentaram elevada robustez preditiva ($r^2 = 0,88$; $q^2 = 0,82$; $r^2_{\text{pred}} = 0,91$), possibilitando a proposição de novos compostos com maior eficiência biológica, com destaque para derivados contendo substituintes 2,4-diclorofenil. Sob a perspectiva econômica, os resultados indicam potencial redução de perdas agrícolas e otimização de custos no desenvolvimento de agroquímicos, uma vez que o uso de metodologias *in silico* contribui para a diminuição do tempo e dos investimentos necessários em etapas experimentais. No âmbito ambiental, o estudo favorece a redução do uso de bactericidas convencionais, como compostos à base de cobre, ao propor alternativas mais seletivas e potencialmente menos tóxicas, promovendo práticas agrícolas mais sustentáveis e a preservação dos ecossistemas. No contexto social, os impactos relacionam-se à segurança alimentar, ao fortalecimento do setor produtivo agrícola e à formação de recursos humanos qualificados. O trabalho apresenta caráter potencialmente extensionista, ao gerar conhecimento aplicável ao setor agrícola, beneficiando produtores rurais e a indústria agroquímica. O território impactado abrange regiões produtoras de citros e arroz, em escala regional e nacional. Embora os impactos diretos ainda se encontrem em estágio potencial, os resultados obtidos estabelecem bases consistentes para futuras aplicações práticas, alinhando-se aos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável, especialmente aqueles relacionados à agricultura sustentável, inovação tecnológica, crescimento econômico e proteção ambiental.

Social, technological, economic and cultural impacts

The present study aims to develop predictive models using the MIA-QSAR approach, combined with molecular docking and molecular dynamics studies, in order to identify compounds with potential antibacterial activity against bacteria of the genus *Xanthomonas*, which are responsible for important diseases in agricultural crops such as citrus and rice. The technological impacts are centered on the application of advanced computational chemistry tools, including Partial Least Squares (PLS) and Support Vector Machine (SVM) models, which demonstrated high predictive robustness ($r^2 = 0.88$; $q^2 = 0.82$; $r^2_{\text{pred}} = 0.91$), enabling the proposal of new compounds with enhanced biological efficiency, particularly those containing 2,4-dichlorophenyl substituents. From an economic perspective, the results indicate a potential reduction in agricultural losses and optimization of costs in agrochemical development, as the use of *in silico* methodologies reduces both time and financial investment required in experimental stages. Environmentally, the study contributes to reducing the use of conventional bactericides, such as copper-based compounds, by proposing more selective and potentially less toxic alternatives, thereby promoting more sustainable agricultural practices and ecosystem preservation. In the social context, the impacts are associated with food security, strengthening of the agricultural sector, and the training of qualified human resources. The study presents a potentially extension-oriented character by generating knowledge applicable to the agricultural sector, benefiting farmers and the agrochemical industry. The impacted territory includes citrus- and rice-producing regions at both regional and national levels. Although direct impacts are still at a potential stage, the results establish a solid foundation for future practical applications, aligning with the Sustainable Development Goals, particularly those related to sustainable agriculture, technological innovation, economic growth, and environmental protection.

Assinatura do(a) autor(a)

Assinatura do(a) orientador(a)