USO DE MODELOS IN SILICO PARA PREDIÇÃO DE TOXICIDADE DO HERBICIDA GLIFOSATO.

Queila Daiane Fonseca do Amaral [1]

Emanoeli da Rosa [2]

Thais Paaqualli [3]

Lavínia da Veiga Pereira [4]

Luís Flávio Souza de Oliveira [5]

Michel Mansur Machado [6]

Resumo:

Os agrotóxicos são agentes químicos usados na agricultura com o propósito de controle de ervas invasoras, fungos e insetos. O glifosato, [N- (fosfonometil) glicina], é o herbicida de amplo espectro mais utilizado no mundo. Pertence ao grupo dos organofosforados e atua inibindo o crescimento das plantas ao interferir na produção de aminoácidos essenciais para a planta e, assim, comprometendo a síntese protéica do vegetal, conduzindo-o à morte. Em humanos, estudos prévios demonstram que apresenta efeitos teratogêncios, tumorigênicos e hepatotóxicos, porém ainda não são totalmente elucidados os riscos e os mecanismos de atuação que explicam a toxicidade do glifosato. Considerando a que a tecnologia in silico permite uma predição da toxicicidade, distribuição e absorção de substâncias químicas, o presente estudo teve como objetivo analisar as possíveis predições toxicológicas do glifosato a partir de seu código SMILE e submetendo-o a análises através dos softwares: AdmetSAR, Lasar Toxicity Predictions e pkCSM. De acordo com os resultados preditivos obtidos, 44,3% do agrotóxico é absorvido no intestino; tem potencial positivo para ultrapassar a barreira hematoencefálica;não é carcinogênico, porém, possui alta toxicidade para peixes (toxicidade oral aguda de grau III), com uma LD50 entre 500 e 5000 mg/Kg. Com base nesses dados preditivos é possível perceber que o glifosato apresenta um bom potencial teórico de absorção pelo trato gastrintestinal e é capaz de chegar ao sistema nervoso central, mas de apresenta toxicidade classificada como leve. De qualquer forma, estudos in silico, apesar de serem relevantes e balizadores para ensaios in vitro e in vivo, devem ser complementados por estes últimos, de modo especial ao que se refere ao mecanismo de ação e as concentrações de exposição ou doses de administração.

Palavras-chave: Glifosato, pós-emergência, toxicidade, análises computacionais.

Modalidade de Participação: Pós-Graduação

USO DE MODELOS IN SILICO PARA PREDIÇÃO DE TOXICIDADE DO HERBICIDA GLIFOSATO.

[1] Técnico Administrativo em Educação. queilamaral@yahoo.com.br. Autor principal

[2] Aluno de pós-graduação. manuppgcf@gmail.com. Co-autor

[3] aluno de pós-graduação. thais.pasqualli@yahoo.com.br. Co-autor

[4] Aluno de Graduação. lavi.veiga10@gmail.com. Co-autor

[5] Docente. luisoliveira@unipampa.edu.br. Orientador

[6] Docente. michelmachado@unipampa.edu.br. Co-orientador

USO DE MODELOS *IN SILICO* PARA PREDIÇÃO DE TOXICIDADE DO HERBICIDA *GLIFOSATO*.

Os agrotóxicos são agentes químicos usados na agricultura com o propósito de controle de ervas invasoras, fungos e insetos. O glifosato, [N- (fosfonometil) glicina], é o herbicida de amplo espectro mais utilizado no mundo. Pertence ao grupo dos organofosforados e atua inibindo o crescimento das plantas ao interferir na produção de aminoácidos essenciais para a planta e, assim, comprometendo a síntese protéica do vegetal, conduzindo-o à morte. Em humanos, estudos prévios demonstram que apresenta efeitos teratogêncios, tumorigênicos e hepatotóxicos, porém ainda não são totalmente elucidados os riscos e os mecanismos de atuação que explicam a toxicidade do glifosato. Considerando a que a tecnologia *in silico* permite uma predição da toxicicidade, distribuição e absorção de substâncias químicas, o presente estudo teve como objetivo analisar as possíveis predições toxicológicas do glifosato a partir de seu código SMILE e submetendo-o a análises através dos softwares: *AdmetSAR*, *Lasar Toxicity Predictions* e *pkCSM*. De acordo com os resultados preditivos obtidos, 44,3% do agrotóxico é absorvido no intestino; tem potencial positivo para ultrapassar a barreira hematoencefálica;não é carcinogênico, porém, possui alta toxicidade para peixes (toxicidade oral aguda de grau III), com uma LD50 entre 500 e 5000mg/Kg.Com base nesses dados preditivos é possível perceber que o glifosato apresenta um bom potencial teórico de absorção pelo trato gastrintestinal e é capaz de chegar ao sistema nervoso central, mas de apresenta toxicidade classificada como leve. De qualquer forma, estudos *in silico*, apesar de serem relevantes e balizadores para ensaios *in vitro* e *in vivo*, devem ser complementados por estes últimos, de modo especial ao que se refere ao mecanismo de ação e as concentrações de exposição ou doses de administração.

Palavras-chave: Glifosato, pós-emergência, toxicidade, análises computacionais.