

PREDIÇÃO DE TOXICIDADE DO HERBICIDA IMAZETHAPYR UTILIZANDO FERRAMENTAS IN SILICO

Emanoeli Da Rosa ¹

Luisa Zuravski ²

Queila Daiane Fonseca do Amaral ³

Cleci Menezes Moreira ⁴

Luis Flavio Souza De Oliveira ⁵

Michel Machado ⁶

Resumo:

Tendo em vista que plantas invasoras são um potencial risco para prejuízos nas safras, o uso de herbicidas durante os diferentes ciclos do plantio é uma prática bastante usual e está longe de ter um fim. O Imazetapir (IZP) é um herbicida pertencente à classe das imidazolininas, e é empregado na cultura da soja, principalmente na fase pós-emergencial. Os estudos envolvendo aspectos toxicológicos de defensivos agrícolas estão em franco crescimento, tanto em seu aspecto qualitativo quanto quantitativo, com aperfeiçoamento e aproximação da realidade, muito em função do aperfeiçoamento dos modelos matemáticos e da base de dados de moléculas que são usadas pelas plataformas como modelos e comparações. Dentro desse contexto, considerando que as análises in silico permitem uma predição de parâmetros de absorção, distribuição e também toxicidade, este estudo teve como principal objetivo realizar um estudo preditivo predição do IZP. Para a análise das plataformas, o código SMILE do IZP foi pesquisado e submetido às seguintes plataformas para obtenção dos dados: Lazar Toxicity Predictions, admetSAR e pkCSM. Os dados preditivos obtidos das análises computacionais apontam que o IZP apresenta uma taxa de absorção intestinal de 70,8% possui potencial positivo para atravessar a barreira hematoencefálica, não é inibidor da glicoproteína P, demonstrou potencial cancerígeno, mas apresentou um potencial para de hepatotoxicidade. Além disso, sua LD50 preditiva (para ratos) seria compreendida entre 500 e 5000 mg/kg, o que o classificaria como tóxico de grau III, ou seja, levemente tóxico. Todavia, o IZP é um composto que deixa resíduos por um período bastante significativo no solo e, considerando os resultados das análises in silico do presente estudo, este herbicida, por apresentar riscos potenciais à saúde humana, deve ter sua toxicologia melhor elucidada. De qualquer forma, reconhecemos as informações obtidas relevantes e balizadoras para estudos complementares tanto in vitro quanto in vivo.

Palavras-chave: Toxicidade, imazetapir, saúde humana, softwares in silico

Modalidade de Participação: Pós-Graduação

PREDIÇÃO DE TOXICIDADE DO HERBICIDA IMAZETHAPYR UTILIZANDO FERRAMENTAS IN SILICO

¹ Aluno de pós-graduação. manuppgcf@gmail.com. Autor principal

² aluno de pós graduação. luisazuravski@gmail.com. Co-autor

³ técnico administrativo. queilaamaral@yahoo.com.br. Co-autor

⁴ docente. clecim2@gmail.com. Co-autor

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

⁶ docente . michelmachado@unipampa.edu.br. Co-orientador

PREDIÇÃO DE TOXICIDADE DO HERBICIDA *IMAZETHAPYR* UTILIZANDO FERRAMENTAS *IN SILICO*

Tendo em vista que plantas invasoras são um potencial risco para prejuízos nas safras, o uso de herbicidas durante os diferentes ciclos do plantio é uma prática bastante usual e está longe de ter um fim. O Imazetapir (IZP) é um herbicida pertencente à classe das imidazolininas, e é empregado na cultura da soja, principalmente na fase pós-emergencial. Os estudos envolvendo aspectos toxicológicos de defensivos agrícolas estão em franco crescimento, tanto em seu aspecto qualitativo quanto quantitativo, com aperfeiçoamento e aproximação da realidade, muito em função do aperfeiçoamento dos modelos matemáticos e da base de dados de moléculas que são usadas pelas plataformas como modelos e comparações. Dentro desse contexto, considerando que as análises *in silico* permitem uma predição de parâmetros de absorção, distribuição e também toxicidade, este estudo teve como principal objetivo realizar um estudo preditivo ~~predição~~ do IZP. Para a análise das plataformas, o código SMILE do IZP foi pesquisado e submetido às seguintes plataformas para obtenção dos dados: *Lazar Toxicity Predictions*, *admetSAR* e *pkCSM*. Os dados preditivos obtidos das análises computacionais apontam que o IZP apresenta uma taxa de absorção intestinal de 70,8% possui potencial ~~positivo~~ para atravessar a barreira hematoencefálica, não é inibidor da glicoproteína P, demonstrou potencial cancerígeno, mas apresentou um potencial ~~para~~ de hepatotoxicidade. Além disso, sua LD50 preditiva (para ratos) seria compreendida entre 500 e 5000 mg/kg, o que o classificaria como tóxico de grau III, ou seja, levemente tóxico. Todavia, o IZP é um composto que deixa resíduos por um período bastante significativo no solo e, considerando os resultados das análises *in silico* do presente estudo, este herbicida, por apresentar riscos potenciais à saúde humana, deve ter sua toxicologia melhor elucidada. De qualquer forma, reconhecemos as informações obtidas relevantes e balizadoras para estudos complementares tanto *in vitro* quanto *in vivo*.

Palavras-chave: Toxicidade, imazetapir, saúde humana, *softwares in silico*.