



**XVII SICTI**  
Seminário de Iniciação Científica,  
Tecnológica e Inovação  
**X SIMIT**  
Simpósio de Inovação Tecnológica

**CIÊNCIA e  
COOPERAÇÃO  
na AMAZÔNIA**  
**16 a 19 de  
Setembro**  
**IFPA Campus Bragança**

## **AVALIAÇÃO NEUROTÓXICA DE UM FUNGICIDA UTILIZADO NO CULTIVO DE ALFACE**

SILMARA DOS SANTOS LIMA<sup>1</sup>, PEDRO FILIPE OLIVEIRA DA SILVA<sup>2</sup>, ADRIANO SANTOS DA ROCHA<sup>3</sup>,  
GLAUCIA SANTOS DIAS DE AZEVEDO<sup>4</sup>, ALESSANDRA SIMONE SANTOS DE OLIVEIRA FLOR<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Acadêmica do Curso de Engenharia de Alimentos, IFPA, campus Castanhal.

<sup>2</sup> Acadêmico do Curso de Agronomia, IFPA, campus Castanhal.

<sup>3</sup> Docente do Curso Agronomia, campus Castanhal. E-mail autor correspondente: [adriano.rocha@ifpa.edu.br](mailto:adriano.rocha@ifpa.edu.br)

<sup>4</sup> Docente do Curso Agronomia, campus Castanhal;

<sup>5</sup> Docente do Curso Agronomia, campus Castanhal;

Área de conhecimento/Subárea: Ciências Exatas e da Terra/Química.

ODS vinculado(s): ODS02 - Fome zero e agricultura sustentável; ODS15 - Vida terrestre.

**RESUMO:** A crescente demanda por alimentos influencia o uso de diversas classes de defensivos agrícolas, principalmente na cultura da alface (*Lactuca sativa*), onde, dados recentes do Programa de Análise de Resíduos de Agrotóxicos em Alimentos indicaram a presença do fungicida Piraclostrobina ( $C_{19}H_{18}ClN_3O_4$ ), o que pode levar a uma possível contaminação ao consumidor. O objetivo do trabalho foi de avaliar a capacidade do agrotóxico em invadir o Sistema Nervoso Central (SNC) do nosso organismo por meio da abordagem estatística Blood-Brain Barrier (BBB) Score. O método utilizado foi o cálculo através do software de modelagem Molsoft disponível gratuitamente e, posteriormente, o contraste com substâncias de referência disponíveis na literatura. O resultado do BBB Score da substância indicou a capacidade de invadir o SNC, sendo comparado aos valores de fármacos e substâncias cancerígenas. Portanto, o Piraclostrobina tem alto poder invasivo no SNC, ficando dentro da faixa dos valores do BBB-Score das substâncias de referência.

**PALAVRAS-CHAVE:** blood-brain barrier score; tiametoxam; sistema nervoso central; alimentos; invasibilidade.

### **INTRODUÇÃO**

A produção de alimentos é de suma importância para a perpetuação da humanidade, visto que, sua ausência implicaria no colapso da sociedade. No entanto, o uso de defensivos agrícolas voltados para a manutenção de diversas culturas vem crescendo consideravelmente, bem como a demanda por alimentos, isso se torna um problema, pois, a liberação e o consumo cresce anualmente em âmbito nacional tendo em média de 545 produtos por ano, segundo dados da MAPA compilados pela Fundação Heinrich Böll, que realizou o estudo Atlas dos Agrotóxicos, ente 2021 a 2022 (G1, 2023) e 1 a cada 4 produtos de origem vegetal tem resíduos de agrotóxicos proibidos ou acima do permitido, aponta ANVISA em 2023 (G1, 2023).

Dentre a ampla gama de alimentos, é possível destacar a alface como sendo uma das principais hortaliças consumidas pela população, no entanto, tal cultura apresenta estatísticas alarmantes quanto



**XVII SICTI**  
Seminário de Iniciação Científica,  
Tecnológica e Inovação  
**X SIMIT**  
Simpósio de Inovação Tecnológica

**CIÊNCIA e  
COOPERAÇÃO  
na AMAZÔNIA**

**16 a 19 de  
Setembro**

**IFPA Campus Bragança**

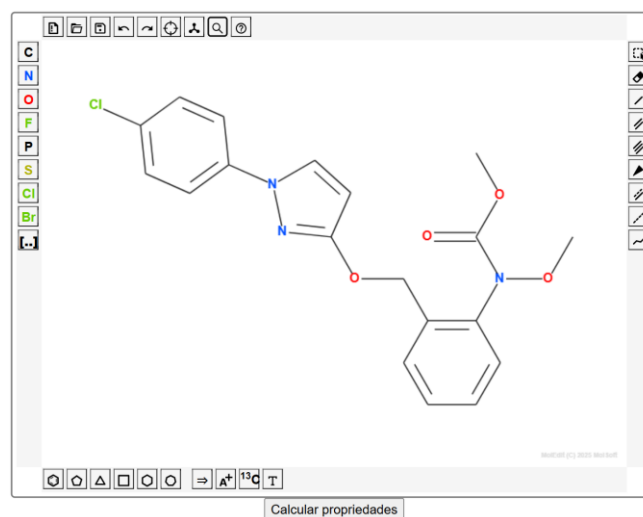
a presença de resíduos de agrotóxicos, onde, o Programa de Análise de Resíduos de Agrotóxicos em Alimentos em seu relatório no ciclo de 2023 comprovou a presença do fungicida Piraclostrobina ( $C_{19}H_{18}ClN_3O_4$ ) em sua composição, podendo levar uma possível contaminação ao consumidor.

Dito isso, O objetivo do trabalho foi avaliar a capacidade do Piraclostrobina de invadir o Sistema Nervoso Central (SNC) do organismo humano por meio da abordagem estatística Blood-Brain Barrier (BBB) Score e assim discutir a sua biodisponibilidade

## METODOLOGIA

A metodologia utilizada para o desenvolvimento do trabalho foi o cálculo através do software de modelagem Molsoft (Figura 1) disponível gratuitamente e, posteriormente, o contraste com substâncias de referência disponíveis na literatura e no site drugbank.

**Figura 1** – Interface da ferramenta de modelagem.



Ao centro a molécula do Piraclostrobina. Fonte: MolEdit (C) 2025 MolSoft

Após desenhar a molécula do Piraclostrobina foi dado o comando para calcular o valor de BBB Score dessa substância, e assim comparar o resultado com valores disponíveis na literatura para esse mesmo dado.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir do resultado gerado no Molsoft, foi possível comparar o valor do BBB Score do Piraclostrobina a outras substâncias, sendo elas: de referência (fungicida carbendazin e inseticida banido carbofurano) e fármacos (analgésico dipirona e antidepressivo amitriptilina), (Drugbank, 2025).

O valor de BBB-Score do Piraclostrobina foi de 4,05, ficando dentro do intervalo de alta invasibilidade no sistema nervoso central que é, segundo Gupta (2019), de 4 a 6. A comparação com substâncias de referência, sendo elas fármacos (antidepressivo amitriptilina BBB = 5,07 e analgésico dipirona BBB = 4,25) e não fármacos (fungicida carbendazin BBB = 4,25 e inseticida banido carbofurano BBB = 4,3), também indicou a baixa mobilidade do defensivo.



**XVII SICTI**  
Seminário de Iniciação Científica,  
Tecnológica e Inovação  
**X SIMIT**  
Simpósio de Inovação Tecnológica

**CIÊNCIA e  
COOPERAÇÃO  
na AMAZÔNIA**  
**16 a 19 de  
Setembro**  
**IFPA Campus Bragança**

## CONCLUSÕES

A partir do exposto, foi possível chegar a conclusão de que o Piraclostrobina ficou na faixa de BBB-Score ( $4 < 4,05 < 6$ ) que garante a invasibilidade de uma molécula no SNC, onde, resultados como esses podem indicar uma substância com potencial para causar danos sérios à saúde como intoxicações crônicas e até mutagênicas ou até mesmo pode servir de complemento ou contraste para outros trabalhos futuros que se relacionem com as propriedades eletrônicas dessa substância.

## Referências

- 'Atlas dos agrotóxicos' aponta excessos do Brasil e da América do Sul, destaca jornal francês. **G1**. 2023. Disponível em: <https://g1.globo.com/economia/agronegocios/noticia/2023/05/16/atlas-dos-agrotoxicos-aponta-excessos-do-brasil-e-da-america-do-sul-destaca-jornal-frances.ghtml>. Acesso em: 17 mai. 2025.
- GARCIA, M.; RODRIGUES, P. Um em cada quatro alimentos de origem vegetal tem resíduos de agrotóxicos proibidos ou acima do permitido, aponta Anvisa. **G1**. 2023. Disponível em: <https://g1.globo.com/saude/noticia/2023/12/06/anvisa-agrotoxicos-relatorio-para.ghtml>. Acesso em: 17 mai. 2025.
- GUPTA, Mayuri et al. The blood–brain barrier (BBB) score. **Journal of medicinal chemistry**, v. 62, n. 21, p. 9824-9836, 2019.
- MolSoft L.L.C., 2024. Disponível em: <http://www.molsoft.com/mprop/>. Acesso em: 10 mai. 2025.
- Relatório dos resultados das análises de amostras monitoradas no ciclo 2023. Programa de Análise de Resíduos de Agrotóxicos em Alimentos – PARA Plano Plurianual 2023-2025 – Ciclo 2023.
- WISHART, D. S. et al. DrugBank 5.0: uma grande atualização do banco de dados do DrugBank para 2018. *Ácidos Nucleicos Res.* 2017 Nov 8. DOI: 10.1093/nar/gkx1037. Disponível em: <https://go.drugbank.com>. Acesso em: 10 mai. 2025.