

PREDIÇÃO FARMACOCINÉTICA APLICADA A RESÍDUOS DE DEFENSIVOS NA CULTURA DA ALFACE

Pedro Filipe Oliveira da Silva ¹, Simara dos Santos Lima ², Gláucia Santos Dias Azevedo ³, Alessandra Simone Santos de Oliveira Flor ⁴, Adriano Santos da Rocha ⁵.

¹Discente do Curso de Agronomia, Instituição campus Castanhal;

²Discente do Curso de Engenharia de Alimentos, Instituição campus Castanhal;

³Docente do Curso de Agronomia, Instituição campus Castanhal;

⁴Docente do Curso de Agronomia, Instituição campus Castanhal;

⁵Docente do Curso de Agronomia, Instituição campus Castanhal.

Correspondência: pfilipe.ofc@gmail.com

O uso de defensivos agrícolas no Brasil tem crescido significativamente, acompanhando a expansão da produção de alimentos e levantando preocupações quanto à segurança alimentar. Dados da Food and Agriculture Organization indicam elevado consumo nacional, enquanto a ANVISA em 2023 aponta que 1 a cada 4 alimentos de origem vegetal apresenta resíduos de agrotóxicos em quantidades irregulares. Nesse contexto, surgem o fungicida Piraclostrobina ($C_{19}H_{18}ClN_3O_4$) e o inseticida Tiametoxan ($C_8H_{10}ClN_5O_3S$) que tem sido frequentemente identificados como contaminantes da alface no Programa de Análise de Resíduos de Agrotóxicos em Alimentos, destacando assim a necessidade de estudos sobre sua ocorrência, dinâmica toxicológica e demais implicações para o consumo dessa hortaliça. Esta pesquisa teve como objetivo elucidar a biodisponibilidade para humanos destes produtos encontrados na cultura da alface. E com isso, fornecer informações sobre como essas moléculas atuam após o caso hipotético de intoxicação oral. A metodologia utilizada foi o modelo do “Ovo-cozido”, uma ferramenta computacional utilizada na fase inicial do desenvolvimento de fármacos para prever duas características farmacocinéticas cruciais: a absorção gastrointestinal e a permeabilidade na barreira hematoencefálica (BHE), para isso, o cálculo se baseia em duas propriedades físico-químicas de moléculas como o LOG P (Coeficiente de partição que se relaciona com a lipofilicidade) e o TPSA (área da superfície polar topológica que se relaciona com a polaridade molecular). Na etapa do cálculo, as moléculas Piraclostrobina e Tiametoxan foram inseridas na plataforma digital gratuita *SwissADME*, sendo crucial para realizar todos os cálculos necessários para gerar o modelo gráfico. Os resultados foram avaliados qualitativamente a partir dos dados quantitativos trabalhados pelo software, os quais encontraram para a Piraclostrobina os valores LogP=4,09 e TPSA=65,82 Å, e para o Tiametoxan foram obtidos LogP=0,11 e TPSA=115,02 Å. Esses resultados enquadraram a Piraclostrobina na região de permeabilidade da BHE e o Tiametoxan na região de absorção gastrointestinal, segundo o modelo do “ovo cozido”. Por fim, conclui-se que, o Tiametoxan e a Piraclostrobina tem um perfil que indica uma considerável biodisponibilidade em nosso organismo, quando a via de contaminação for oral. Esses resultados fomentam a necessidade de estudos que aumentem o conhecimento sobre essas moléculas, como pesquisa de suas rotas metabólicas, por exemplo.

Palavras-chave: segurança alimentar; absorção intestinal; barreira hematoencefálica; toxicidade; análise de resíduos.