

Química

Modelagem molecular e estudo de indicadores de viabilidade técnica e econômica (EVTE) para guiar a descoberta de novos compostos que atuam contra ectoparasitos

Vinicius Silva Artico - 12º módulo de Química, UFLA, bolsista PIBITI/CNPq

Daiana Teixeira Mancini - Coorientadora, DQI

Teodorico de Castro Ramalho - Orientador, DQI - Orientador(a)

Resumo

O carrapato *Rhipicephalus microplus*, mais conhecido como carrapato do boi, representa uma ameaça sanitária e econômica significativa à pecuária brasileira, devido à sua crescente resistência aos carrapaticidas tradicionais e ao impacto direto na produção de leite e carne. Diante desse cenário, este trabalho objetiva a busca por novos compostos carrapaticidas promissores, utilizando métodos de modelagem molecular aliados a um estudo de viabilidade técnica e econômica (EVTE). Para isso, alvos moleculares específicos do carrapato foram selecionados, e uma triagem virtual de moléculas foi realizada, seguida de uma aplicação de filtros farmacofóricos e de toxicidade. As moléculas selecionadas foram submetidas a análises de docking molecular, o que possibilitou a identificação daquelas com maior afinidade. Posteriormente, as moléculas mais promissoras foram encaminhadas ao estudo de EVTE, considerando indicadores como taxa interna de retorno (TIR), valor presente líquido (VPL), índice benefício-custo (IBC) e tempo de payback. Com base nesses processos, 36 moléculas foram obtidas após a filtragem farmacofórica, e aquelas com maior afinidade demonstraram eficiência econômica a partir do EVTE. Esses resultados indicam que a integração de métodos computacionais e análise de viabilidade econômica pode acelerar a descoberta de novos carrapaticidas, oferecendo alternativas eficazes e sustentáveis para o controle do carrapato do boi.

Palavras-Chave: Carrapatos , Triagem Molecular, Economia .

Instituição de Fomento: CNPq

Link do pitch: <https://www.youtube.com/watch?v=dxhUweVpoK0>