



4to COLOQUIO EN BIOCIENCIAS, 2024

DEL LABORATORIO A LA REALIDAD: ESTRATEGIAS PARA LA SELECCCIÓN DE ACTIVOS NATURALES VIRUCIDAS EN AMBIENTES INTERIORES

Silva Beltrán Norma Patricia, Charles Gerba, Stephanie Boone, Kelly R. Bright, Justin Clark, John Lehman, Nick Duane Betts Childress, M. Khalid Ijaz, Julie McKinney. Universidad de Sonora. University of Arizona. Global Research & Development for Lysol and Dettol, Reckitt Benckiser normasilva@arizona.edu; norma.silva@unison.mx

Resumen

Este estudio exploró diversas estrategias para determinar la eficacia y mecanismos de acción virucida de activos microbicidas aplicados en ambientes internos. Para el estudio se seleccionaron diversos activos naturales aprobados como productos antimicrobianos por la EPA (Agencia de Protección al Ambiente) y se emplearon técnicas in vitro y de acoplamiento molecular para predecir la eficacia y los mecanismos de acción virucida de las proteínas involucradas en la replicación viral del MS2; ARN cadena sencilla y PR772; ADN cadena doble (colifagos usados como sustitutos de virus no envueltos). Los resultados de las simulaciones de acoplamiento molecular revelaron que los activos naturales que requirieron menor energía de enlace, particularmente en las proteínas de cápside, mostraron la mayor eficacia en los ensayos virucidas in vitro. Las mayores reducciones virales observadas en los colifagos por agentes microbicidas fueron logradas por el ácido salicílico, thymol, carvacrol y eugenol, que mostraron reducciones superiores a $3 \log_{10}$ y de forma paralela mostraron la menor energía de enlace con puntuaciones de unión (ΔG) de -4 a -8 Kcal/mol en las proteínas de cápside para MS2 y PR-772 respetivamente. Esta energía de unión favoreció el acoplamiento de los activos naturales a las proteínas de cápside facilitando la neutralización e inactivación del virus. En conclusión, se identificó una relación directa entre los valores de acoplamiento molecular y los resultados del ensayo in vitro. La combinación de estas herramientas utilizadas en este estudio permite reducir el tiempo y optimizar el desarrollo de microbicidas. Además, los investigadores pueden elegir un amplio espectro de microorganismos para su inactivación o seleccionar uno o varios microbicidas para su estudio individual o sinérgico antes del ensayo in vitro, lo que permite optimizar costos y recursos en el proceso de la investigación.



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



FROM LABORATORY TO REALITY: STRATEGIES FOR THE SELECTION OF VIRUCIDA NATURAL ACTIVES IN INDOOR ENVIRONMENTS

Abstract

This study explored some strategies to determine the efficacy and mechanism of action of microbicidal agents applied in indoor environments. A selection of natural compounds approved as antimicrobial products by EPA (Environmental Protection agency) was made for the study, utilizing In vitro techniques and molecular docking to predict the efficacy and virucidal mechanism of the proteins involved in the viral replication of MS2; RNA single stranded, and PR772; DNA doble stranded (coliphages used as substitutes for non-enveloped viruses). The results of the molecular docking simulations revealed that natural compounds requiring less binding anergy, particularly in the capsid proteins, exhibited the highest efficacy in the in vitro virucidal assays. The greatest viral reductions observed in coliphages by microbicidal agents were achieved by salicylic acid, thymol, carvacrol, and eugenol, which showed reductions greater than $3 \log_{10}$, and in parallel, exhibited the binding energies, with binding scores (ΔG) ranging from -4 to -8 kcal/mol in the capsid proteins for MS2 and PR772, respectively. This binding energy facilitated the coupling of the natural agents to the capsid proteins, enhancing the neutralization and inactivation of the virus. In conclusion, a direct relationship was identified between the molecular docking values and the results of the in vitro assay. The combination of these tools used in this study allows for reduced time and optimized development of microbicidal agents. Additionally, researchers can choose a broad spectrum of microorganisms for inactivation or select one or several microbicides for individual or synergistic study before in vitro testing, optimizing costs and resources in the research process.



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"

