

14) Química Teórica y Computacional

## **EVALUACIÓN DEL COMPORTAMIENTO BIOCIDA DE UNA MEZCLA SINÉRGICA DE GLUTARALDEHIDO-O-FENILFENOL (2:1), COMO NUEVO PRINCIPIO ACTIVO DE UN DESINFECTANTE FUMÍGENO**

BONATERRA Fernando (1), Toselli Luis (1), Rosa Miguel (1).

(1) Grupo de Investigación en Simulación para Ingeniería Química (GISIQ) Facultad Regional Villa María - Universidad Tecnológica Nacional frb@frvm.utn.edu.ar Av Universidad 450, X5900HLR, Villa María, Córdoba, frb@frvm.utn.edu.ar <http://www.frvn.utn.edu.ar>

Este trabajo tiene por objeto realizar ensayos para medir el porcentaje de inhibición de microorganismos en un galpón de cría de ganado porcino tratados por fumigación azotécnica conteniendo un principio activo un sistema biocida de amplio espectro y de baja toxicidad. El desarrollo de microorganismos (hongos, bacterias y virus) ampliamente distribuidos en las superficies y en el aire, ocurren debido a la presencia de sustratos que sirven como nutrientes de los mismos. El principal motivo de este trabajo fue comprobar la acción biocida de una mezcla sinérgica de glutaraldehido (GA) y o-fenilfenol (OPP) (2:1) (1),(2), (3), gelificada con goma guar (GG) en relación 1:1 (4), la que fue absorbida sobre diferentes tipos bentonitas (BENT) en una relación de mezcla GA+OPP/BENT (35:65). Se realizó un análisis conformacional del complejo BENT-GA y BENT - OPP con un software de modelación molecular que utiliza un Campo de Fuerzas tipo MM+ (HYPERCHEM 8.0, Hypercube, Inc., USA) (4), para la optimización geométrica y Gaussian 09 (Gaussian, Inc.USA) (5) para la modelación molecular propiamente dicha. Para el GA se comprobó la formación de un complejo de inclusión 1:1 con la GG, estabilizado por fuerzas del tipo Van der Waals, que implica un calor de absorción calculado del orden de 227 kJ/mol., en tanto para el OPP el calor de absorción es prácticamente despreciable. Para el gel de GG con la mezcla GA/OPP, los resultados muestran que la formación de un hasta tres complejos de inclusión 1:1 estabilizado por fuerzas del tipo Van der Waals, electrostáticas y enlaces tipo hidrógeno, con un calor de formación de promedio de 467 kJ/mol (6). Se ensayaron además diferentes bentonitas siendo la secuencia energética de los calores de absorción la siguiente: hectorita > Na-bentonita > Ca-bentonita. La composición azotécnica generadora de humos se preparó utilizando una mezcla oxidante NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub>/KNO<sub>3</sub> (96/4 P/P) en un (40%), a la que se adicionó una mezcla (50/50 P/P) de lactosa y dicianidamida (20%) como combustible, caolín (20%) como el componente inerte modulador de la energía térmica y azodicarbonamida [ADC] (20%), como un agente productor de gas nitrógeno. La mezcla de GA/OPP/GG/BENT fue conformada como una pasta con una consistencia de una masilla de alta viscosidad, utilizando utilizando una amasadora de laboratorio tipo doble sigma, con un tornillo extrusor de descarga. Se conformaron posteriormente con dicho material, placas planas cuadradas de 0.5 cm de espesor, las que fueron colocadas en una bolsa de polipropileno, que fueron adheridas con cemento de contacto en la pared interna del recipiente que contiene la mezcla fumígena y constituyendo un 12 % P/P del total, siendo completando porcentualmente con la mezcla azotécnica previamente descripta. El proceso de generación de humos del sistema descripto implica un calor aparente de combustión de 1.3 kJ/g, y una temperatura de aproximadamente 658 K. Realizado el proceso de fumigación no se encontraron restos de GA/OPP en la BENT residual, asumiendo que dicha mezcla ha pasado a la fase gaseosa como desinfectante. Utilizado este fumígeno con este nuevo principio activo fue aplicado a la desinfección del aire de galpones de cría de ganado porcino, en una dosificación de 0,1%/ m<sup>3</sup> de principios activos se obtuvo, una reducción de 6 log del total de colonias de

hongos y bacterias del ambiente tratado. Para la cuantificación se utilizó, la norma francesa AFNOR NF T72-281 (7). Se utilizaron para la evaluación antiviral, virus de origen pulmonar porcino (*Actinobacillus pleuropneumoniae* ATCC 27088) (8). La concentración de virus después de la aplicación de este nuevo principio activo, fue realizada en una cámara de ensayos de laboratorio de acuerdo a (9), y su cuantificación fue realizada utilizando conteo en placa (10), empleando como medio de cultivo el N° 814 de ATCC obteniéndose una reducción de  $5.4 \times 10^4$  pfu/ml. La cuantificación se realizó también aplicando el protocolo Tissue Culture Infective Dose Assay (TCID<sub>50</sub>)/ml (11), dando por este método una reducción de  $7.4 \times 10^4$  (TCID<sub>50</sub>)/ml.

Palabras claves: complejo glutaraldehido goma -guar, o-fenilfenol, azotécnico

## Bibliografía

- 1) D'Ercole S., Catamo G, De Fazio P, Piccolomini R. In vitro antimicrobial activity of glutaraldehyde plus O-phenylphenol association (ratio 2:1)]. *Minerva Stomatol.* 51(1-2):29-33., 2002
- 2) US 7262222 B2 Synergistic mixtures of o-phenylphenol and other nitrogen and aldehyde microbiocides Carlson, P.E. Nehus, H.E. 28 Ago 2007
- 3) Russell, Hugo and Ayliffe's Principles and Practice of Disinfection, Preservation and Sterilization, 5th Edition Adam P. Fraiese, Jean-Yves Maillard, Syed Sattar ISBN: 978-1-4443-3325-1, Wiley-Blackwell, 2013
- 4) <http://cheminfo.chemi.muni.cz/ktfch/janderka/Manuals/compchem.pdf>
- 5) Hehre W. J., Lathan W. A., Ditchfield R. , Newton M. D., Pople J. A., Gaussian 70 (Quantum Chemistry Program Exchange, Program No. 237, 1970.
- 6) Gliko-Kabira I., Penhasib A., Rubinsteina A., Carbohydrate Research Characterization of crosslinked guar by thermal analysis ; 316(1- 4), 6–13, 1999.
- 7) AFNOR NF T72-281 - Procédés de Désinfection des Surfaces par voie Aérienne-Détermination de l'Activité Bactéricide, Fongicide, Levorucide e Sporicide Novembre ,2014
- 8) Pohl S., Bertschinger H. U., Frederiksen W., Mannheim S, Transfer of *Haemophilus pleuropneumoniae* and the *Pasteurella haemolytica*-like organism causing porcine necrotic pleuropneumonia to the genus *Actinobacillus* (*Actinobacillus pleuropneumoniae* comb. nov.) on the basis of phenotypic and deoxyribonucleic acid relatedness. *Int. J. Syst. Bacteriol.* 33: 510-514, 1983.
- 9) Knotzer S, Kindermann J, Modrof J, Kreil TR Measuring the effectiveness of gaseous virus disinfectants *Biologicals* 43(6) · 519-523, 2015
- 10) ASTM - American Society for Testing and Materials. ASTM E2197e11 Standard quantitative disk arrier test method for determining bactericidal, virucidal, fungicidal, mycobactericidal, and sporicidal activities of chemicals, 2011
- 11) <http://www.virapur.com/protocols/TCID50%20Protocol.pdf>