



Ciencia Latina
Internacional

Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar, Ciudad de México, México.
ISSN 2707-2207 / ISSN 2707-2215 (en línea), noviembre-diciembre 2024,
Volumen 8, Número 6.

https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v8i6

**VALORACIÓN IN SILICO E IN VIVO
DE LA TOXICIDAD DEL ACETAMIPRID EN
LOMBRICES EISENIA FETIDA S. Y EL POSIBLE
DAÑO EN EL SER HUMANO**

**IN SILICO AND IN VIVO ASSESSMENT OF ACETAMIPRID
TOXICITY IN EARTHWORMS EISENIA FETIDA S AND
POSSIBLE HARM TO HUMANS**

Abraham Juárez de la Cruz

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

Manuel González-Pérez

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

Gabriela Francisco García

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

Pedro Antonio Rodríguez Salazar

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

Adriana Reyes Castro

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

Hugo Rodríguez Romero

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

DOI: https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v8i6.15301

Valoración in Silico e In Vivo de la Toxicidad del Acetamiprid en Lombrices Eisenia Fetida S. y el Posible Daño en el Ser Humano

Abraham Juárez de la Cruz¹abraham.jc@personal.uttecam.edu.mx<https://orcid.org/0009-0001-7605-8116>Ingeniería en Agricultura Sustentable y Protegida
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
México**Manuel González-Pérez**m.gonzalez.perez@personal.uttecam.edu.mx<http://orcid.org/0000-0001-8700-2866>Ingeniería en Agricultura Sustentable y Protegida
Enlace - CONAHCYT
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
México**Gabriela Francisco García**gabriela.fg@personal.uttecam.edu.mx<https://orcid.org/0009-0007-7450-4809>Ingeniería en Agricultura Sustentable y Protegida
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
México**Pedro Antonio Rodríguez Salazar**pedro.rs@personal.uttecam.edu.mx<https://orcid.org/0009-0001-4373-4237>Ingeniería en Agricultura Sustentable y Protegida
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
México**Adriana Reyes Castro**adriana.rc@personal.uttecam.edu.mx<https://orcid.org/0009-0001-0863-7239>Ingeniería en Agricultura Sustentable y Protegida
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
México**Hugo Rodríguez Romero**rodriguez6cheyz@gmail.com<https://orcid.org/0009-0003-2466-4928>Ingeniería en Agricultura Sustentable y Protegida
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
México

RESUMEN

En los últimos años se ha investigado la toxicidad del Acetamiprid (AMP) en el hígado de larvas de *L. Meissner* en renacuajos de *Xenopus laevis*, entre otros seres vivos. Esta investigación tuvo como objetivo demostrar in silico e in vivo la toxicidad del AMP en lombrices de tierra *Eisenia fetida* S., y el daño al ser humano. La metodología consistió en dos partes: a) La caracterización y cálculos matemáticos de las interacciones in silico y b) In vivo. Aquí se aplicaron tres métodos: 1) mezcla de composta con AMP, 2) inmersión en la solución de AMP y agua, y 3) inmersión y baño con agua limpia. Los cálculos de química cuántica concluyeron que el AMP es tóxico porque sus interacciones moleculares entran en equilibrio químico con los AA puros y secuenciados de las proteínas. Este mismo fenómeno ocurre con las bases nitrogenadas (BN), incrementando la oxidación fuerte; por esta razón, el AMP es mutagénico. También hace lo propio con los neurotransmisores (NT). En cuanto a los experimentos in vivo, el resultado fue el mismo en todos los casos: en 24 horas, los gusanos mostraron una marcada degradación de la piel y descomposición de las mamas.

Palabras clave: acetamiprid, lombricomposta, ADN-ARN, neurotransmisores. química cuántica

¹ Autor principal

Correspondencia: m.gonzalez.perez@personal.uttecam.edu.mx

In Silico and in Vivo Assessment of Acetamiprid Toxicity in Earthworms *Eisenia fetida* S and Possible Harm to Humans

ABSTRACT

In recent years, the toxicity of Acetamiprid (AMP) in the liver of *L. Meissner* larvae in *Xenopus laevis* tadpoles, among other living beings, has been investigated. This research aimed to demonstrate in silico and in vivo the toxicity of AMP in earthworms *Eisenia fetida* S and the damage to humans. The methodology was in two parts: a) The characterization and mathematical calculations of the interactions in silico and b) In vivo. Here, three methods were applied: 1) mixing compost with AMP, 2) immersion in the AMP and water solution, and 3) immersion and bath with clean water. Quantum chemistry calculations concluded that AMP is toxic because its molecular interactions enter a chemical equilibrium with pure and sequenced AAs in proteins. This same phenomenon occurs with nitrogenous bases (NB), increasing strong oxidation; for this reason, AMP is mutagenic. It also does the same with neurotransmitters (NT). As for the in vivo experiments, the result was the same in all cases: Within 24 hours, the worms showed a marked degradation of the skin and decomposition of the mamas.

Keywords: acetamiprid, vermicompost, DNA-RNA, neurotransmitters. quantum chemistry

Artículo recibido 18 noviembre 2024

Aceptado para publicación: 15 diciembre 2024



INTRODUCCIÓN

Acetamiprid

Li et al., (2024) investigaron el efecto tóxico del AMP en el hígado de las larvas de *L. reissneri*. Ellos concluyeron que su estudio no solo enriquece la base para comprender el efecto tóxico de la exposición al AMP en el hígado de las larvas de *L. reissneri* y brinda más información sobre la cría y conservación de *L. reissneri*, sino que también llama la atención sobre el riesgo de toxicidad del AMP para las especies de vertebrados acuáticos inferiores.

Cheng et al., (2024) investigaron la toxicidad aguda y a corto plazo del AMP en renacuajos de *Xenopus laevis*. Ellos nos comunican que el análisis integrado reveló que la alteración de las vías metabólicas de purinas y aminoácidos potencialmente explica los efectos tóxicos inducidos por el AMP en los renacuajos. Los efectos disruptivos del AMP en las vías metabólicas de biosíntesis de valina, leucina e isoleucina; y de biosíntesis de aminoacil-ARNt en renacuajos se validaron a través de análisis metabolómicos dirigidos. Estos hallazgos son cruciales para evaluar el riesgo del AMP para organismos acuáticos no objetivo.

Abdelrahman et al., (2024) exploraron el mecanismo de cardiotoxicidad inducida por el AMP y los efectos paliativos del resveratrol. Ellos concluyeron que el ACP induce cardiotoxicidad al desregular la expresión del ARNm de $\alpha 7$ nAChR y sus dianas posteriores. Además, se ha demostrado que el RSV es un agente mejorador prometedor contra la cardiotoxicidad inducida por ACP.

Lombricultura

La lombricultura es una biotecnología que consiste en criar lombrices para reciclar desechos orgánicos y obtener humus, un abono orgánico. El humus mejora la fertilidad del suelo, aumenta la porosidad, retiene humedad, regula el pH y crea resistencia a plagas y enfermedades. La lombriz roja californiana es la más conocida y se usa en más del 80% de los criaderos del mundo. La *Eisenia fetida* S es la más apta para el vermicompostaje. (Delgado, 2024); (Cando et al., 2024); (Reyes-Pérez. 2024); (Carrasco-Torrontegui, 2024)

Buscando la rentabilidad y regeneración del suelo se han hecho muchas investigaciones, por ejemplo, Valdez, Santiago y Suárez (2024), evaluaron cuatro tipos abono orgánico que funcionan como alimento para la reproducción de la lombriz California roja *Eisenia fetida* S.



Ellos nos dicen: “Se concluye en nuestro ensayo que el tratamiento de estiércol de bovino, pasto verde picado, residuos de cocina, hojas de guácimo deshidratada, es una opción para reproducción de lombriz California roja *Eisenia fetida* S., en condiciones semicontroladas”.

Química cuántica

La Química Computacional se ha convertido en una herramienta fundamental para apoyar la búsqueda de nuevos conceptos químicos, explicar la estructura electrónica de las nuevas especies sintetizadas en el laboratorio, e incluso, encontrar una mejor estrategia en la optimización de condiciones al tiempo que se ejecuta la síntesis (Jiménez-Halla, 2024); (Doble, 2024); (Nieto Cortés, 2024); (Moreno-Inzunza, 2024). Como caso único y aislado: González-Pérez (2017), presenta una nueva teoría del coeficiente de transferencia de electrones (CTE) de una molécula a otra. Este autor concluye que como resultado de la aplicación de esta teoría, se presentan ejemplos en los que cálculos teóricos coinciden con los resultados de laboratorio de trabajos ya publicados.

METODOLOGÍA

La metodología se dividió en dos partes: A) In silico. Caracterización y procedimientos por teoría cuántica, B) In vivo. Laboratorio de agricultura.

A) In silico. Caracterización y procedimientos usando química cuántica

Se utilizó el software Hyperchem ® para calcular todos los parámetros cuánticos de todas las sustancias involucradas.

AAs puros, AAs secuenciados en proteínas, BN puras, BN secuenciadas como ADN y ARN, NTs y el ACM (Los cálculos son muy extensos, por esa razón se omiten en este artículo, para mayor información comunicarse con el Dr. Manuel González Pérez, email arriba).

B) In vivo. Laboratorio de agricultura.

Método 1. Método de la mezcla composta – insecticida

Este método consistió en colocar una dosis de 0.5 g de AMP (i .a.) disuelto en 1 kg de composta con lombrices, mezclando perfectamente el insecticida en la composta. Posteriormente se agregó suficiente agua para humedecerla completamente hasta tenerla a capacidad de campo (CC). La especie de lombriz utilizada fue la roja californiana *Eisenia fetida* S.

Método 2. Método de baño con solución

En este método se disolvió 0.5 g de AMP en 1 litro de agua, solución con la que se “bañaron” por inmersión las lombrices por un periodo de 1 minuto; posteriormente las lombrices se devolvieron a su ambiente para observar la reacción de estas. De igual manera se humedeció la composta hasta CC.

Método 3. Método de baño rápido – enjuague

Este método consistió en exponer la lombrices en el frujo de la solución anterior (0.5 g/litro de agua) para realizar el baño e inmediatamente después del baño rápido se prosedió a enjuagarlas con agua limpia.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Resultados In silico. Caracterización y procedimientos usando química cuántica

Tiempo que tarda el ACM en el cuerpo

En la tabla 1 se muestran los resultados de los cálculos cuánticos de los 20 AAs y el AMP (21 interacciones estudiadas). La interpretación de esta tabla es la de un pozo cuántico. La parte más profunda es la más compacta, por lo tanto, en esa zona se agrupan las interacciones de mayor fuerza y probabilidad que ocurran. El AMP quedó en el lugar número 5, esto indica que este insecticida es de acción prolongada, es muy compacto, por esta razón es más difícil que se expulse del sistema biológico.

Tabla1. CTEs del pozo cuántico de sustancias puras.

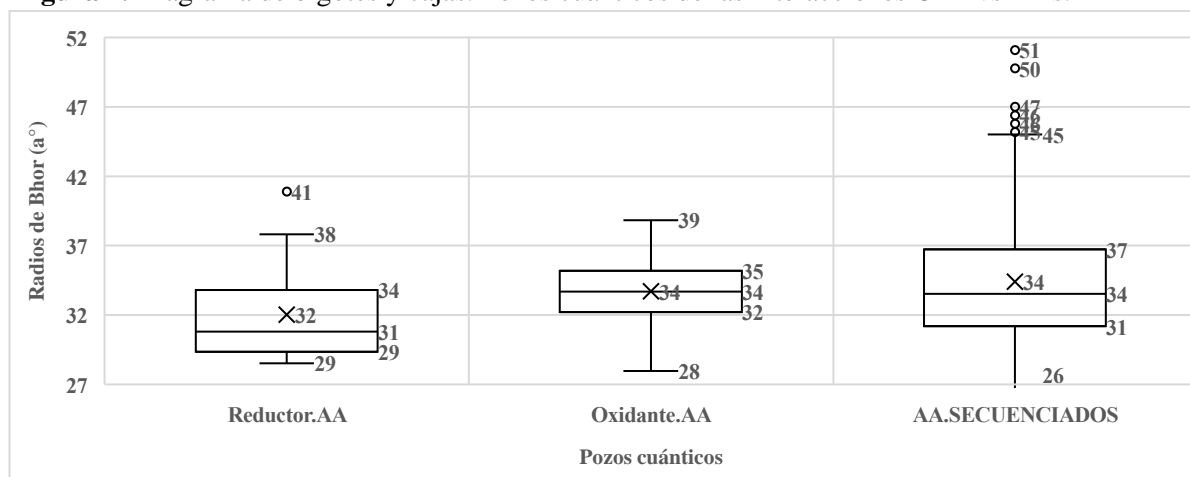
No.	Reductor	Oxidante	HOMO	LUMO	BG	E-	E+	EP	ETC
21	Val	Val	-9.914	0.931	10.845	-0.131	0.109	0.240	45.188
20	Ala	Ala	-9.879	0.749	10.628	-0.124	0.132	0.256	41.515
19	Leu	Leu	-9.645	0.922	10.567	-0.126	0.130	0.256	41.279
18	Phe	Phe	-9.553	0.283	9.836	-0.126	0.127	0.253	38.879
17	Gly	Gly	-9.902	0.902	10.804	-0.137	0.159	0.296	36.500
16	Ser	Ser	-10.156	0.565	10.721	-0.108	0.198	0.306	35.037
15	Cys	Cys	-9.639	-0.236	9.403	-0.129	0.140	0.269	34.956
14	Glu	Glu	-10.374	0.438	10.812	-0.111	0.201	0.312	34.655
13	Ile	Ile	-9.872	0.972	10.844	-0.128	0.188	0.316	34.316
12	Thr	Thr	-9.896	0.832	10.728	-0.123	0.191	0.314	34.167
11	Gln	Gln	-10.023	0.755	10.778	-0.124	0.192	0.316	34.108
10	Asp	Asp	-10.370	0.420	10.790	-0.118	0.204	0.322	33.509
9	Asn	Asn	-9.929	0.644	10.573	-0.125	0.193	0.318	33.249
8	Lys	Lys	-9.521	0.943	10.463	-0.127	0.195	0.322	32.495

7	Pro	Pro	-9.447	0.792	10.238	-0.128	0.191	0.319	32.095
6	Trp	Trp	-8.299	0.133	8.431	-0.112	0.155	0.267	31.577
5	AMP	AMP	-9.704	-0.706	8.997	-0.151	0.138	0.289	31.132
4	Tyr	Tyr	-9.056	0.293	9.349	-0.123	0.193	0.316	29.584
3	His	His	-9.307	0.503	9.811	-0.169	0.171	0.340	28.855
2	Met	Met	-9.062	0.145	9.207	-0.134	0.192	0.326	28.243
1	Arg	Arg	-9.176	0.558	9.734	-0.165	0.199	0.364	26.742

El AMP y sus interacciones con los AAs.

En la figura 1 se muestran tres diagramas de cajas y bigotes de 441 interacciones estudiadas (400 de combinaciones puras o proteínas y 41 interacciones óxido-reducción). Los dos primeros diagramas de izquierda a derecha, representan los resultados de los cálculos cuánticos de las interacciones de óxido-reducción de cada AA vs AMP. El tercer diagrama exhibe los cálculos de los AAs que secuenciados generan una proteína. Se observa que los tres diagramas están al mismo nivel en el eje “y”. Esta nivelación se interpreta como un equilibrio químico del AMP con los AAs de las proteínas y como un peligro para la secuenciación misma de los AAs. La oxidación es más agresiva, debido a que casi se encuentra al mismo nivel que los AAs secuenciados, aunque con potencia media alta.

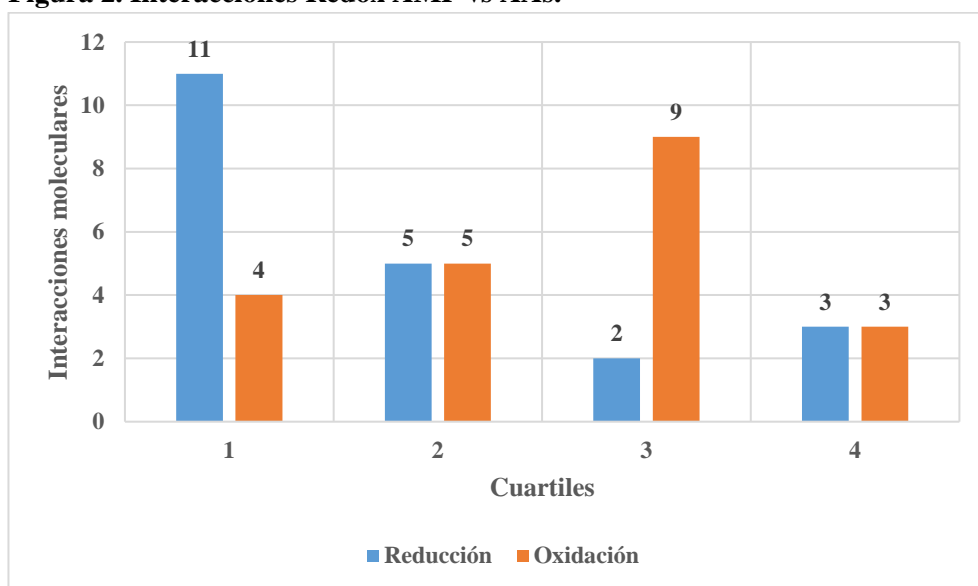
Figura 1. Diagrama de bigotes y cajas. Pozos cuánticos de las interacciones CTE vs AAs.



En la figura 2 se resume el número de interacciones por cuartiles. En el primer cuartil se agrupan las interacciones de afinidad más fuertes del AMP y luego va disminuyendo esta afinidad. El primer cuartil tiene 11 interacciones reductoras y 4 oxidantes. El segundo cuartil tiene 10 interacciones, 5 y 5. El tercer cuartil tiene 2 interacciones reductoras y 9 oxidantes. El cuarto cuartil 3 y 3, haciendo un total de 6 interacciones.

En total 41 interacciones 20 reductoras, 20 oxidantes y 1 que corresponde a la interacción de la sustancia AMP-AMP. Como se puede ver la mayoría de las interacciones se encuentran en los dos primeros cuartiles; sin embargo, el peligro no es tanto este fenómeno; sino que tanto reducción como oxidación se encuentran casi al mismo nivel que los AAs secuenciados como enzimas, receptores proteicos, etc. Por esa razón el AMP es muy tóxico, es decir, causa un caos cuando se encuentra con los AAs en cualquier forma.

Figura 2. Interacciones Redox AMP vs AAs.

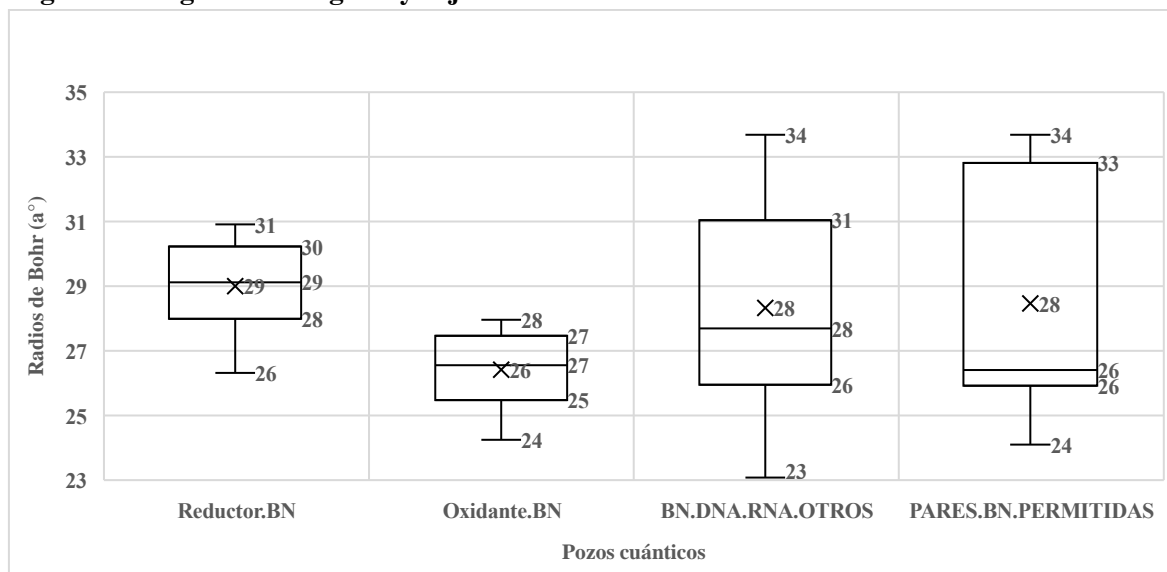


El AMP y sus interacciones con las BN, ADN y ARN.

En la figura 3, se muestran cuatro diagramas de cajas y bigotes. Los dos primeros (de izquierda a derecha) se refieren a las interacciones de óxido-reducción de las BN. El tercer diagrama se refiere a todas las BN solas o secuenciadas para ADN y ARN. En el cuarto diagrama se muestran solo los pares permitidos para los ácidos nucleicos.

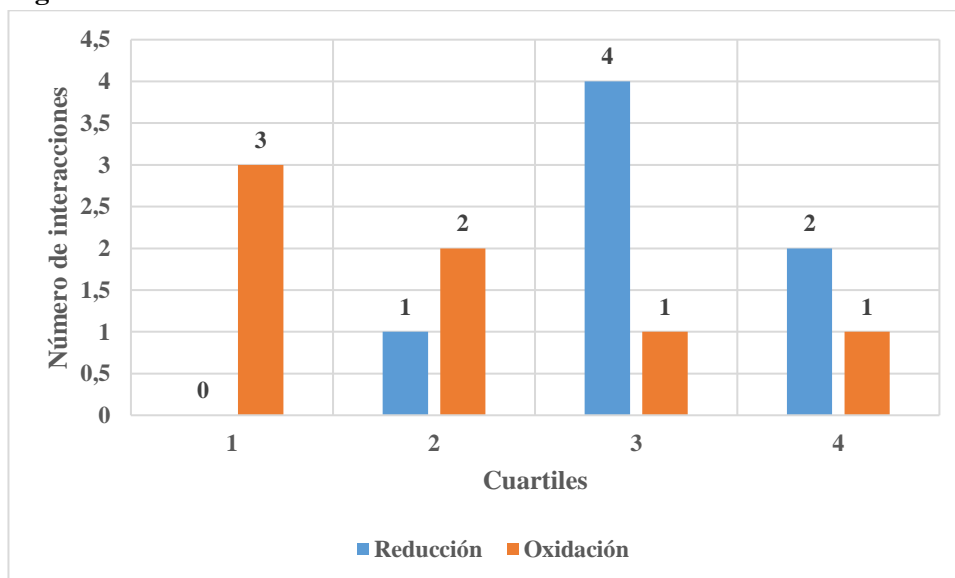
La caja más baja en el pozo cuántico es el grupo de interacciones oxidantes del AMP vs BN. Lo más peligroso es que, parte de estas interacciones oxidativas están en equilibrio químico con BN en cualquiera de sus formas. Se hace énfasis en que estas interacciones oxidativas, también entran en equilibrio con los pares de bases permitidas: C-G, A-T, A-U1 (cetónico), A-U2 (hidroxilado). En general, esta sustancia es mutagénica.

Figura 3. Diagrama de bigotes y cajas. Pozos cuánticos de las interacciones CTE vs BN.



En la figura 4, podemos observar un patrón parecido a las interacciones AAs vs AMP (figura 1); pero, el cuartil 1, solo tiene interacciones de oxidación. Este fenómeno hace al AMP más peligroso para las BN que para los AAs. Inclusive, puede llegar a reacciones químicas que produzcan mutación. Otra observación de peligro, es que las cajas 3 y 4 de oxidación alcanza a los pares permitidos para los ácidos nucleicos ADN y ARN.

Figura 4. Interacciones Redox AMP vs BNs.

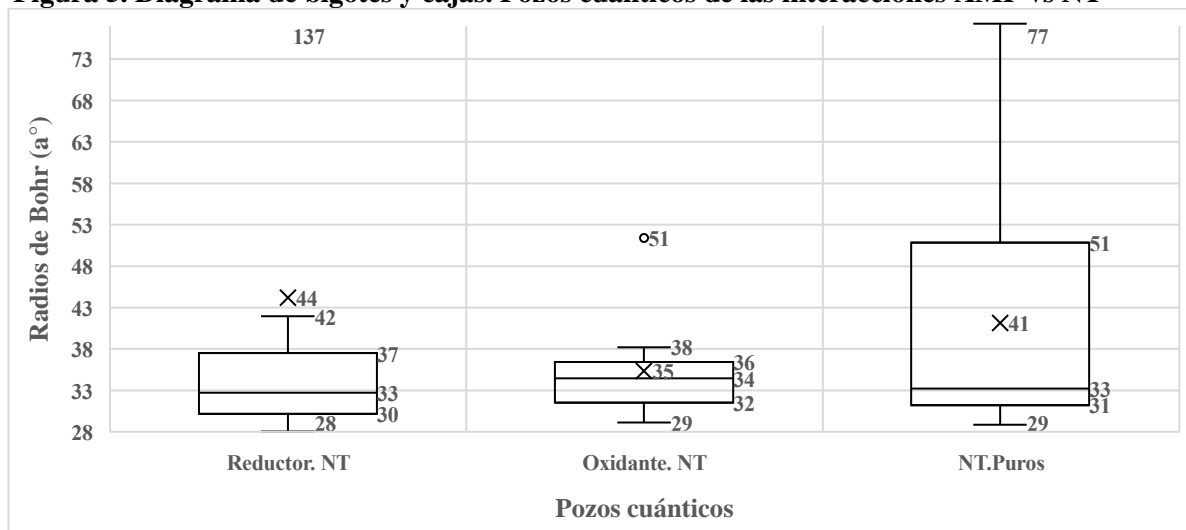


El AMP y sus interacciones con 9 NTs

En la figura 5, se presentan tres diagramas de cajas y bigotes de las interacciones del AMP y los NTs. De nuevo se puede observar el mismo patrón, el equilibrio químico de las interacciones óxido-

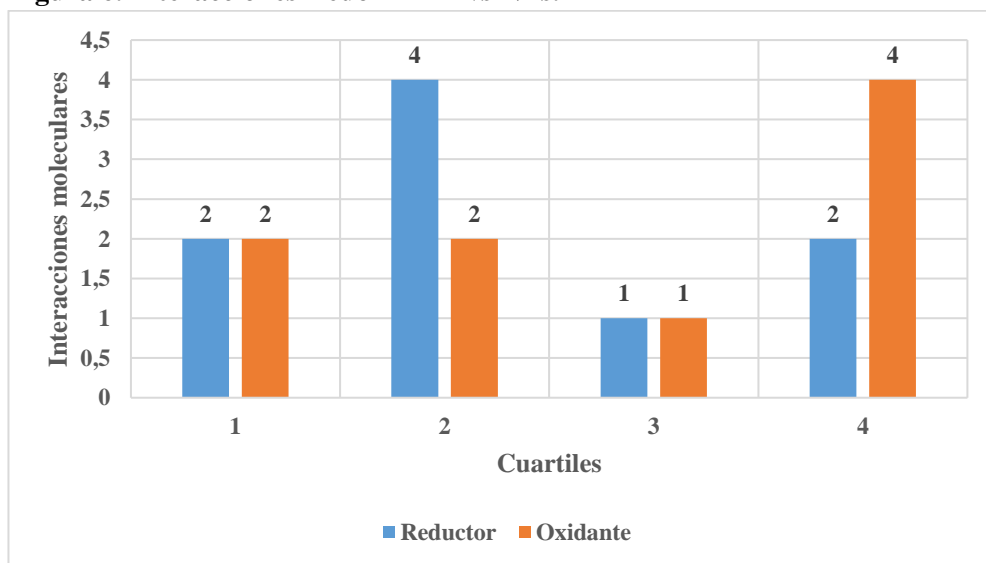
reducción. Todas las cajas se observan al mismo nivel en el pozo cuántico. Como se dijo anteriormente, este fenómeno implica un equilibrio químico y dinámico. Este equilibrio puede desestabilizar a cualquier cuerpo que tenga NTs. Los nueve NTs estudiados son: Adrenalina, Serotonina, Dopamina, GABA, Ácido Glutámico, Glicina, Histamina, Noradrenalina, Acetilcolina.

Figura 5. Diagrama de bigotes y cajas. Pozos cuánticos de las interacciones AMP vs NT



En la figura 6, se observa un histograma de las interacciones moleculares de los NT vs AMP. El patrón es el mismo que se presenta en los AAs y las BNs. En el primer y segundo cuartil hay más interacciones que en el tercero y cuarto juntos. Este fenómeno se interpreta igual que los otros dos. Los NTs entran en equilibrio químico y dinámico con la sustancia AMP. Este equilibrio desestabiliza a cualquiera de estos 9 NTs provocando problemas en los dos sistemas nerviosos.

Figura 6. Interacciones Redox AMP vs NTs.



In vivo. Laboratorio de agricultura.

Figura 7. Método 1. Mezcla



Antes del tratamiento



Después del tratamiento



24 horas después del tratamiento

Figura 8. Método 2. Por inmersión en la solución



Bañadas con AMP



Después del tratamiento



24 horas después del tratamiento

Figura 9. Lombrices después de ser tratadas con AMP



Bañadas con AMP y lavadas con agua limpia.



Después de este tratamiento



24 horas después del tratamiento.

En todos los casos, el resultado fue el mismo, en 24 horas las lombrices presentaban una degradación de la piel muy marcada, y descomposición de las miamas.

CONCLUSIONES

Objetivo

Demostrar in silico e in vivo de la toxicidad del AMP en lombrices *Eisenia fetida* S y el posible daño en el ser humano.

Hipótesis

Es probable que el AMP dañe las lombrices *Eisenia fetida* S en su propio hábitad y dañe de alguna forma al ser humano en sus tejidos biológicos, incluyendo posibles mutaciones.

Tesis o conclusión.

Se comprueba una toxicidad alta del AMP:

- a) por sus interacciones con los AAs, BNs y NT en su estado puro o de flotación en sus propios hábitad.
- b) En la secuenciación de los AAs (proteínas) y BN (ácidos nucleicos, ADN y ARN).
- c) Tratamiento in vivo.

Corolario. (hallazgos que no estaban contemplados en el objetivo)

El AMP es una sustancia de acción prolongada en los sistemas biológicos. Tabla 1 (lugar 5 en el pozo cuántico de los AAs en su estado puro).

Advertencias:

1. Este insecticida puede contaminar hasta el producto (todos los productos tienen ADN, ARN, AAs por lo menos).
2. Por esa misma razón contamina el medio ambiente donde se aplica.
3. Puede causar daños a los seres humanos si no se tiene cuidado al aplicar este insecticida AMP.

Agradecimientos.

A la Universidad Tecnológica de Tecamachalco por facilitar esta investigación.

Conflicto de intereses.

No hay conflicto de interés entre los coautores y la UTTECAM.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Abdelrahman, R. E., Hassan, M. S., Morgan, A. M., Ibrahim, M. A., & Hassanen, E. I. (2024). Acetamiprid induces cardiotoxicity in rats by dysregulating $\alpha 7$ nAChR and its downstream targets: The ameliorative role of resveratrol. *Food and Chemical Toxicology*, 191, 114892.
- Cando, L. E. C., Vaca, C. V. B., Cabezas, L. A. M., & Carrión, E. N. Q. (2024). Potencialidades de la Lombricultura, en la Educación Ambiental, para Optimizar el Aprendizaje de la Química Verde. *Polo del Conocimiento*, 9(2), 807-827.



- Carrasco Torrontegui, A., Pardo, R., Quispe, M., Aspaz, M., Cota, R., Bucini, G., ... & Mendéz, E. (2024). Acción colectiva para la transición agroecológica en el altiplano Boliviano. *L'Ordinaire des Amériques*, (232).
- Chen, H., Yang, Y., Ai, L., Li, L., Ming, R., & Lu, P. (2024). Bioconcentration, oxidative stress and molecular mechanism of the toxic effect of acetamiprid exposure on *Xenopus laevis* tadpoles. *Aquatic Toxicology*, 272, 106965.
- Delgado Jaya, M. J. (2024). Elaboración de compost a través de la lombricultura utilizando los desechos sólidos orgánicos del mercado privado de la ciudad de Macas.
- Doble, H. (2024). Estudio Computacional de la Contribución de las Subunidades del ADN a la Estructura Espacial de la (Doctoral dissertation, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla).
- González-Pérez, M. (2017). Quantum Theory of the Electron Transfer Coefficient. *International Journal of Advanced Engineering, Management and Science*, 3(10), 239932.
- Jiménez Halla, J. O. C. (2024). Aplicaciones de la química computacional al diseño molecular asistido por computadora. Repositorio de la Universidad de Guanajuato.
<http://repositorio.ugto.mx/handle/20.500.12059/12465>
- Li, Y., Lu, J., Song, X., Wang, Y., Li, Q., Pang, Y., & Gou, M. (2024). Conjoint transcriptomics and metabolomics analyses provide insights into the toxicity of acetamiprid to *Lethenteron reissneri* larvae. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 283, 116828.
- Moreno Inzunza, R. A. (2024). Modelado molecular de complejos homolépticos de Cu (I) con ligandos derivados de piridina y triazol para su uso en celdas solares sensibilizadas por colorante.
- Nieto Cortés, M. (2024). Propiedades químicas y reactividad de moléculas presentes en el medio interestelar aplicando técnicas de modelización molecular.
- Reyes Pérez, G. B. (2024). Evaluación de las características químicas del humus de lombriz roja californiana (*Eisenia fetida*) elaborado a partir de sustrato de pollinaza y estiércol bovino (Bachelor's thesis, Jipijapa-Unesum).
- Song, W., Du, W., Wang, Z., Xu, T., Liu, Z., & Bai, L. (2024). Signal amplification strategy based on target-controlled release of mediator for ultrasensitive self-powered biosensing of acetamiprid. *Talanta*, 281, 126844.



Valdés, M. G. M., Santiago, C. O. P., & Suarez, P. D. C. P. (2024). Evaluación de cuatro tipos de alimentación para la producción de lombriz California roja (*Eisenia fetida* Savigny, 1826). *Brazilian Journal of Animal and Environmental Research*, 7(4), e73775-e73775.

