

Aplicación de la Saponina *Sapindus Saponaria L.* como sustituto natural para desengrasantes comerciales

Francisco José Gurría Velázquez, Ana Sofía Quezada Zempoalteca

Universidad La Salle México, Facultad de Ciencias Químicas. Ciudad de México, México.

fj.gurriav@lasallistas.org.mx, as.qz@lasallistas.org.mx

Resumen. Los tensoactivos, moléculas presentes en la mayoría de los productos para la limpieza, se han denominado contaminantes emergentes del agua. Una alternativa al uso de tensoactivos sintéticos es la utilización de tensoactivos de origen natural. A partir de una revisión bibliográfica y por medio de Química Computacional, se realizó la evaluación de una molécula natural, así como cuatro derivados químicos de la misma para ser utilizados como alternativas a un tensoactivo sintético. A partir de esta evaluación, se observa que estos compuestos no cuentan con la misma eficacia que el tensoactivo tradicional, sin embargo, muestran un efecto favorable para la remoción de aceites de superficies metálicas. Este estudio brinda información importante para realizar un tamizado inicial de moléculas que puedan ser utilizados como potenciales activos en productos de limpieza, además que brindan información respecto a la estructura química ideal que las moléculas deben de poseer para lograr un efecto deseable.

Palabras Clave: Contaminación del agua, Contaminantes emergentes, Detergentes, Química Computacional.

1 Descripción de la problemática prioritaria abordada

La demanda de agua a nivel mundial aumenta a niveles alarmantes la Organización para la Cooperación y Desarrollo Económico (OCDE) estima que para el año 2050 un 40% de población mundial vivirá bajo estrés hídrico, provocando que la demanda de agua incremente en un 55%, además de que se espera que 240 millones de personas no tengan acceso a agua potable y 1,400 millones al saneamiento básico [1]. Utilizamos todos los días estos productos sin saber que sigilosamente se están convirtiendo en contaminantes de gran importancia para los cuerpos de agua, los cuales se les ha denominado “contaminantes emergentes” [2]. Los tensoactivos, son compuestos ampliamente utilizados en productos para la limpieza del hogar y en industrias como la alimentaria, la farmacéutica, la petroquímica y la cosmética, comienzan a adquirir preocupación por su alta demanda y en ocasiones baja biocompatibilidad y biodegradabilidad. Es por ello por lo que, es necesario el encontrar alternativas naturales que cuenten con la misma eficacia que productos sintéticos y así reducir verter este tipo de contaminantes al agua. Este proyecto se encuentra alineado directamente al Objetivo de Desarrollo Sostenible 6 de Agua Limpia y Saneamiento, enfocado a las metas 6.3. de “mejorar la calidad del agua reduciendo la contaminación, eliminando el vertimiento y minimizando la emisión de productos químicos y materiales peligrosos, reduciendo a la mitad el porcentaje de aguas residuales sin tratar y aumentando considerablemente el reciclado y la reutilización sin riesgos a nivel mundial” [3]

2 Objetivo

Investigar y evaluar, a través de estudios de Química Computacional, moléculas tensoactivas de origen natural que puedan ser utilizados como componentes presenciales en productos detergentes y desengrasantes de superficies metálicas.

3 Propuesta de solución

Los tensoactivos son moléculas presentes en muchos productos como jabones y desengrasantes, la mayoría de estos son componentes obtenidos de forma sintética a partir de derivados de petróleo. Cuentan con estructura “anfifílica”, es decir, que tienen la característica de tener una sección afín al agua (hidrofílica) y otra con afinidad al aceite (hidrofóbica). Esta propiedad les brinda a estas moléculas la capacidad de coexistir en las interfases entre el agua y el aceite disminuyendo la tensión superficial del agua. Son capaces de desplazar o transportar una fase en la otra y son ampliamente utilizados en diversos productos, especialmente en productos de limpieza ya que pueden actuar como emulsificantes y detergentes. Las propiedades que hacen útiles a los tensoactivos también son las responsables de hacerlos tan difíciles de remover de los cuerpos de agua, ya que la mayoría de estos compuestos son muy solubles en agua, y al formar estructuras como emulsiones o espumas, en conjunto con su baja biodegradabilidad, se vuelve muy complicado eliminarlos en plantas de tratamientos de agua. Debido a su uso masivo y a su complejidad de tratamiento, se han catalogado como parte de los “contaminantes emergentes” [4].

Se realizó una revisión bibliográfica y se seleccionó como molécula base la saponina proveniente de la planta *Sapindus saponaria*, la cual es un árbol originario de América de cuyas semillas se obtiene un extracto que se utiliza tradicionalmente como jabón. Sin embargo, estudios indican que, a partir de la cáscara de su fruto, y hojas contienen hasta 30% de activo [5]. Las saponinas pertenecen al grupo de los glicósidos, los cuales cuentan también una sección hidrofílica y una hidrofóbica, lo cual permite que, al igual que los tensoactivos, disminuyan la tensión superficial, formen espuma y retiren grasas y suciedad [6]. Además de presentar una biodegradabilidad y viabilidad económica prometedora. En el trabajo de Girón (2019) [7] se explica que a través de la medición de la demanda biológica y química de oxígeno (DBO y DQO), y avalado por la Organización para la Cooperación y Desarrollo Económico (OCDE), se puede evaluar la biodegradabilidad de los desengrasantes comerciales [1]. En la Tabla 1 se pueden observar los valores de DBO y DQO de soluciones acuosas de detergente y saponina reportadas por Cogollo (2008) [8]:

Tabla 1. DBO y DQO de soluciones de detergente y saponina [8]

Tipo de Prueba	Detergente convencional	Saponina <i>Sapindus saponaria</i>
DBO (mg _{o2} /L)	53.5	140
DQO (mg _{o2} /L)	1760	1440

La DBO es una medida del uso de oxígeno por componentes orgánicos en el agua, al ser menor en la saponina, implica que dicho producto no demanda oxígeno libre para oxidarse como lo hace el detergente comercial. Estos datos corroboran que la saponina es una alternativa más biodegradable que el detergente comercial estudiado. En cuanto a su viabilidad económica, la especie *Sapindus saponaria*, es un árbol con una ubicación geográfica favorecida (Sur de Estados Unidos hasta Brasil, habitando selvas secas y bosques de encino), tiene un proceso de crecimiento

relativamente rápido ya que a partir de su siembra en un lapso de 6 meses se pueden empezar a recolectar las frutas para la extracción de su semilla [9]. Finalmente, cuenta con un tiempo de vida en condiciones ambiente 1-3 meses y a una temperatura de 5 °C de 6-18 meses [10]. Por lo que sería una alternativa que no requeriría de grandes áreas de cultivo y se obtendría producto rápidamente. Un estudio reciente para la fabricación de un detergente líquido, indica que el 97.40% [11] de su composición podría estar compuesto por saponina, lo que nos otorga un margen de referencia para estimar la concentración de saponina requerida para un desengrasante. Finalmente, en referencia al uso de la planta, adicionalmente al uso de las semillas, tanto las flores como cortezas de tallo presentan aplicaciones medicinales que a larga podrían diversificar la comercialización de la *Sapindus saponaria*.

Se propusieron cuatro modificaciones a la estructura consistiendo en el cambio de un grupo funcional, con la finalidad de propiciar una mejor interacción con las superficies metálicas. En la Figura 1 se muestra la molécula de saponina con sus variaciones estructurales.

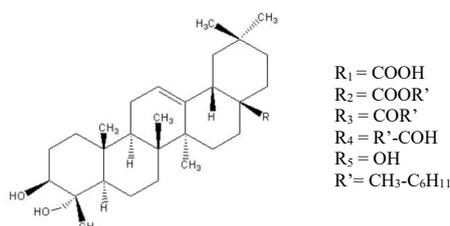


Figura 1. Estructura general de la saponina proveniente de *Sapindus saponaria* y sus variantes. Elaboración propia

Se realizó un análisis de energías de interacción entre las moléculas propuestas más el dodecil sulfato de sodio (SDS), tensoactivo ampliamente utilizado en productos detergentes, con una sección de politetrafluoroetileno (PTFE-teflón) como representativo de la superficie de baterías de cocina y ácido esteárico como molécula de grasa. El análisis se realizó utilizando el módulo de Mecánica Molecular del programa HYPERCHEM® y comprendió en la comparación de la diferencia de energía entre la interacción y la suma de las energías de las moléculas individuales como se muestra en la Figura 2.

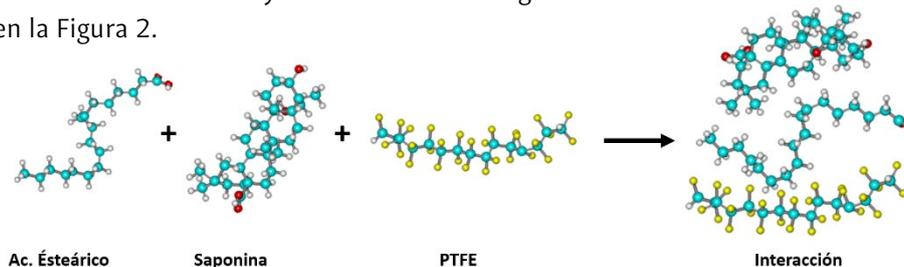


Figura 2. Sistema de interacción molecular. Elaboración propia

Se realiza una optimización geométrica utilizando un campo de fuerza MM+, se registran las energías calculadas y se evalúa el diferencial de energía a través de la ecuación:

$$\Delta E = E_{interaccion} - \sum_{n=1}^n E_{moléculas\ individuales} \quad (1)$$

El diferencial energético representa que tan fuertemente o no ocurrirían las interacciones entre moléculas. Un diferencial negativo, brinda indicio que la interacción se lleva a cabo de forma espontánea. Mientras más negativo es dicho valor, la interacción es más fuerte. El proceso de

detergencia se evaluó al comparar el diferencial energético entre la interacción PTFE-Ac.Esteárico-Tensoactivo y la interacción PTFE-Tensoactivo-Ac.Esteárico. La primera, representando una superficie cubierta de aceite (sucia) y la segunda en la que el tensoactivo ha desplazado al aceite. La representación se muestra en la Figura 3.

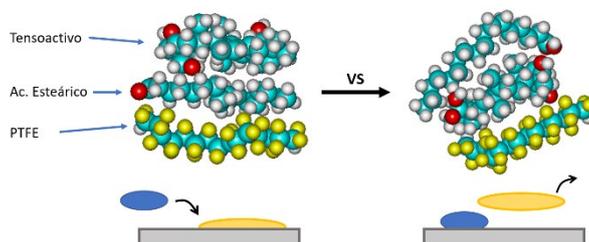


Figura 3. Modelo utilizado para representar fenómeno de detergencia. Elaboración propia.

4 Discusión de resultados e impactos obtenidos

Los resultados de la evaluación molecular se muestran en la Tabla 2. Todos los diferenciales de energía de interacción son negativos, lo cual implica que el modelo funciona adecuadamente para representar una superficie sucia y todos los diferenciales de energía del sistema final son negativos y de menor valor que el sistema inicial. Energéticamente, todos los sistemas tienen la capacidad de desplazar el aceite de las superficies metálicas. Para comparar los derivados de saponina, se pueden ver los valores en los dos estados en la Figura 4.

Tabla 2. Diferenciales energéticos de todos los sistemas

Sistema Inicial	ΔE (kcal/Å mol)	Sistema Final	ΔE (kcal/Å mol)
SDS	-64.85	SDS	-222.28
R₁ (saponina orig.)	-24.77	R ₁ (saponina orig.)	-37.39
R₂	-29.98	R ₂	-29.61
R₃	-29.03	R ₃	-31.10
R₄	-30.01	R ₄	-32.56
R₅	-18.65	R ₅	25.88

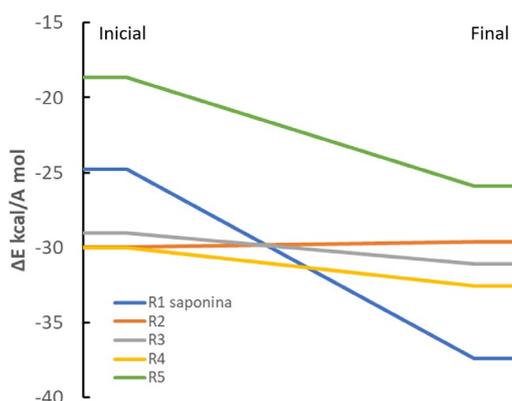


Figura 4. Comparación de estados inicial y final para saponina y sus derivados. Elaboración propia

Se puede apreciar que la saponina original es aquella que cuenta con una diferencia más marcada entre el estado inicial y final. Esto indica que es más factible utilizar el extracto original a realizar una modificación. La modificación que sigue es R₅ que corresponde a intercambiar el grupo funcional ácido al alcohol. Esto implicaría que la interacción entre la superficie y las moléculas se da

por puentes de hidrógeno y el incluir un grupo funcional con una cadena de hidrocarburos larga, afecta al proceso de interacción.

5 Conclusiones y perspectivas futuras

A partir del estudio realizado se observa que si bien, la saponina de *Sapindus saponaria* puede no ser tan eficaz como un tensoactivo sintético (SDS), sí cuenta con prospección para poder utilizarse como activo para productos desengrasantes de superficies metálicas. También que la acción de detergencia es más fuerte en la saponina natural que con las modificaciones de estados de oxidación. Esta propuesta brinda una alternativa a los tensoactivos tradicionales. La propuesta fue presentada ante personal de la compañía Colgate-Palmolive durante un proyecto de clase.

6 Agradecimientos

Al Dr. Tomás Eduardo Chávez Miyauchi y a las autoridades de la Facultad de Ciencias Químicas por brindarnos los recursos para el desarrollo del proyecto.

7 Referencias

1. Organización para la Cooperación y Desarrollo Económico (2015) Principios de Gobernanza del Agua. <https://www.oecd.org/cfe/regionaldevelopment/OECD-Principles-Water-spanish.pdf>
2. Gil, M.J., Soto, A.M., Usma, J.I., Gutierrez, O.D. (2012) Contaminantes Emergentes en Aguas, Efectos y Posibles Tratamientos. *Producción + Limpia*. 7(2), 52–73.
3. Organización de las Naciones Unidas (2015) Objetivos de Desarrollo Sostenible. <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/>
4. Brand-Romero, D.L. (2019) Efectos de los Tensoactivos en el Medio Ambiente. *Gerencia Ambiental y Desarrollo Sostenible Empresarial*. 1–15. <https://repository.usc.edu.co/handle/20.500.12421/623>
5. Mena-Valdés, L., Tamargo-Santos, B., Salas-Olivet, E., Plaza-Paredes, L.E., Blanco-Hernández, Y., Otero-González, A., Sierra-González, G. (2015) Determinación de Saponinas y otros metabolitos secundarios en extractos acuosos de *Sapindus saponaria* L. (jaboncillo). *Rev. Cubana Plant. Med.* 20(1), 106–116
6. Usiña, K. (2017) Análisis de las propiedades surfactantes de saponinas obtenidas de los frutos de *Sapindus Saponaria* L. [Trabajo de investigación presentado como requisito previo para la obtención del título de Químico Farmacéutico]. Universidad Central del Ecuador. 28-29
7. Girón, R. (2019) “Optimización de la biodegradabilidad de un desengrasante industrial recalcitrante” Instituto Politécnico Nacional. Centro Mexicano Para la Producción Más Limpia. Ciudad de México, México.
8. Cogollo, K. (2008) “Bondades del fruto del jaboncillo (*Sapindus saponaria*) como un detergente biodegradable”. Instituto Alexander Von Humboldt. Barranquilla, Colombia.
9. Ochoa, M. (2019, 21 agosto). Jaboncillo. Origen, Descripción, Variedades, Cultivo, Cuidados Y Usos. Plantas Y Flores. <https://plantasyflores.pro/jaboncillo/>
10. Alianza de Servicios de Información Agropecuaria (SIDALC) (1997) *Sapindus saponaria* sp. Nota Técnica 94. <http://orton.catie.ac.cr/repdoc/A0008s/A0008s94.pdf>
11. Arias F., Morquencho J., Sangama M., Sullcaray E. (2019) “Estudio de prefactibilidad para la elaboración del detergente líquido ecológico a base de *Sapindus Saponaria*” [Trabajo de Investigación para optar el Grado Académico de Bachiller en Ingeniería Ambiental]. Universidad San Ignacio de Loyola, Lima-Perú. 36