

Numerical determination of the solubility of vitamin C in various solvents, for selective extraction or for its incorporation in formulations oriented to care, welfare and health of the skin

Carlos Esteban Aristizábal-Alzate^a

^a *Facultad de Ingeniería, Instituto Tecnológico Metropolitano, Medellín, Colombia. carlosaristizabal207157@correo.itm.edu.co*

Received: December 19th, 2015. Received in revised form: March 13th, 2016. Accepted: July 18th, 2016.

Abstract

Vitamin C has excellent antioxidant properties and its use in topical formulations brings many benefits to the skin. For these reasons and the strong global trend to develop natural products base, the industry uses fruit pulps rich in this component for the development of products for the care and welfare of the skin. This article focuses on determining the Hansen Parameters of this vitamin, which are found by the use of group contribution methods then compare them with the same parameters of solvents or mixtures thereof and so, it could estimate numerically which or what would be the best solvents for extraction of the organic compound of a biomass and/or for incorporation into pharmaceutical, cosmeceutical, cosmetic formulations, among others.

Keywords: Vitamin C; Solvent; Hansen parameters; Group contribution method; Solubility

Determinación numérica de la solubilidad de la vitamina C en diferentes solventes, para la extracción selectiva o para la incorporación en formulaciones orientadas al cuidado, bienestar y salud de la piel

Resumen

La Vitamina C posee excelentes propiedades antioxidantes y su uso en formulaciones de uso tópico trae muchos beneficios para la piel. Por estas razones y la marcada tendencia a nivel mundial de desarrollar productos de base natural, la industria utiliza pulpas de fruta ricas en este componente para la formulación de productos para el cuidado y bienestar de la piel. El presente artículo se enfoca en determinar los Parámetros de Hansen de esta vitamina, los cuales son hallados mediante métodos de contribución de grupos, para luego compararlos con los mismos parámetros de solventes o mezclas de ellos y así, se podrían estimar numéricamente cual o cuales serían los mejores solventes para la extracción de este compuesto orgánico de una biomasa y/o para su incorporación en formulaciones farmacéuticas, cosmeceúticas, cosméticas, entre otras.

Palabras clave: Vitamina C; Solvente; Parámetros de Hansen; Método de Contribución de Grupos; Solubilidad.

1. Introducción

La Vitamina C, enantiómero L del ácido ascórbico o antiescorbútica, cuya estructura molecular puede observarse en la Fig. 1, es un compuesto orgánico con un peso molecular de 176,12 g/mol, que tiene excelentes propiedades antioxidantes [1]

y se encuentra en cantidades apreciables en diferentes frutas, como por ejemplo en la *Psidium gajaba L* (guayaba), con un contenido que oscila entre 78,2 y 268,7 mg de ácido ascórbico por cada 100 g de fruta fresca [2]. Es por esta razón y la marcada tendencia a nivel mundial de desarrollar productos de base natural [3], que en la industria del cuidado y bienestar de la piel,

How to cite: Aristizábal-Alzate, C. E. Determinación numérica de la solubilidad de la vitamina C en diferentes solventes, para la extracción selectiva o para la incorporación en formulaciones orientadas al cuidado, bienestar y salud de la piel. DYNA 83 (199) pp. 191-1

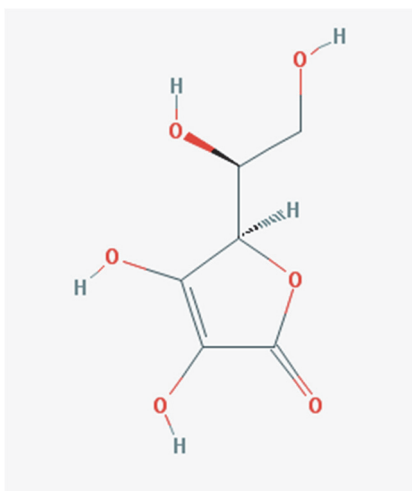


Figura 1. Estructura química de la Vitamina C
Fuente: [7].

se utilizan pulpas de fruta ricas en este componente, como lo son el limón verde, la naranja dulce, la guayaba, la toronja y el pomelo, para la formulación de productos cosméticos, dermocosméticos y cosmocéuticos, cuya funcionalidad permita tener una piel más radiante, sana [4-6] y protegida de los radicales libres, los cuales pueden causar envejecimiento, mutaciones o cáncer [1].

En cuanto a la solubilidad de este compuesto en diferentes solventes, se menciona su solubilidad en el agua. Sin embargo, no se dice de cuanto a pesar de ser un compuesto tan usado en las industrias anteriormente mencionadas. Además, este tipo de propiedades por lo general no son reportadas en la literatura científica, ya que puede ser muy costoso o difícil estimarlas [8-10], lo cual hace que los métodos de estimación numérica de propiedades físico-químicas sean de gran utilidad [9], [10].

Este artículo se enfoca en determinar numéricamente el grado de solubilidad de la Vitamina C en diferentes solventes y en mezclas de ellos, ya que se hace necesario utilizar el solvente correcto a la hora de extraer o de incorporar este compuesto en formulaciones eficaces y seguras para el cuidado, bienestar y salud de la piel [11].

Este análisis partirá del cálculo de algunas propiedades necesarias para determinar los parámetros de Hansen de la Vitamina C por métodos de contribución de grupos, para luego compararlos con los parámetros de Hansen de algunos solventes y mezclas de estos, tales como el metanol, etanol, entre otros, y de esta forma determinar numéricamente cual es el solvente o mezcla de solventes más adecuada para extraer este activo de una biomasa o como vehículo en una formulación cosmética, dermocosmético, entre otras.

2. Metodología

2.1. Método de contribución de grupos

En los métodos de Contribución de Grupos, la propiedad de un componente es una función de los parámetros estructuralmente dependientes, los cuales se determinan a su vez como una función de la frecuencia de los grupos que representan

a las moléculas y sus contribuciones [8,10,12]. El rango de aplicación y la fiabilidad de estos métodos depende de una serie de factores, como por ejemplo; la definición de los grupos utilizados para representar la estructura del componente puro, el modelo para calcular las propiedades, entre otros [8].

Los métodos de representación molecular y la contribución de cada grupo son los presentados por *Hukkerikar y col. (2012)*; Regresión por Etapas y Regresión Simultánea. Sin embargo, se seleccionará Regresión Simultánea, ya que en los análisis y comparación de los dos métodos hechos por esta referencia, se concluye que este presenta una mejora en el rendimiento en comparación con el método de Regresión por Etapas.

Por otro lado, el modelo de predicción de las propiedades que será utilizado, se ilustra en la ec. (1), la cual es presentada también por *Hukkerikar y col. (2012)* y *Marrero y Gani (2001)*.

$$f(x) = \sum NiCi + w \sum MjDj + z \sum EkOk \quad (1)$$

Donde $f(X)$ es una función de la propiedad X y puede contener parámetros ajustables del modelo adicionales (constantes universales), dependiendo de la propiedad en cuestión. En la ec. (1), Ci es la contribución del grupo de primer orden de tipo- i que se produce Ni veces, Dj es la contribución del grupo de segundo orden del tipo j que ocurre Mj veces y Ek es la contribución del grupo de tercer orden de tipo- k que tiene Ok ocurrencias en un componente. La w y la z toman el valor de 1, si la molécula tiene representación en el segundo orden y tercer orden respectivamente, y de 0 si no lo tienen.

La propiedad que será utilizada para medir el grado de exactitud que tienen el método de regresión y el modelo de predicción de las propiedades, será el Punto de Fusión de la Vitamina C pura, ya que este dato está disponible en varias referencias científicas y bases de datos especializadas disponibles, como por ejemplo en la referencia [7].

La ec. (2) es suministrada por *Hukkerikar y col. (2012)* y es la que permite calcular numéricamente el Punto de Fusión a partir del resultado de la ec. (1) para esta propiedad.

$$f(x) = \exp \left[\frac{Tm}{Tmo} \right] \quad (2)$$

Donde $f(X)$ es el resultado del modelo de cálculo de propiedades para el Punto de Fusión, Tm es el Punto de Fusión a calcular en K y Tmo es un parámetro que toma el valor de 143,5706 K para este caso.

La ec. (3) sirve para determinar cuantitativamente el error relativo, ER , y el grado de precisión de este método para el cálculo de las propiedades de la Vitamina C, que no se encuentran reportadas en la literatura.

$$ER = \exp \left[\frac{X_{exp} - X_{cal}}{X_{exp}} \right] \quad (3)$$

En donde X es la Temperatura de Fusión de la Vitamina C y los superíndices $exp.$ y $cal.$, son respectivamente la hallada experimentalmente y la calculada con estos métodos numéricos.

Para el cálculo numérico de los parámetros de solubilidad de Hansen, los cuales serán explicados a continuación, se utilizarán las siguientes ecuaciones:

$$\delta_D = \sum NiCi + w \sum MjDj + z \sum EkOk \quad (4)$$

$$\delta_p = \sum NiCi + w \sum MjDj + z \sum EkOk \quad (5)$$

$$\delta_H = \sum NiCi + w \sum MjDj + z \sum EkOk \quad (6)$$

En donde δ_i [MPa^{1/2}] es el Parámetro de Hansen de Dispersión, de Interacciones Polares y de los Enlaces de Hidrogeno respectivamente, y el otro lado de la igualdad es la función presentada en la ec. (1) de la propiedad δ_i , de acuerdo a los valores de contribución de grupos que presente la Vitamina C para este caso. Para determinar numéricamente los Parámetros de Hansen, tan solo es necesario hallar el lado derecho de las ec. (4)-(6), sin la necesidad de otras expresiones matemáticas.

2.2. Parámetros de solubilidad de Hansen (PSH)

Los Parámetros de Solubilidad de Hansen, PSH, han demostrado ser una forma eficaz y práctica para entender asuntos relacionados con la solubilidad, la dispersión, la difusión, la cromatografía, haciendo predicción compatibilidad de polímeros, la resistencia química, la velocidad osmótica, entre otros [1,13]. Desde laboratorios académicos hasta las aplicaciones industriales se han valido de la idea clave que los solutos de cualquier tipo, disolventes, polímeros, etc. pueden ser bien caracterizados por sólo tres subparámetros; interacciones débiles o de dispersión (δ_d), interacciones polares (δ_p) y a los enlaces de hidrógeno (δ_h), los cuales son conocidos como los Parámetros de Hansen. Este modelo propuesto por Van Krevelen [1], se relaciona con el parámetro de Hildebrand mediante la raíz cuadrada de la suma de los cuadrados de estos [1,9,14-16]. Además, este tratamiento permite observar la influencia de los diferentes tipos de interacciones intermoleculares presentes en el proceso de disolución, particularmente sobre las interacciones soluto-solvente [16].

Solutos y solventes con similares PSH tienen afinidad, es decir, cuando hay similitud entre cada uno de los términos correspondientes al compuesto y al disolvente, se producirá la disolución [1,10,14,15]. Para explicar matemáticamente está afirmación es utilizada la siguiente expresión

$$Ra = \sqrt{4(\delta_{D2} - \delta_{D1})^2 + (\delta_{p2} - \delta_{p1})^2 + (\delta_{H2} - \delta_{H1})^2} \quad (7)$$

Donde Ra [MPa^{1/2}] es la distancia en el espacio tridimensional del parámetro de solubilidad entre el soluto y el solvente, δ_i es el Parámetro de Hansen y el subíndice 1 y 2 denotan al soluto y al solvente respectivamente. Esa distancia debe ser tan pequeña como sea posible (RA~0), si se desea que se de la disolución [14,15,17]. Sin embargo, existe una regla heurística o empírica suministrada por *Durkee (2014)*, la cual dice que hasta un Ra máximo de 8 se daría una buena disolución entre el Solutos y el Solvente.

Cuando se tiene una mezcla de solventes para disolver el soluto, los Parámetros de Hansen de la mezcla se definen mediante la ec. (8).

$$\delta_{mezcla, i} = \left(\sum (v_i * (\delta_i)^2) \right)^{1/2} \quad (8)$$

Donde δ_{mezcla} es el Parámetro i de Hansen de la mezcla, δ es el valor del Parámetro de Hansen del componente i y v es la fracción volumétrica del solvente i en la mezcla.

Aunque los Parámetros de Hansen ayudan determinar teóricamente el grado solubilidad o de afinidad de una sustancia por un solvente, no determinan la solubilidad cuantitativa de estos.

3. Resultados y discusión

3.1. Descripción de la molécula de la Vitamina C

De acuerdo a la metodología planteada por *Hukkerikar y col. (2012)*, las moléculas orgánicas pueden ser caracterizadas por tres ordenes; el primero proporciona una aproximación inicial que se ve mejorada en el segundo nivel y más refinada (si es necesario) en el tercer nivel. El objetivo final de este esquema de estimación multinivel es mejorar la precisión, la fiabilidad y el rango de aplicación de una serie de importantes propiedades de los componentes puros [8,12].

A continuación, en las Tablas 1 y 2 se ilustra la caracterización de los grupos funcionales de primer y segundo orden para la Vitamina C, de acuerdo a la metodología, reglas y datos suministrados por *Hukkerikar y col. (2012)*. También en estas tablas, se presenta la contribución, ocurrencia o número de veces que se repite un grupo de determinado orden (primero, segundo o tercero) en la molécula.

Según está referencia, se debe establecer una caracterización del Tercer Orden. Sin embargo, en este caso no se hace necesario, ya que la molécula se encuentra completamente descrita con los grupos del Primer y Segundo Orden, mencionados en las tablas anteriores.

3.2. Punto de fusión

Con los valores totales de la contribución de cada orden y grupo, plasmadas en las Tablas 3 y 4, se procedió a calcular el Punto de Fusión con las ec. (2)-(3), se estimó el Porcentaje de Error de este valor con el reportado por la referencia [7]. Estos valores se encuentran ilustrados en la Tabla 5.

Tabla 1.
Caracterización del Primer Orden para la Vitamina C

Número	Grupo	Contribución (Ocurrencia)
2	CH2	1
29	OH	4
169	CH (cyclic)	1
170	C (cyclic)	3
173	C-C(cyclic)	1
179	O (cyclic)	1
180	CO (Cyclic)	1

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 2.
Caracterización del Segundo Orden para la Vitamina C

Número	Grupo	Contribución (Ocurrencia)
16	CHOH	1
21	CHmOHCHnOH	1
78	CHcyclic-CH	1
101	Ccyc-OH	2

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 3.

Determinación de la Contribución de Grupos del Primer Orden para el Punto de Fusión

Número	Grupo	Contribución (Ocurrencia)	Tm1	Tm1xCont
2	CH2	1	0,30	0,30
29	OH	4	3,24	12,97
169	CH (cyclic)	1	-0,13	-0,13
170	C (cyclic)	3	0,13	0,40
173	C--C(cyclic)	1	1,07	1,07
179	O (cyclic)	1	1,35	1,35
180	CO (Cyclic)	1	3,36	3,36
Total			19,31	

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 4.

Determinación de la Contribución de Grupos del Segundo Orden para el Punto de Fusión

Número	Grupo	Contribución (Ocurrencia)	Tm2	Tm2xCont
16	CHOH	1	0,172	0,172
21	CHmOHCHnOH	1	0,022	0,0219
78	CHcyclic-CH	1	-0,355	-0,355
101	Ccyc-OH	2	0,846	1,69
Total			1,53	

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 5.

Punto de Fusión Calculado y Porcentaje de error

Punto de Fusión Real (K)	463,15
Punto de Fusión Calculado (K)	437,61
% Error	5,51%

Fuente: Elaboración propia.

Este resultado da entender que el modelo matemático y la caracterización de la molécula realizada en el presente artículo, se acerca mucho a la realidad, ya que hay una diferencia de tan solo el 5,51% entre el valor del punto de fusión real y el calculado. Por lo tanto, se procederá a hacer uso de esta metodología y la representación del primer y segundo orden de la Vitamina C, para calcular los parámetros de Hansen de esta molécula.

3.3. Parámetros de Hansen

Los parámetros de Hansen son determinados para el primer y segundo orden siguiendo la misma metodología que para el punto de fusión, tal y como se ilustra en las Tablas 6 y 7.

Tabla 6.

Determinación de la Contribución de Grupos del Primer Orden para los Parámetros de Hansen

Núm.	Grupo	Cont. (Ocurr.)	δd	$\delta dxCont$	δp	$\delta pxCont$	δh	$\delta hxCont$
2	CH2	1	0,002	-0,002	-0,17	-0,17		-0,22
29	OH	4	8,05	32,20	5,24	20,95		47,20
169	CH (cyclic)	1	-3,69	-3,69	-3,21	-3,21		-0,52
170	C (cyclic)	3	10,22	-30,67	-2,62	-7,86	3	-7,90
173	C--C (cyclic)	1	-7,56	-7,56	-7,28	-7,28		-17,01
179	O (cyclic)	1	4,10	4,10	3,19	3,19	2,80	2,80
180	CO (Cyclic)	1	3,72	3,72	6,54	6,54	2,77	2,77
Total			-1,90	Total	12,17	Total	27,13	

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 7.

Determinación de la Contribución de Grupos del Segundo Orden para los Parámetros de Hansen

Núm.	Grupo	Cont. (Ocurr.)	δd	$\delta dxCont$	δp	$\delta pxCont$	δh	$\delta hxCont$
16	CHOH	1	0,04	0,04	0,12	0,12	0,62	0,62
21	CHmOHCHnOH	1	0,17	0,17	-1,95	-1,95	-3,22	-3,22
78	CHcyclic-CH	1	-3,40	-3,40	-2,10	-2,10	-1,53	-1,53
101	Ccyc-OH	2	0,19	0,38	0,88	1,75	-1,62	-3,23
Total			-2,81	Total	-2,18	Total	-4,12	

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 8.

Parámetros de Hansen Calculados para la Vitamina C

Dispersión (δd)	Polar (δp)	Enlaces de hidrógeno (δh)
-4,71	10,00	23,01

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 9.

Determinación Numérica de la Solubilidad de la Vitamina C en Diferentes Solventes Puros

Componente	δd	δp	δh	Ra
Acetona	15,50	10,40	7,00	43,47
Terbutanol	15,20	5,10	14,70	40,96
n-Propanol	16,00	6,80	17,40	41,91
Etanol	15,80	8,80	19,40	41,19
Metanol	15,10	12,30	22,30	39,69
Agua	15,50	16,00	42,30	45,18
Acetato de etilo	15,80	5,30	7,20	44,20
Ácido acético	14,50	8,00	13,50	39,62
Benceno	18,40	0,00	2,00	51,74
Hexano	14,90	0,00	0,00	46,55
D-Limoneno	16,60	0,60	0,00	49,33
Tolueno	18,00	1,40	2,00	50,77
Aceite mineral	14,50	0,00	0,00	45,88

Fuente: Elaboración propia.

Haciendo uso de las ec. (4)-(6), y los datos plasmados en la dos tablas anteriores, son calculados los Parámetros de Hansen, los cuales son presentados en la Tabla 8.

3.4. Solubilidad de la Vitamina C en diferentes solventes puros

A continuación, en la Tabla 9 son presentados algunos solventes utilizados en la industria química en general con sus respectivos Parámetros de Hansen, los cuales son reportados en la referencia [17]. Con ayuda de la ec. (7) se calcula el Ra, el cual determina el grado de afinidad entre cada uno de los solventes presentados en dicha tabla y la Vitamina C, de acuerdo a la explicación ya dada.

Analizando la información de la tabla anterior, se evidencia que los solventes más afines a la Vitamina C son; el ácido acético, metanol, terbutanol, etanol y el n-propanol. Cabe resaltar, que aunque el agua no aparece en estos resultados como un solvente muy afin a la Vitamina C, si se encuentra reportada en la literatura como uno para solubilizar esta vitamina. Es por esta razón, que en el presente estudio se tiene en cuenta el análisis de la afinidad o el grado de solubilidad entre el ácido ascórbico y mezclas de los solventes con mayor afinidad ya seleccionados, y el agua.

3.5. Solubilidad de la Vitamina C en diferentes mezclas de solventes

A continuación, son ilustrados en las Tablas 10-14 el grado de solubilización de la Vitamina C en diferentes mezclas de solventes. Como ya se explicó, este grado está determinado por el valor de Ra, el cual entre más cercano a cero, el solvente o la mezcla de solventes tendrán mayor afinidad por el soluto estudiado, en este caso la Vitamina C.

El respectivo parámetro de Hansen de la mezcla es calculado utilizando la ec. (8). Posteriormente con los δ_i de la mezcla, se hace uso de la ec. (7) para calcular el Ra o el grado de solubilización, o de afinidad que existe entre la mezcla de solventes y la Vitamina C.

Tabla 10.
Solubilidad de la Vitamina C en una mezcla de Ácido Acético y Agua

Fracción Volumétrica del Ácido acético	δd	δp	δh	Ra
0,00	18,10	17,10	16,90	46,57
0,05	17,94	16,76	16,75	46,22
0,10	17,77	16,42	16,59	45,87
0,15	17,61	16,07	16,43	45,52
0,20	17,44	15,71	16,28	45,16
0,25	17,27	15,34	16,12	44,81
0,30	17,10	14,96	15,96	44,46
0,35	16,93	14,58	15,79	44,10
0,40	16,75	14,18	15,63	43,75
0,45	16,58	13,77	15,46	43,40
0,50	16,40	13,35	15,29	43,04
0,55	16,22	12,91	15,12	42,69
0,60	16,04	12,46	14,95	42,33
0,65	15,85	12,00	14,78	41,98
0,70	15,67	11,51	14,60	41,63
0,75	15,48	11,00	14,43	41,28
0,80	15,29	10,47	14,25	40,94
0,85	15,09	9,91	14,06	40,60
0,90	14,90	9,32	13,88	40,27
0,95	14,70	8,68	13,69	39,94
1,00	14,50	8,00	13,50	39,62

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 11.
Solubilidad de la Vitamina C en una mezcla de Etanol y Agua

Fracción Volumétrica del Etanol	δd	δp	δh	Ra
0,00	18,10	17,10	16,90	46,57
0,05	17,99	16,78	17,03	46,29
0,10	17,88	16,46	17,17	46,01
0,15	17,77	16,13	17,30	45,74
0,20	17,66	15,79	17,43	45,46
0,25	17,55	15,45	17,56	45,18
0,30	17,44	15,10	17,69	44,91
0,35	17,33	14,74	17,81	44,63
0,40	17,22	14,37	17,94	44,35
0,45	17,10	13,99	18,07	44,08
0,50	16,99	13,60	18,19	43,81
0,55	16,87	13,20	18,32	43,53
0,60	16,76	12,78	18,44	43,26
0,65	16,64	12,36	18,56	42,99
0,70	16,52	11,91	18,69	42,72
0,75	16,41	11,45	18,81	42,46
0,80	16,29	10,97	18,93	42,19
0,85	16,17	10,47	19,05	41,94
0,90	16,04	9,95	19,16	41,68
0,95	15,92	9,39	19,28	41,43
1,00	15,80	8,80	19,40	41,19

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 12.
Solubilidad de la Vitamina C en una mezcla de Metanol y Agua

Fracción Volumétrica del Metanol	δd	δp	δh	Ra
0,00	18,10	17,10	16,90	46,57
0,05	17,96	16,89	17,21	46,22
0,10	17,82	16,68	17,52	45,88
0,15	17,68	16,47	17,82	45,54
0,20	17,54	16,25	18,11	45,20
0,25	17,40	16,04	18,40	44,86
0,30	17,26	15,81	18,69	44,52
0,35	17,11	15,59	18,97	44,18
0,40	16,96	15,36	19,24	43,83
0,45	16,82	15,13	19,52	43,49
0,50	16,67	14,90	19,79	43,15
0,55	16,52	14,66	20,05	42,81
0,60	16,37	14,41	20,31	42,46
0,65	16,21	14,17	20,57	42,12
0,70	16,06	13,92	20,83	41,77
0,75	15,90	13,66	21,08	41,43
0,80	15,75	13,40	21,33	41,08
0,85	15,59	13,13	21,58	40,73
0,90	15,43	12,86	21,82	40,39
0,95	15,26	12,58	22,06	40,04
1,00	15,10	12,30	22,30	39,69

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 13.
Solubilidad de la Vitamina C en una mezcla de Etanol y Ácido Acético

Fracción Volumétrica del Etanol	δd	δp	δh	Ra
0,00	14,50	8,00	13,50	39,62
0,05	14,57	8,04	13,86	39,67
0,10	14,64	8,08	14,20	39,72
0,15	14,70	8,13	14,54	39,78
0,20	14,77	8,17	14,87	39,84
0,25	14,84	8,21	15,19	39,90
0,30	14,90	8,25	15,51	39,97
0,35	14,97	8,29	15,82	40,04
0,40	15,03	8,33	16,12	40,11
0,45	15,10	8,37	16,42	40,19
0,50	15,16	8,41	16,71	40,27
0,55	15,23	8,45	17,00	40,35
0,60	15,29	8,49	17,28	40,44
0,65	15,36	8,53	17,56	40,52
0,70	15,42	8,57	17,84	40,61
0,75	15,49	8,61	18,11	40,70
0,80	15,55	8,65	18,37	40,80
0,85	15,61	8,69	18,63	40,89
0,90	15,68	8,72	18,89	40,99
0,95	15,74	8,76	19,15	41,09
1,00	15,80	8,80	19,40	41,19

Fuente: Elaboración propia.

De acuerdo a los resultados de las Tablas 10-13, se puede inferir que las mezclas de los solventes allí establecidas en cualquier proporción, no solubilizarían la Vitamina C tan bien como los respectivos componentes puros. Por tanto, el uso de cada mezcla como solvente para la extracción o como vehículo en formulaciones cosméticas y farmacéuticas queda descartado.

Se puede evidenciar a través del análisis de la tabla anterior, que una mezcla que comprenda un 0,55 de Ácido Acético y un 0,45 de Metanol en fracción volumétrica, tiene mayor afinidad por la Vitamina C que cualquier solvente puro o mezclas de ellos seleccionados en el presente artículo. Sin embargo, se debe tener en cuenta que para las aplicaciones finales descritas en el presente artículo, el Metanol es considerado tóxico para su uso en productos de uso humano.

Tabla 14.
Solubilidad de la Vitamina C en una mezcla de Ácido Acético y Metanol

Fracción Volumétrica del Ácido acético	δd	δp	δh	Ra
0,00	15,10	12,30	22,30	39,69
0,05	15,07	12,12	21,94	39,63
0,10	15,04	11,94	21,58	39,57
0,15	15,01	11,76	21,21	39,52
0,20	14,98	11,57	20,84	39,47
0,25	14,95	11,38	20,46	39,42
0,30	14,92	11,18	20,07	39,39
0,35	14,89	10,99	19,67	39,35
0,40	14,86	10,79	19,27	39,33
0,45	14,83	10,58	18,86	39,30
0,50	14,80	10,38	18,43	39,29
0,55	14,77	10,16	18,00	39,28
0,60	14,74	9,95	17,56	39,28
0,65	14,71	9,72	17,10	39,29
0,70	14,68	9,50	16,64	39,30
0,75	14,65	9,26	16,16	39,33
0,80	14,62	9,03	15,66	39,36
0,85	14,59	8,78	15,15	39,41
0,90	14,56	8,53	14,62	39,46
0,95	14,53	8,27	14,07	39,54
1,00	14,50	8,00	13,50	39,62

Fuente: Elaboración propia.

Aunque un estudio numérico llevado a cabo por *Park y col. (2010)* arrojó como resultado que los mejores solventes para solubilizar la Vitamina C, son el hidroperóxido de metilo y la Urea-R, el método de contribución de grupos utilizado por los autores no es tan completo y cercano a la realidad como el utilizado en el presente artículo y propuesto por *Hukkerikar y col. (2012)* y *Marrero y Gani (2001)*, ya que *Park y col. (2010)* solo contemplan el aporte del grupo funcional *i* para hallar el valor numérico de la propiedad *j*, y no contemplan las interacciones de los diferentes grupos funcionales que componen la molécula de la Vitamina C y como estas afectan el valor de las diferentes propiedades físico-químicas determinadas mediante modelos numéricos.

4. Conclusiones

El cálculo de la solubilidad de la Vitamina C en diferentes solventes y mezclas de ellos son presentados en el presente artículo, gracias al uso de los Parámetros de Hansen de este compuesto orgánico, los cuales fueron determinados con la ayuda de métodos de contribución de grupos. Estos parámetros son calculados numéricamente, por lo que son una mera aproximación de la realidad, así que deben ser usados como una guía a la hora de seleccionar el solvente correcto para extraer esta Vitamina de una biomasa, incorporarla en una formulación cosmética o farmacéutica y/o entre otras aplicaciones relacionadas.

De acuerdo a los resultados ilustrados en el actual estudio, los solventes puros que presentan un mayor grado de afinidad por la Vitamina C o el Ácido Ascórbico, son el Metanol y el Ácido Acético. En cuanto a la mezcla de solventes, se puede decir que esta, en una fracción volumétrica aproximada del 0,55 de Ácido Acético y un 0,45 de metanol, daría un mayor grado de afinidad por la Vitamina C que cualquier solvente o mezcla de ellos aquí seleccionados. Sin embargo, lo que se pretende con el estudio es brindar herramientas que permitan

seleccionar el solvente(s) para extraer este compuesto orgánico y/o incorporarlo en formulaciones orientadas al bienestar, salud y belleza de la piel, por lo tanto, no se recomienda el uso de metanol, ya que su uso se encuentra restringido para estos fines, tal y como se evidencia en el Anexo III/52 del COSING; base de datos de ingredientes utilizados en la industria cosmética de la Comunidad Europea. Como otras alternativas se recomendaría el uso de Ácido Acético y Etanol para tales propósitos.

Un futuro estudio complementario a este, sería el de llevar a cabo pruebas y análisis de laboratorio sobre la solubilidad de la Vitamina C y los solventes o mezclas de ellos con los cuales presento numéricamente mayor afinidad o grado de solubilidad en el presente estudio, para que de esta forma se valide el modelo implementado y pueda en cierta medida extrapolarse a otros solventes novedosos, otras moléculas de naturaleza orgánica compleja, entre otros.

Referencias

- [1] Park, K.A., Lee, H.J. and Hong, I.K., Solubility prediction of bioantioxidants for functional solvent by group contribution method, *J. Ind. Eng. Chem.*, 16(3), pp. 490-495, 2010.
- [2] Rojas-Barquera, D. y Narváez-Cuenca, C.E., Determinación de Vitamina C, compuestos fenólicos totales y actividad antioxidante de frutas de guayaba (*Psidium guajava* L.) cultivadas en Colombia, *Rev. Quim. Nova*, 32(9), pp. 2336-2340, 2009.
- [3] Departamento Nacional de Planeación DNP- DDRS Ministerio de Agricultura y Desarrollo Rural, I. y T. Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial Ministerio de Comercio, M. de P. Social, M. de R. Exteriores, and D. A. de C. T. e I.- Colciencias, Política para el desarrollo comercial de la biotecnología a partir del uso sostenible de la biodiversidad - CONPES 3697. Bogotá, Colombia, 2011, 36 P.
- [4] Alcalde, M.T., Alimentos usados en formulación cosmética, *Ámbito Farm. Cosmética*, 26(3), pp. 10–109, 2007.
- [5] Bacallao, L.G., Domínguez, D.M.R., Gómez, L.V.G. and Ángel, M.H., Plantas con propiedades antiinflamatorias, *Rev. Cuba. Investig. Biomed.*, 21(3), pp. 214-216, 2002.
- [6] Farris, P.K., Topical vitamin C: A useful agent for treating photoaging and other dermatologic conditions., *Dermatol. Surg.*, 31(7 Pt 2), pp. 814-817; discussion 818, 2005.
- [7] I.B. for C. National, Ascorbic acid., PubChem Compound Database CID=54670067, 2015. [Online]. [Accessed: 01-Oct-2015]. Available at: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/54670067>.
- [8] Hukkerikar, A.S., Sarup, B., Ten Kate, A., Abildskov, J., Sin, G. and Gani, R., Group-contribution + (GC +) based estimation of properties of pure components: Improved property estimation and uncertainty analysis, *Fluid Phase Equilib.*, 321, pp. 25-43, 2012.
- [9] Scilipoti, J., Cismonti, M. and Brignole, E.A., Prediction of physical properties for molecular design of solvents, *Fluid Phase Equilib.*, 362, pp. 74-80, 2014.
- [10] Gutierrez, C., García, M.T., Lucas, A. and Rodriguez, J.F., Una aproximación práctica para el diseño de un proceso de reciclado de polímeros mediante disolución, *AFINIDAD LXVIII*, pp. 181-188, 2011.
- [11] Gani, R., Jiménez-González, C., Ten Kate, A., Craft, P.A., Jones, M., Powell, L., Atherton, J.H. and Cordiner, J.L. Modern approach to solvent selection, *Chem. Eng.*, 113(3), pp. 30-43, 2006.
- [12] Marrero, J. and Gani, R., Group-contribution based estimation of pure component properties, *Fluid Phase Equilibria*, 183–184, pp. 183-208, 2001.
- [13] Hansen, C.M., Hansen Solubility Parameters, *Angewandte Chemie International Edition*, 2001.
- [14] C.M. Hansen, Hansen Solubility Parameters: A User's Handbook, Second Ed. 2007.
- [15] Durkee, J.B., Solubility Scales (Parameters), Chapter 2, in *Cleaning with Solvents*, 2014, pp. 29-55.

- [16] Gantiva, M. and Martínez, F., Método extendido de hildebrand en la predicción de la solubilidad del ketoprofeno en mezclas cosolventes etanol + agua, *Quim. Nova*, 33, pp. 370-376, 2010.
- [17] Durkee, J.B., - Solvent Selection for Specific Tasks, Chapter 3, in *Cleaning with Solvents*, 2014, pp. 57-123.

C.E. Aristizábal-Alzate, recibió el título de Ing. Químico en el año 2012 de la Universidad Nacional de Colombia, sede Medellín. Adicionalmente, inició en el 2016, estudios en la Maestría en Gestión Energética Industrial en el Instituto Tecnológico Metropolitano de Medellín (ITM) y el pregrado en Química en la Universidad de Antioquia. Desde el año 2012 hasta Enero del 2016, trabajó como asesor de pequeños emprendimientos del sector químico y agroindustrial. Además, se desempeñó durante 3 años, como Director de Investigación y Desarrollo de una compañía que se especializa en la extracción de principios activos, metabolitos secundarios y extractos naturales estandarizados, a partir del aprovechamiento sostenible de la biodiversidad vegetal de Colombia.

ORCID: 0000-0002-8970-6389



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
Química e Ingeniería de Petróleos

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Química
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Petróleos
Doctorado en Ingeniería - Sistemas Energéticos

Mayor información:

E-mail: qcaypet_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5317