

TRABAJO FIN DE GRADO

**TENSIOACTIVOS. PRESENCIA
EN FORMULACIONES DE
UTILIDAD EN FARMACIA.
PROPIEDADES Y RELACIÓN
CON ADITIVOS.**

Carlota Valentina Cáceres Velázquez

Tutor: Dr. Domingo M. Grandoso Medina

Titulación: Grado en Farmacia

Año académico: 2020/2021

ÍNDICE

RESUMEN.....	2
ABSTRACT	2
1. INTRODUCCIÓN	4
1.1. Tipos de tensioactivos	4
1.2. Tensión superficial y la concentración micelar crítica	5
1.3. Propiedades y aplicaciones de los tensioactivos.....	6
1.4. Dodecil-sulfato sódico	7
1.5. Aminoácidos: L-valina, glicina y alanina.....	8
2. OBJETIVOS.....	10
3. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL	11
4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	12
4.1. Determinación de CMC.....	12
4.2. Discusión de los datos de CMC	13
4.3. Parámetros termodinámicos para el proceso de micelización (Marcolongo & Mirenda, 2011)	16
5. CONCLUSIONES.....	23
6. BIBLIOGRAFÍA.....	24

RESUMEN

El objetivo de esta revisión bibliográfica es estudiar la influencia de tres aminoácidos (L-valina, glicina y alanina) en la concentración micelar crítica (CMC) del Dodecil Sulfato de Sodio en disoluciones acuosas a distintas concentraciones de aminoácido. Para conocer los valores de CMC se usó la conductividad eléctrica (κ), empleándose datos obtenidos de ensayos experimentales anteriores.

A partir de la conductividad eléctrica, también se obtuvieron los parámetros termodinámicos como la entalpía, la entropía y la energía libre. Fueron calculados con métodos matemáticos siguiendo el modelo de *asociación cerrada*, con la finalidad de describir mejor la influencia de los aminoácidos sobre el poder tensioactivo del SDS. Por consiguiente, los resultados nos indican que los aminoácidos influyen de manera positiva sobre el surfactante utilizado.

Palabras claves: Concentración micelar crítica, tensioactivo, aminoácidos, Dodecil Sulfato Sódico, L-valina, glicina, alanina.

ABSTRACT

The aim of the work is to study the influence of three amino acids (L-valine, glycine and alanine) on the critical micellar concentration (CMC) of sodium dodecyl sulphate in aqueous solutions at different amino acid concentrations. The electrical conductivity (κ) has been used to determine the CMC values, although the data were obtained from previous experimental trials.

In order to better describe the influence of amino acids on the surfactant power of SDS, thermodynamic parameters (such as enthalpy, entropy and free energy) were also obtained and calculated with mathematical methods following the *closed association* model from the electrical conductivity. Consequently, the results indicate that amino acids have a positive influence on the surfactant used.

Keywords: Critical micellar concentration, surfactant, amino acids, Sodium Dodecyl Sulphate, L-valine, glycine, alanine.

1. INTRODUCCIÓN

Los tensioactivos son sustancias cuya característica principal es disminuir la tensión superficial de un líquido, también denominado surfactante (que proviene del inglés siendo acrónimo de “surface active agent”). Son moléculas anfifílicas, lo que indica que éstas tienen una doble afinidad presentando una parte polar y otra apolar, como podemos ver en la *Ilustración 1* donde se muestra la fórmula del dodecil sulfato sódico, un agente tensioactivo muy usado en la industria farmacéutica. (Salager, 1993)

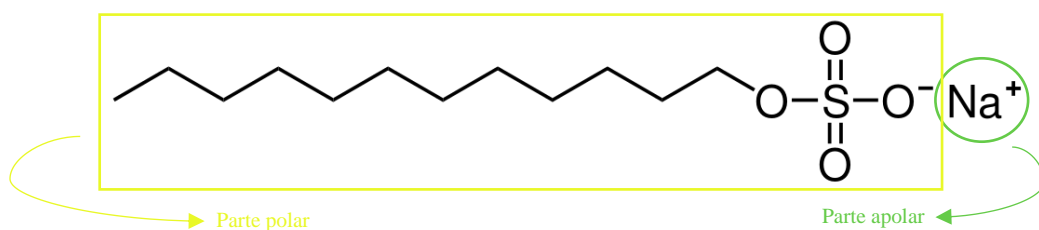


Ilustración 1 Dodecil sulfato sódico, autoría propia.

El grupo polar está formado por grupos alcohol, amina, fosfatos, amidas, sulfatos...los cuales contienen heteroátomos como O, N, P o S. Esta parte es la denominada hidrofílica, es decir, tiene gran afinidad por los disolventes polares, siendo el más común el agua.

Y el grupo apolar que presenta un grupo hidrocarbonado de tipo alquil o alquil benceno, y ocasionalmente pueden ser haluros u oxígeno. Dado que la afinidad por los disolventes polares de esta parte es escasa, se denomina parte hidrofóbica o lipofílica. (Donaji Jiménez Islas, 2010)

1.1. Tipos de tensioactivos

Dependiendo del carácter del grupo polar del tensioactivos los podemos clasificar en:

- Aniónicos: sus grupos funcionales se ionizan en disoluciones acuosas dando lugar a iones orgánicos con carga negativa. Suelen contener grupos sulfatos.
- Cationicos: sus grupos funcionales se ionizan en disoluciones acuosas originando iones orgánicos con carga positiva. Suelen contener amonio cuaternario (NH₄⁺).
- No iónicos: presentan grupos funcionales como el hidroxilo (-OH), que tienen la capacidad de formar puentes de hidrógeno y por lo tanto no se disocian en disoluciones acuosas.

- Anfóteros: sus grupos funcionales que se ionizan en disoluciones acuosas generando carácter aniónico o catiónico dependiendo de las características de la disolución (por ejemplo, el pH). A este grupo pertenecen los aminoácidos y las betaínas. (Tejedor, s.f.)

TIPO DE TENSIOACTIVO	EJEMPLO	ESTRUCTURA
Aniónico	Dodecil sulfato sódico	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{11}\text{SO}_4^- \text{Na}^+$
Catiónico	Bromuro de cetil-trimetil amonio	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{15}\text{N}(\text{CH}_3)_3^+ \text{Br}^-$
No iónico	Nonil-fenol-etoxilado	
Anfótero	Alquil-dimetil-betaína	

Tabla 1.- Ejemplos de los tipos de tensioactivos (Tejedor, s.f.)

1.2. Tensión superficial y la concentración micelar crítica

Como se mencionó anteriormente, los agentes tensioactivos actúan sobre la tensión superficial que es la característica propia de la superficie de los líquidos, gracias a la atracción entre las moléculas, para soportar una fuerza externa. Ésta es la responsable de fenómenos como que algunos insectos sean capaces de caminar por la superficie del agua. Para que esto

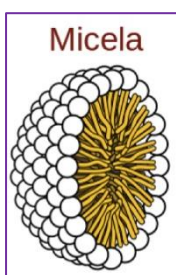


Ilustración 2.- Micela esférica

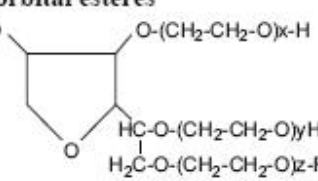
ocurra es necesario que disminuya la tensión superficial mediante la micelización, que es el proceso por el cual la cadena apolar se dirige hacia el centro dejando que la parte polar sea la que tenga contacto con la disolución. Por lo tanto, las micelas, estructuras resultantes de la micelización, son las que forman la interfase, pero eso solamente ocurre a una concentración

determinada, la que se conoce como concentración micelar crítica (CMC). (Salager, 1993)

En la interfase el movimiento de las moléculas hacia la disolución requiere de energía. Se sabe que la energía libre superficial es la energía libre (ΔG) que se necesita para aumentar una unidad la superficie de un determinado líquido, y se relaciona con la energía libre de Gibbs:

$$\Delta G = \gamma \Delta A$$

donde γ es la tensión superficial. Se puede concluir que un tensioactivo es una sustancia capaz de modificar la energía libre de un líquido, y cada uno tiene una concentración micelar crítica (CMC) que se sitúa entre el 0,5-5%.

Grupo tensoactivo	CMC (mM)
Alquil sulfato de sodio	
i) $C_{12}SO_4 Na$ (dodecil sulfato de sodio)	3.92
ii) $C_{10}SO_4 Na$ (decil sulfato de sodio)	30.3
iii) $C_{14}SO_4 Na$ (tetradecil sulfato de sodio)	0.87
Alquil etoxilato éteres	
i) $C_{12}E_4$ (Brij-30)	0.02-0.04
ii) $C_{12-15}E_4$ (Neodol 25-9)	0.09
iii) $C_{12}E_{23}$ (Brij-35)	0.06-0.08
Alquifenol etoxilato éteres	
i) $C_8PE_{9.5}$ (Triton X-100)	0.24
ii) C_8PE_{12} (Igepal CA-720)	0.6
iii) $C_9PE_{10.5}$ (Tergitol NP-10)	0.054-0.08
Polioxietileno sorbital ésteres	
$H-(O-CH_2-CH_2)_w-O$  $H_2C-O-(CH_2-CH_2-O)_z-R$	
i) Tween 20 (monolaurato) $w+x+y+z=20$, $R = C_{12}H_{24}O_2$	0.49
i) Tween 80 (monooleato) $w+x+y+z=20$, $R = C_{18}H_{34}O_2$	0.01
Ramnilipidos	55-165mgL ⁻¹

Donde:

$E_m = -(OC_2H_4)_mOH$: grupo etoxilato

$C_n = C_nH_{2n+1}$: *n*-alquil

$P = -C_6H_4-$: fenil

Ilustración 3.- Valores de la concentración micelar crítica (CMC) para diversos tipos de tensioactivos (Liu et al. 1991, Costa et al. 2006)

1.3. Propiedades y aplicaciones de los tensioactivos

Además de la concentración micelar crítica (CMC), hay tres propiedades importantes a mencionar que son: el balance lipófilo/hidrófilo (HBL), el número de agregación (n_a) y el punto de nube (PN).

En primer lugar, el balance lipófilo/hidrófilo (HBL) indica la capacidad que tiene un tensioactivo para formar emulsiones, tanto sistemas agua-aceite (W-O) como sistemas aceite-agua (O-W), estables. El valor del HBL indica que tipo de emulsión estable que forma. Es decir, cuanto más se aproxime el valor del HBL a 1 el tensioactivo tiende a emulsiones estables agua-aceite, y por el contrario si es más próximo a 20, formará emulsiones estables aceite-agua.

HBL	Aplicación
4-6	Emulgentes para sistemas agua-aceite
7-9	Agentes humectantes
8-18	Emulgentes para sistemas aceite-agua
13-15	Detergentes
10-18	Solubilizadores

Tabla 2.- Aplicaciones generales de los tensioactivos con base en su HLB

En segundo lugar, el número de agregación (n_a) da información sobre el número promedio de moléculas de tensioactivo que se pueden encontrar en una micela. Generalmente presentan una estructura esférica y « n_a » es constante.

Por último, el punto de nube (PN) es un valor que depende de la temperatura y afecta de manera directa a la solubilidad de los tensioactivos, normalmente no iónicos, en soluciones acuosas. Por tanto, a cierta temperatura el tensioactivo pierde la solubilidad presentando una turbidez en la disolución acuosa. (Donaji Jiménez Islas, 2010)

Dependiendo de las propiedades de cada tensioactivo, éstos tendrán unas aplicaciones. Las más comunes son: detergentes, dispersantes, emulsionantes, bactericidas, espumantes...

1.4. Dodecil-sulfato sódico

El dodecilsulfato sódico (SDS) también conocido como lauril sulfato de sodio (SLS) es un



Ilustración 3.- Representación de la estructura química en 3D (Centro Nacional de Información Biotecnológica, 2021)

tensioactivo aniónico con propiedades anfifílicas que se utiliza como detergente y sobre todo en el sector cosmético de la industria farmacéutica (pasta de dientes, champú...). También destaca por su actividad desnaturalizante de proteínas (provocando la pérdida de la conformación activa de las moléculas proteicas) ya que por las interacciones hidrofóbicas

forman complejos con éstas. Por lo tanto, en las técnicas de electroforesis se utiliza el SDS para la separación de proteínas según sus pesos moleculares.

Por último, respecto a la seguridad y peligros de esta molécula, la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (EPA) asegura que es una sustancia segura después de la realización de ensayos experimentales. A pesar de esto, presenta algunos riesgos para la salud leves como la irritación por contacto directo de las vías respiratorias, de los ojos o de la piel y por esta razón se recomienda el uso del equipo de protección ocular (gafas de seguridad y pantalla facial), su manipulación con guantes y en un lugar con la ventilación adecuada. (Centro Nacional de Información Biotecnológica, 2021)

1.5. Aminoácidos: L-valina, glicina y alanina

L-valina

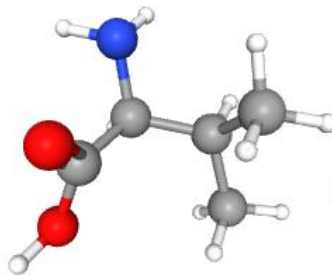


Ilustración 4.- Representación de la estructura química en 3D (L-valina)

Es un aminoácido esencial de cadena ramificada, posee una actividad estimulante que favorece la reparación de tejidos y el crecimiento muscular. Gracias a estas propiedades es utilizado como un complemento alimenticio muy extendido entre los deportistas que desean aumentar su masa muscular. (Centro Nacional de Información Biotecnológica, 2021)

Glicina

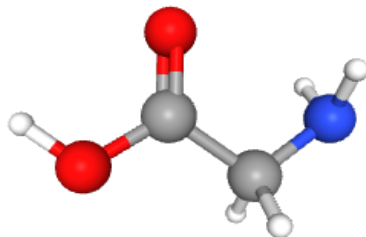


Ilustración 5.- Representación de la estructura química en 3D (Glicina)

Es el aminoácido más sencillo, no esencial de carácter apolar, y se trata de un neurotransmisor inhibitor en el Sistema Nervioso Central (SNC), aunque también es un

coagonista que proporciona una acción excitante en los receptores glutaminérgicos. Es una sustancia química declarada segura por la EPA.

Entre los usos más frecuentes de la glicina nos encontramos con su uso en la industria alimentaria (como agente aromatizante) y en la industria farmacéutica (como antiestático en cosmética o como excipiente en muchos medicamentos). (Centro Nacional de Información Biotecnológica, 2021)

Alanina

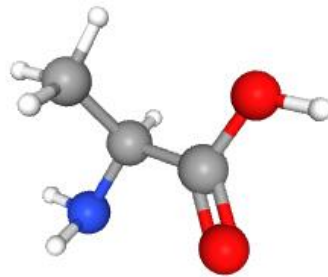


Ilustración 6.- Representación de la estructura química en 3D (Alanina)

Es un aminoácido no esencial de carácter apolar que participa en metabolismo de otro aminoácido (concretamente el triptófano) y en el metabolismo de la vitamina piridoxina. La alanina sirve como fuente de energía tanto para el SNC como para los músculos, además, refuerza el sistema inmunológico. (Centro Nacional de Información Biotecnológica, 2021)

2. OBJETIVOS

- Evaluar la influencia de tres aminoácidos (L-valina, alanina y glicina) en el poder tensioactivo del SDS.
- Comparar las concentraciones micelares críticas (CMC) calculadas a partir de variables termodinámicas entre las disoluciones de SDS-agua y las disoluciones de SDS con tres aminoácidos diferentes (L-valina, glicina y alanina).
- Analizar los distintos parámetros termodinámicos (entalpía, entropía y energía libre) y la influencia de los aminoácidos respecto al surfactante.

3. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

Los datos usados se han tomado de ensayos hechos con anterioridad. Para la obtención de éstos se realizaron medidas de conductividad de las correspondientes disoluciones manteniendo estable la temperatura con un criotermostato, siendo colocadas en un soporte de plástico duro.

Asimismo, para las disoluciones de Dodecil Sulfato Sódico (SDS) se utilizó agua obtenida de un sistema de purificación Millipore *Q-Pod*®, siendo el SDS *Acros Organics* con una pureza de +99%, (Cabello, 2017). La L-valina fue *Sigma* 99% mínimo, (Quintero, 2020), la glicina, también *Sigma* 99% mínimo, (Melo, 2019). La alanina fue *Sigma-Aldrich*, (Martino Campos, 2020) Los reactivos fueron de la mejor calidad que se consiguió buscando el menor porcentaje de impurezas para evitar que interfirieran en las medidas de conductividad.

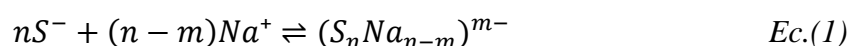
Se realizaron cinco disoluciones de distintas concentraciones de aminoácidos en agua para mezclar con las disoluciones de SDS que se midieron a diferentes temperaturas (20°C, 25°C, 30°C, 35°C y 40°C). Para realizar las medidas se utilizó un conductímetro de la casa *Mettler*, calibrado previamente con una disolución patrón; y se midieron desde la más diluida a la más concentrada.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1. Determinación de CMC

Para la determinación de las CMC se utilizó el modelo de *asociación cerrada* ya que su función es analizar datos experimentales. Este modelo acepta que las moléculas de tensoactivo libre, en disolución, se encuentran en equilibrio con las micelas mono-dispersas, comprendidas por un número «n» de moléculas de surfactante a cada valor de temperatura.

Se ha propuesto este equilibrio para describir el proceso de micelización:



donde S^- representa el anión dodecil sulfato y Na^+ , el catión sodio. Las micelas se corresponden al resultado del equilibrio, es decir, $(S_nNa_{n-m})^{m-}$. Además, se ve condicionado por la constante de equilibrio (κ_{mic}) que se expresa como:

$$\kappa_{mic} = \frac{[(S_nNa_{n-m})^{m-}]}{[S^-]^n[Na^+]^{n-m}} \quad Ec.(2)$$

Para calcular los valores de CMC es necesario realizar los cálculos termodinámicos de la formación de micelas, y se pueden obtener a partir de la conductimetría. Éstos se hallaron al representar los valores de la conductividad eléctrica (κ) frente a las diferentes concentraciones de SDS utilizados para el ensayo experimental. (Marcolongo & Mirenda, 2011)

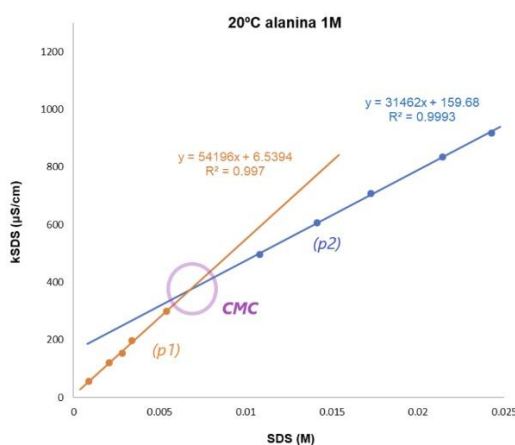


Ilustración 7.- Representación gráfica para conocer el valor de CMC a partir de datos experimentales. (Marcolongo & Mirenda, 2011)

4.2. Discusión de los datos de CMC

A continuación, se indican los datos de CMC para las cinco temperaturas, calculados de forma experimental en trabajos anteriores para el Dodecil Sulfato Sódico con agua y con cada uno de los tres aminoácidos estudiados:

Temperatura (°C)	Temperatura (K)	CMC ($\cdot 10^3/M$)
20	293.15	8.1
25	298.15	8.1
30	303.15	8.1
35	308.15	8.2
40	313.15	8.4

Tabla 3.- Resultados obtenidos para las CMC SDS en agua. (Cabello, 2017)

En la *tabla 3* se representan los valores del CMC del Dodecil Sulfato Sódico para las diferentes temperaturas, y como podemos observar para 20°C tiene un valor de $8,1 \cdot 10^{-3}/M$ y para 40°C, vale $8,4 \cdot 10^{-3}/M$. No es un cambio significativo, pero si se aprecia un aumento relativamente lento.

Temperatura (°C)	Temperatura (K)	CMC ($\cdot 10^3/M$)		
		0,05M	0,10M	0,25M
20	293.15	7,92	7,75	7,26
25	298.15	7,98	7,63	7,27
30	303.15	8,05	7,79	7,39
35	308.15	8,12	7,98	7,61
40	313.15	8,30	8,14	7,80

Tabla 4.- Resultados obtenidos para las CMC del SDS con agua-L-valina a tres concentraciones (0,05M y 0,10M). (Quintero, 2020)

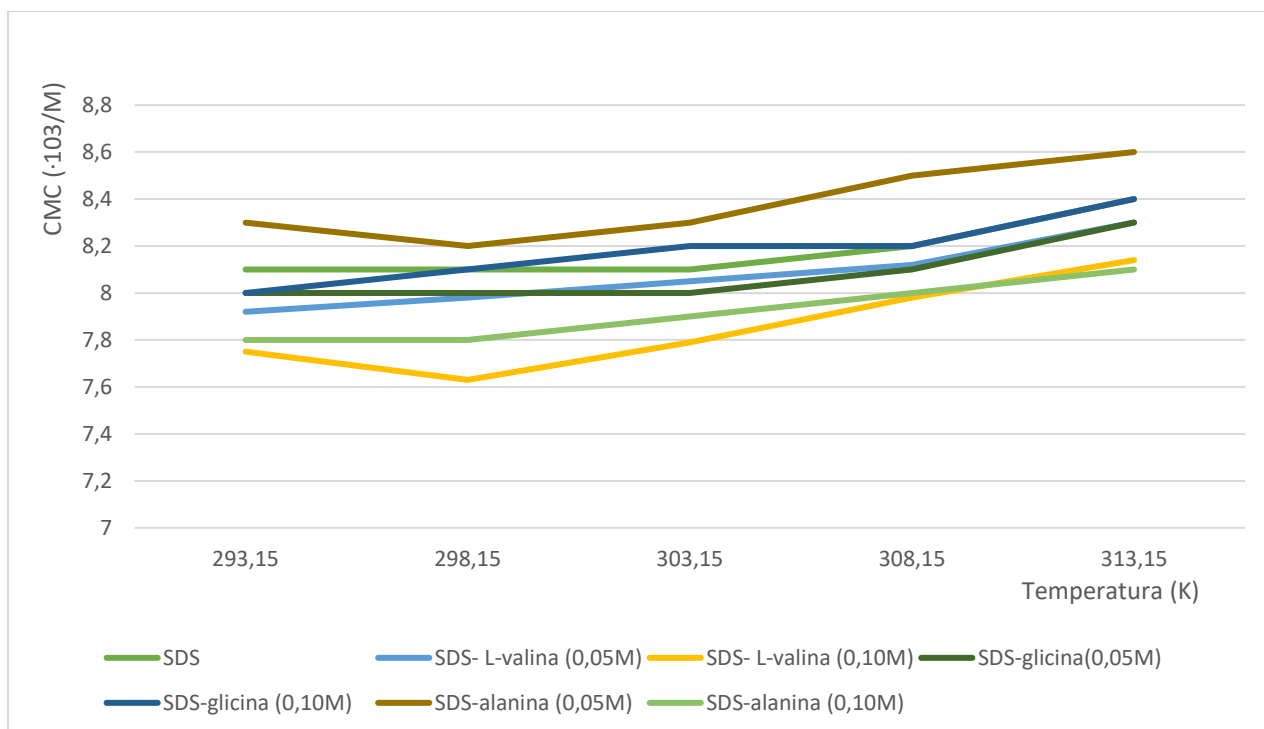
Temperatura (°C)	Temperatura (K)	CMC ($\cdot 10^3/M$)			
		0,005M	0,10M	0,01M	0,05M
20	293.15	8,2	8,0	8,5	8,0
25	298.15	8,2	8,1	8,5	8,0
30	303.15	8,1	8,2	8,9	8,0
35	308.15	8,2	8,2	9,0	8,1
40	313.15	8,4	8,4	9,2	8,3

Tabla 5.- Resultados obtenidos para las CMC del SDS con agua-glicina a dos concentraciones (0,05M y 0,10M). (Melo, 2019).

Temperatura (°C)	Temperatura (K)	CMC ($\cdot 10^3/M$)		
		0,05M	0,10M	0,5M
20	293.15	8,3	7,8	6,5
25	298.15	8,2	7,8	6,5
30	303.15	8,3	7,9	6,6
35	308.15	8,5	8,0	6,8
40	313.15	8,6	8,1	7,0

Tabla 6.- Resultados obtenidos para las CMC del SDS con agua-alanina a dos concentraciones (0,05M y 0,10M) (Martino Campos, 2020).

En las *tablas 4, 5 y 6* se indican los valores de la CMC obtenidos para cada temperatura a varias concentraciones diferentes de SDS con agua-aminoácido (0,05M; 0,10M; y 0,25M) y el comportamiento es el mismo que con los valores de la *tabla 3*, es decir, a medida que aumenta la temperatura también lo hace la CMC (son más altas a 40°C en todas sus molaridades que a 20°C). En cambio, comparando los valores según las concentraciones del aminoácido presente en la disolución, vemos que a mayor molaridad menor es el valor del CMC. Por ejemplo, en la *tabla 4* a 20°C, la CMC es mayor en la disolución de SDS con agua-valina al 0,05M que en la del 0,25M ($7,92 \cdot 10^{-3}/M$ por $7,26 \cdot 10^{-3}/M$). En la *tabla 6* a 20°C, la CMC es mayor en la disolución de SDS con agua-alanina al 0,05M que en la del 0,5M ($8,3 \cdot 10^{-3}/M$ por $6,5 \cdot 10^{-3}/M$) siendo el caso en que se diferencia.



Gráfica 1.- Representación de CMC frente a las temperaturas estudiadas.

Teniendo en cuenta que la concentración micelar crítica (CMC) es la concentración mínima necesaria para que comiencen a formarse las micelas en disolución acuosa. Por tanto, cuando se está por encima de ese valor, la concentración de micelas aumenta. Además, se conoce que la CMC es inversamente proporcional a la formación de micelas, es decir, cuánto más bajo es el valor del CMC, más tendencia a formar micelas existe. (Donaji Jiménez Islas, 2010)

Como ya se ha comentado, el valor de CMC aumenta con la subida de temperatura, confirmando así que el aumento de la temperatura provoca una desorganización de las moléculas de agua-grupo apolar y esto disminuye la tendencia a formar micelas. En otras palabras, se necesita una mayor concentración de Dodecil Sulfato Sódico (el tensioactivo usado en este estudio) para la formación de las micelas.

Por otro lado, los datos de SDS-aminoácido indican que, a mayor concentración de los grupos apolares (L-valina, glicina o alanina), menor es el valor de CMC. De manera que se favorece así la solubilización del tensioactivo ya que las micelas se empiezan a formar a una concentración más baja. Aunque las diferencias entre los valores de las concentraciones de SDS + agua y de SDS + aminoácidos no son significativas, sí se ve influenciado el proceso de micelización debido a que la adicción de L-valina, de glicina o de alanina aumenta el número de carbonos en la mezcla y con ello las interacciones lipofílicas.

No obstante, cuando la concentración de tensioactivo disminuye (el valor de ésta es inferior al del CMC) las micelas desaparecen, liberando de esta forma lo que contenía la vesícula hidrófoba. El uso de micelas en las formulaciones farmacéuticas está muy extendido en los sistemas de administración oral y parenteral, dado que la vesícula que se forma en el interior de la micela puede evitar la degradación de principios activos más inestables. Asimismo, sirven para mejorar la solubilidad de aquellas sustancias que se caracterizan por ser poco solubles en agua. (Sacco, 2015)

4.3. Parámetros termodinámicos para el proceso de micelización (Marcolongo & Mirenda, 2011)

La energía libre estándar en la formación de micelas ($\Delta_{mic}G^0$) se define con la siguiente ecuación:

$$\Delta_{mic}G^0 = -R \cdot T \cdot \ln K_{mic} \quad Ec.(3)$$

Combinando la ecuación 2 con lo anterior, y dividiendo por «n»:

$$\Delta_{mic}G^0/n = \Delta_{mic}\bar{G}^0 = -RT \ln(S_n N a_{n-m})^{m^-} + RT \ln[S^-] + (1 - \alpha) \cdot RT \ln[Na^+] \quad Ec.(4)$$

Donde $\alpha = m/n$ es el grado de ionización micelar. Por lo general, si $n > 50$ el primer factor es despreciable frente a los otros dos sumandos. Además, cuando las concentraciones del surfactante se acercan al valor de CMC ($[S^-] \approx [Na^+] \approx CMC$), la ecuación que lo define sería:

$$\Delta_{mic}\bar{G}^0 \approx RT(2 - \alpha) \ln CMC \quad Ec.(5)$$

Aplicando ahora la ecuación de Gibbs-Helmholtz obtenemos:

$$\frac{\partial(\frac{\Delta G}{T})}{\partial T} = \frac{-\Delta H}{T^2} \quad Ec.(6)$$

Para la entalpía molar de la expresión de micelas obtenemos la expresión:

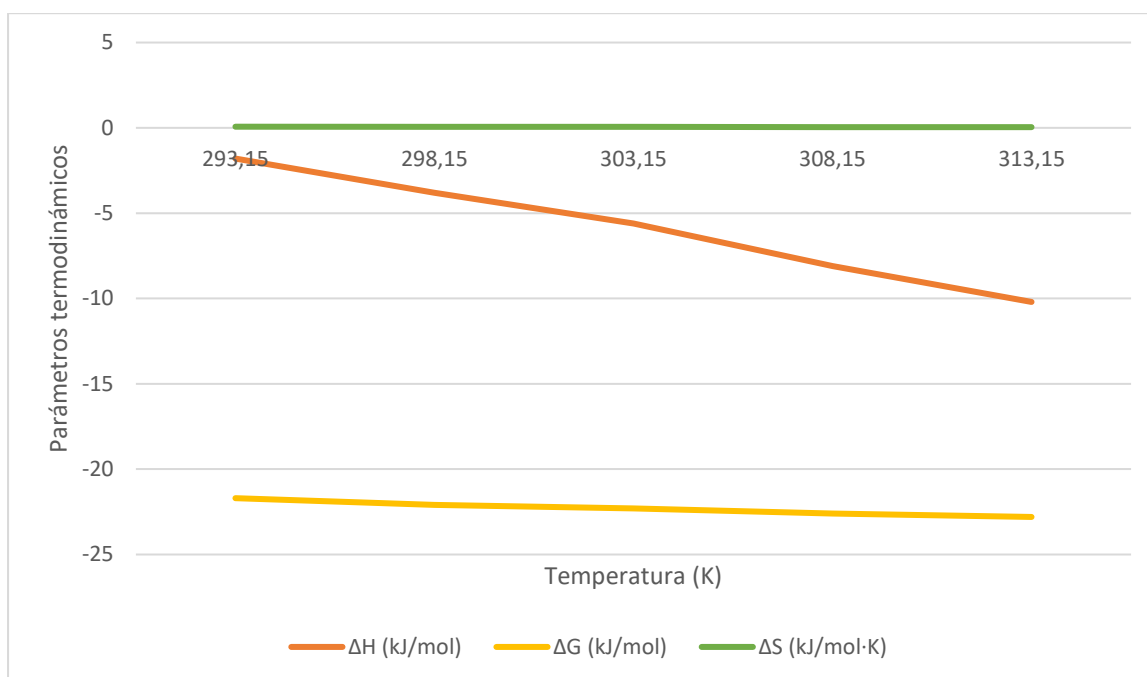
$$\Delta_{mic}\bar{H}^0 \approx -RT^2 \left[(2 - \alpha) \left(\frac{\partial \ln CMC}{\partial T} \right) - \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right) \ln CMC \right] \quad Ec.(7)$$

Finalmente, la entropía molar de la formación de micelas ($\Delta_{mic}\bar{S}^0$) se utiliza:

$$\Delta_{mic}\bar{G}^0 = \Delta_{mic}\bar{H}^0 - T \cdot \Delta_{mic}\bar{S}^0 \quad Ec.(8)$$

SDS-agua				
T (K)	ΔH (kJ/mol)	ΔG (kJ/mol)	ΔS (kJ/mol·K)	T· ΔS (kJ/mol)
293,15	-1,8	-21,7	0,0680	19,93
298,15	-3,8	-22,1	0,0611	18,22
303,15	-5,9	-22,3	0,0541	16,40
308,15	-8,1	-22,6	0,0471	14,51
313,15	-10,2	-22,8	0,0403	12,62

Tabla 7.- Valores de los parámetros termodinámicos para la formación de micelas para SDS-agua. (Cabello, 2017)



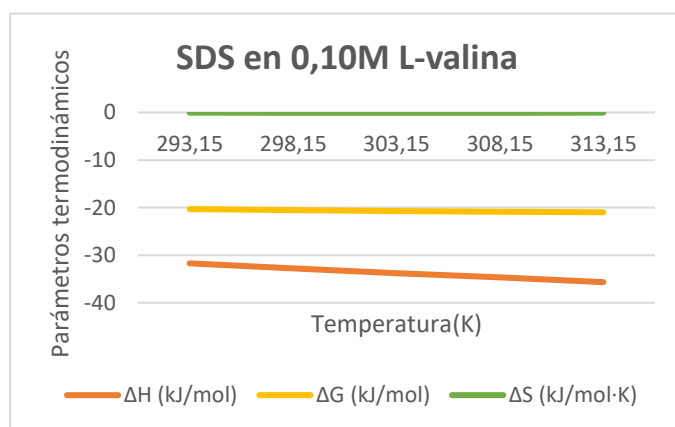
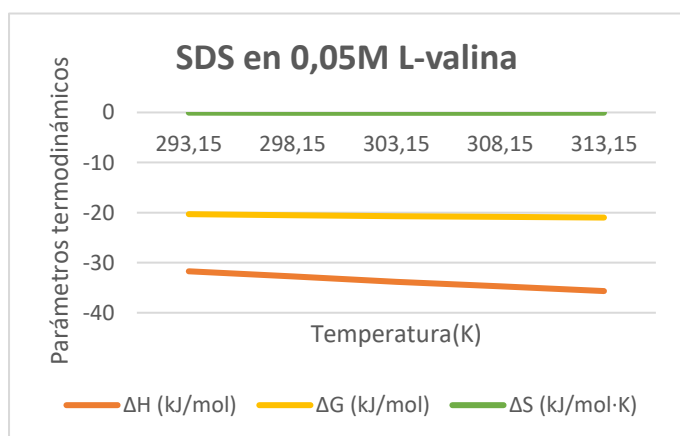
Gráfica 2.- Valores de los parámetros termodinámicos para la formación de micelas para SDS-agua. (Cabello, 2017)

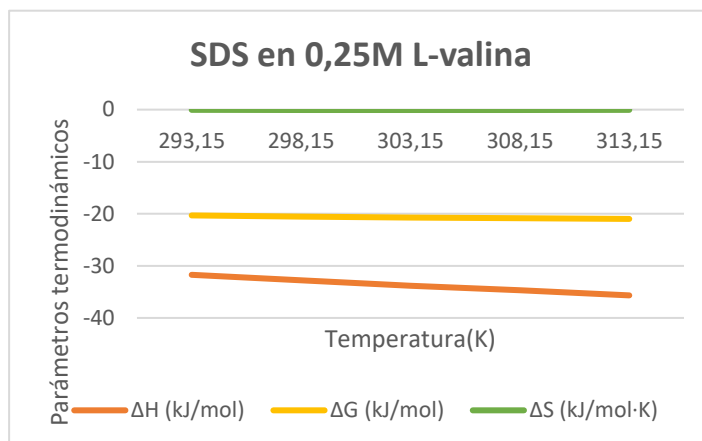
Se observa una ligera variación de los parámetros con la temperatura, siendo el más significativo el de ΔH (kJ/mol). En general, la micelización es un proceso exotérmico como muestra el signo negativo del cambio de entalpía (ΔH) y espontáneo por los valores negativos del cambio de energía libre (ΔG).

Para las disoluciones de SDS en agua-valina a diferentes concentraciones y temperaturas, los resultados son:

SDS en 0,05M L-valina				
T(K)	ΔH (kJ/mol)	ΔG (kJ/mol)	ΔS (kJ/mol·K)	T· ΔS (kJ/mol)
293,15	-6,49	-21,80	0,0522	15,31
298,15	-6,71	-22,14	0,0518	15,43
303,15	-6,91	-22,35	0,0509	15,44
308,15	-7,14	-22,68	0,0504	15,54
313,15	-7,33	-22,82	0,0494	15,48
SDS en 0,10M L-valina				
293,15	-7,17	-21,90	0,0503	14,73
298,15	-7,37	-22,23	0,0498	14,85
303,15	-7,64	-22,51	0,0490	14,86
308,15	-7,86	-22,64	0,0480	14,78
313,15	-8,10	-22,91	0,0473	14,82
SDS en 0,25M L-valina				
293,15	-8,48	-21,95	0,0460	13,47
298,15	-8,77	-22,33	0,0455	13,55
303,15	-9,06	-22,63	0,0448	13,57
308,15	-9,31	-22,73	0,0436	13,43
313,15	-9,56	-22,86	0,0425	13,30

Tabla 8.- Valores de los parámetros termodinámicos para la formación de micelas para SDS a tres concentraciones de L-valina. (Quintero, 2020)





Gráficas 3.- Valores de los parámetros termodinámicos para la formación de micelas para SDS a tres concentraciones de L-valina. (Quintero, 2020)

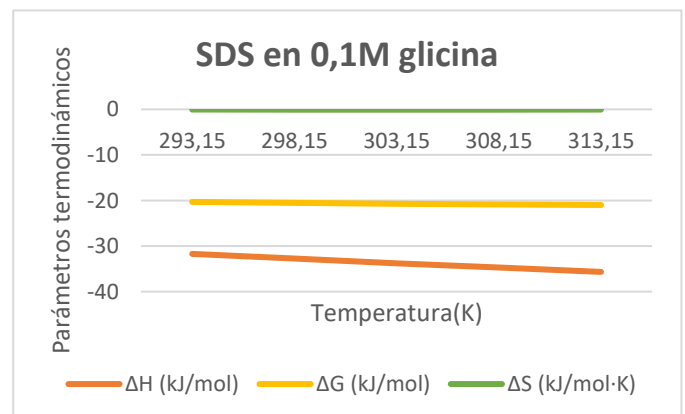
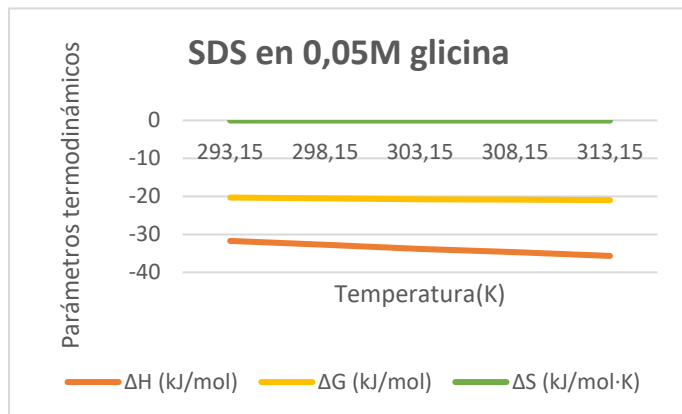
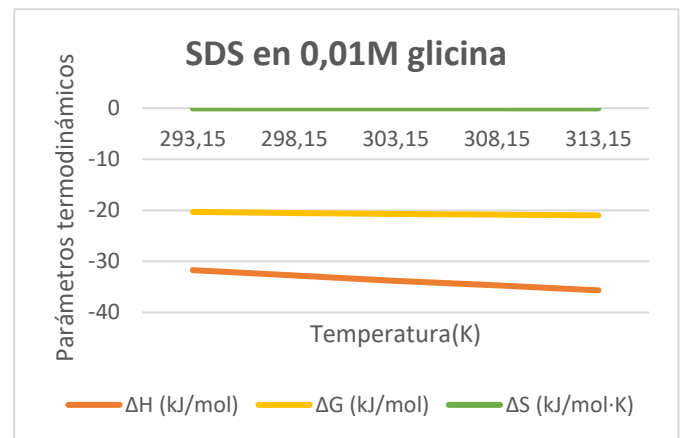
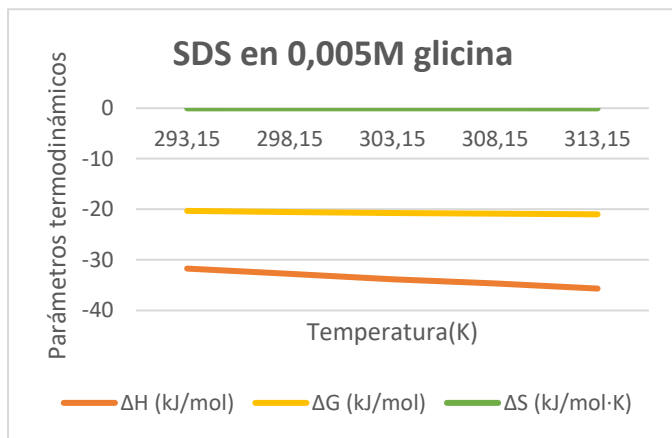
Se sigue observando el signo negativo en los valores de la entalpía (ΔH) y de la energía libre (ΔG), lo que indica que la formación de micelas corresponde a un proceso exotérmico y por tanto espontáneo una vez alcanzada la concentración micelar crítica. A pesar de que parezcan contradictorios los valores positivos de la entropía (ΔS), esto se explica por el aumento del grado de desorden del sistema al modificarse el disolvente que rodea las micelas. Se aprecia muy poca variación con el aumento de temperatura para cada concentración de L-valina por lo que ésta no influye en el valor de la entropía (ΔS).

En el caso de las disoluciones de SDS en agua-glicina a diferentes concentraciones y temperaturas, los resultados son:

SDS en 0,005M glicina				
T(K)	ΔH (kJ/mol)	ΔG (kJ/mol)	ΔS (kJ/mol·K)	T· ΔS (kJ/mol)
293,15	-5,28	-21,68	0,0559	16,38
298,15	-5,47	-22,05	0,0556	16,57
303,15	-5,64	-22,32	0,0550	16,67
308,15	-5,82	-22,62	0,0545	16,79
313,15	-5,98	-22,75	0,0535	16,75
SDS en 0,01M glicina				
293,15	-10,13	-21,86	0,0400	11,73
298,15	-10,48	-22,22	0,0393	11,71
303,15	-10,75	-22,23	0,0378	11,46
308,15	-11,07	-22,47	0,0369	11,37
313,15	-11,41	-22,68	0,0359	11,24

SDS en 0,05M glicina				
293,15	-5,83	-21,86	0,0547	16,03
298,15	-6,04	-22,14	0,0534	15,92
303,15	-6,23	-22,52	0,0537	16,28
308,15	-6,41	-22,67	0,0527	16,23
313,15	-6,60	-22,94	0,0521	16,31
SDS en 0,10M glicina				
293,15	-6,36	-21,77	0,0525	15,39
298,15	-6,56	-22,08	0,0520	15,50
303,15	-6,76	-22,30	0,0512	15,52
308,15	-6,98	-22,63	0,0507	15,62
313,15	-7,18	-22,70	0,0497	15,56

Tabla 9.- Valores de los parámetros termodinámicos para la formación de micelas para SDS a tres concentraciones de glicina. (Melo, 2019)



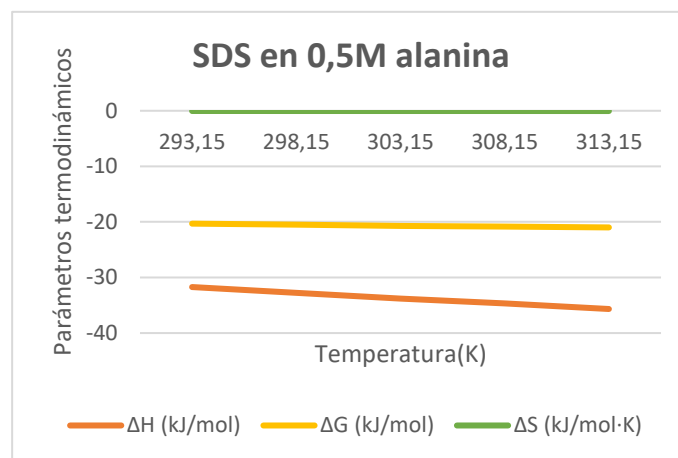
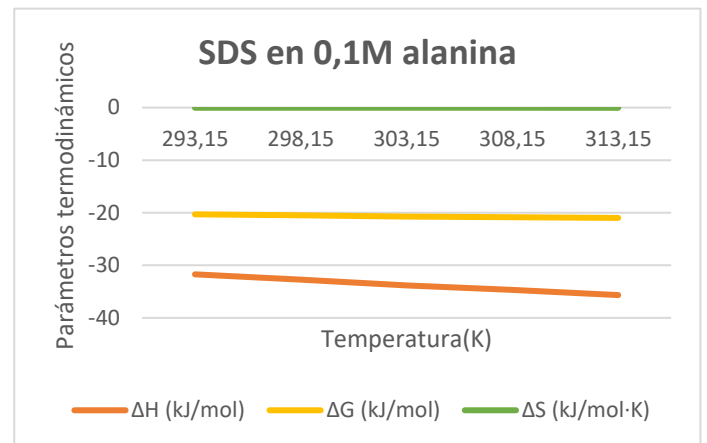
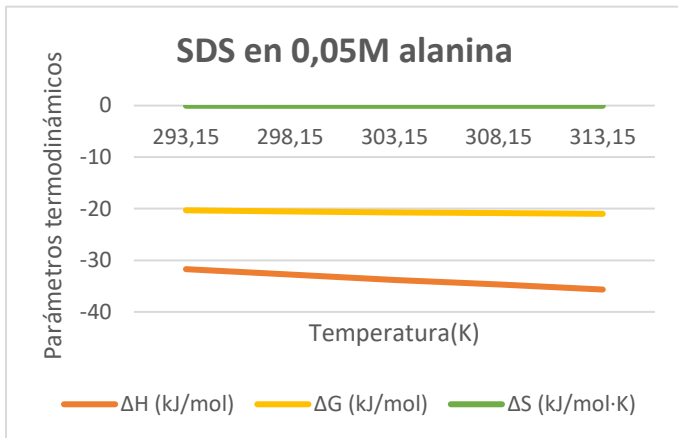
Gráficas 4.- Valores de los parámetros termodinámicos para la formación de micelas para SDS a cuatro concentraciones de glicina. (Melo, 2019)

Se observa la misma tendencia que en los casos anteriores, el signo negativo en los valores de la entalpía (ΔH) y de la energía libre (ΔG) indica que la formación de micelas corresponde a un proceso exotérmico y espontáneo. Se aprecia muy poca variación con el aumento de temperatura para cada concentración de glicina por lo que ésta no influye significativamente en el valor de la entropía (ΔS).

Para las disoluciones de SDS en agua-alanina a diferentes concentraciones y temperaturas, los resultados son:

SDS en 0,05M alanina				
T(K)	ΔH (kJ/mol)	ΔG (kJ/mol)	ΔS (kJ/mol·K)	T·ΔS (kJ/mol)
293,15	-27,35	-19,82	-0,0257	-7,53
298,15	-28,29	-20,08	-0,0276	-8,22
303,15	-29,19	-20,29	-0,0294	-8,91
308,15	-30,03	-20,44	-0,0311	-9,59
313,15	-30,92	-20,64	-0,0328	-10,28
SDS en 0,10M alanina				
293,15	-28,57	-20,07	-0,029	-8,49
298,15	-29,55	-20,31	-0,031	-9,24
303,15	-30,46	-20,51	-0,033	-9,95
308,15	-31,38	-20,69	-0,035	-10,68
313,15	-32,31	-20,89	-0,036	-11,42
SDS en 0,5 M alanina				
293,15	-31,72	-20,31	-0,0389	-11,42
298,15	-32,76	-20,52	-0,0411	-12,24
303,15	-33,81	-20,74	-0,0431	-13,07
308,15	-34,69	-20,84	-0,0449	-13,85
313,15	-35,67	-20,99	-0,0469	-14,68

Tabla 10.- Valores de los parámetros termodinámicos para la formación de micelas para SDS a tres concentraciones de alanina. (Martino Campos, 2020)



Gráficas 5.- Valores de los parámetros termodinámicos para la formación de micelas para SDS a tres concentraciones de alanina. (Martino Campos, 2020)

Finalmente, en el caso de la alanina, se observa que no influye de forma aparente sobre el poder surfactante del SDS, dado que los valores de la entalpía, la entropía y la energía libre varían relativamente poco y son negativos, lo que confirma que son procesos exotérmicos y la micelización es espontánea.

5. CONCLUSIONES

Se han comparado los valores de la CMC para disoluciones de SDS en agua pura con las del SDS en agua-L-valina, del SDS en disolvente agua-glicina, y del SDS en disolvente agua-alanina. Se emplearon diferentes disoluciones del aminoácido en agua y se trabajó a diferentes temperaturas (de 20°C hasta 40°C, en intervalos de 5°C). Se puede concluir que:

- Respecto a las disoluciones de SDS en disolvente agua pura, la CMC presenta pequeñas variaciones cuando se acompaña de diferentes aminoácidos para los valores de temperatura estudiados, aunque se puede confirmar un aumento relativamente lento.
- La adición de un aminoácido (L-valina, glicina o alanina), hace que la CMC disminuya al aumentar la concentración del grupo no polar de la mezcla, favoreciendo el proceso de micelización.
- En todos los casos estudiados, SDS en agua y SDS en mezclas (aminoácido + agua) se aprecia una variación poco significativa de los parámetros termodinámicos (cambios de entalpía, de entropía y energía libre de Gibbs), y se puede afirmar que el proceso de micelización es espontáneo y exotérmico.

6. BIBLIOGRAFÍA

- Bachofer, S. J. (Septiembre de 1996). *ACS Publications, Journal of Chemical Education*. Recuperado el Junio de 2021, de Conductivity, A Simple Method to Probe Micellar Solutions: <http://www.firp.ula.ve/archivos/cuadernos/S201A.pdf>
- Cabello, I. (2017). Tensoactivos. Concentración Micelar Crítica a temperaturas bajas o moderadas. *Tensoactivos. Concentración Micelar Crítica a temperaturas bajas o moderadas*. San Cristóbal de La Laguna: Universidad de La Laguna.
- Centro Nacional de Información Biotecnológica. (09 de Mayo de 2021). *Resumen de compuestos de PubChem*. Obtenido de Resumen de compuestos de PubChem : <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Sodium-dodecyl-sulfate>
- Centro Nacional de Información Biotecnológica. (Junio de 2021). *Resumen de compuestos de PubChem*. Obtenido de Resumen de compuestos de PubChem: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/6287>
- Centro Nacional de Información Biotecnológica. (19 de Junio de 2021). *Resumen de compuestos de PubChem*. Obtenido de Resumen de compuestos de PubChem: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/750>
- Centro Nacional de Información Biotecnológica. (19 de Junio de 2021). *Resumen de compuestos de PubChem*. Obtenido de Resumen de compuestos de PubChem: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/602>
- Donaji Jiménez Islas, S. A. (2010). Propiedades, aplicaciones y producción de biotensoactivos: una revisión. *Revista internacional de contaminación ambiental*. Recuperado el Mayo de 2021, de http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0188-49992010000100006
- Hammouda, B. (2013). Efecto de la temperatura sobre la nanoestructura de las micelas SDS en agua. *Revista de investigación del Instituto Nacional de Estándares y Tecnología*, 151-167. Recuperado el Mayo de 2021, de <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4487321/>
- Marcolongo, J. P., & Miranda, M. (2011). Thermodynamics of Sodium Dodecyl Sulfate (SDS) Micellization: An Undergraduate Laboratory Experiment. *Journal of Chemical Education*, 629-633.
- Martino Campos, M. (2020). Tensoactivos. CMC a temperaturas bajas o moderadas. Influencia sobre la CMC de la presencia de compuestos neutros o polares: alanina. *Tensoactivos. CMC a temperaturas bajas o moderadas. Influencia sobre la CMC de la presencia de compuestos neutros o polares: alanina*. San Cristóbal de La Laguna, Santa Cruz de Tenerife, España: Universidad de La Laguna.
- Melo, S. G. (2019). Tensoactivos. CMC a temperaturas bajas o moderadas. Influencia sobre la CMC de la presencia de compuestos neutros o polares: glicina. *Tensoactivos. CMC a temperaturas bajas o moderadas. Influencia sobre la CMC de la presencia de compuestos neutros o polares: glicina*. San Cristóbal de La Laguna, Santa Cruz de Tenerife, España: Universidad de La Laguna.
- Quintero, P. G. (2020). Tensoactivos. CMC a temperaturas bajas o moderadas. Influencia sobre la CMC de la presencia de compuestos neutros o polares. L-valina. *Tensoactivos. CMC a temperaturas bajas o moderadas. Influencia sobre la CMC de la presencia de compuestos*

neutros o polares. L-valina. San Cristóbal de La Laguna, Santa Cruz de Tenerife, España: Universidad de La Laguna.

Rodríguez, M. O. (Octubre de 2009). *Comportamiento Reológico de Disoluciones Acuosas de Surfactantes Comerciales No Iónicos*. (d. d. Universidad de Granada, Ed.) Recuperado el Mayo de 2021, de Tesis Doctoral: <https://hera.ugr.es/tesisugr/18526536.pdf>

Sacco, N. A. (2015). *Solubilización de fármacos en micelas acuosas de líquidos iónicos*. Obtenido de <https://bibliotecavirtual.unl.edu.ar:8443/bitstream/handle/11185/1354/4.1.13.pdf>

Salager, J.-L. (1993). *Surfactantes en Solución Acuosa*. (F. d. Universidad de los Andes, Ed.) Recuperado el Abril de 2021, de Módulo de enseñanza en fenómenos interfaciales en español: <http://www.firp.ula.ve/archivos/cuadernos/S201A.pdf>

Tejedor, A. S. (s.f.). *La industria de los agentes tensoactivos*. Recuperado el Junio de 2021, de Química Orgánica Industrial: <https://www.eii.uva.es/organica/qoi/tema-10.php>