



CLEAN2GREEN

Investigación de las
sinergias entre
tensioactivos en las
formulaciones de
detergencia



Contenido

1. Ficha técnica del proyecto	2
2. Antecedentes y motivaciones	3
3. Objetivos del proyecto	4
4. Plan de trabajo	5
5. Resultados obtenidos	6
6. Colaboradores externos e impacto empresarial	24



1. Ficha técnica del proyecto

N.º EXPEDIENTE	IMAMCA/2025/6
TÍTULO COMPLETO	Investigación de las sinergias entre tensioactivos en las formulaciones de detergencia
PROGRAMA	Ayudas dirigidas a centros tecnológicos CV para proyectos de I+D en cooperación con empresas
ANUALIDAD	2025
PARTICIPANTES	(si procede)
COORDINADOR	(si procede)
ENTIDADES FINANCIADORAS	IVACE – INSTITUT VALENCIÀ DE COMPETITIVITAT EMPRESARIAL
ENTIDAD SOLICITANTE	AITEX
C.I.F.	



2. Antecedentes y motivaciones

Los productos de cuidado del tejido, tales como suavizantes y perfumadores, por lo general, dejan una importante huella ecológica por su composición, al contener ingredientes con capacidad para contaminar el agua, ser poco biodegradables, ecotóxicos y tener un potencial impacto en la salud. Algunos de los ingredientes más problemáticos incorporados a estas formulaciones son los tensioactivos (*esterquats*) o polímeros *booster* de eficacia, siendo los más efectivos de origen sintético y con baja biodegradabilidad; los perfumes encapsulados, pudiendo ser microplásticos aquellos de origen sintético, o los conservantes convencionales que contienen biocidas y, en algunos casos, son sensibilizantes.

Debido a esta problemática, el consumo de productos “ecológicos” crece día a día y lo hace en todas las líneas de productos de cuidado del hogar y especialmente en la de suavizantes y perfumadores. El aumento de la oferta sigue la tendencia de una mayor demanda de productos sostenibles por una sociedad cada vez más concienciada respecto a la forma en la que consume. Así cada vez son más las empresas y marcas que apuestan por reformular sus productos y alegar reivindicaciones como “sostenible”, “eco-friendly”, o “con ingredientes naturales”.

Por otro lado, hay una tendencia creciente en la sociedad no solo hacia el consumo de productos más sostenibles o que utilizan materias primas de origen natural, sino también hacia productos más respetuosos con la piel, que no afectan negativamente a su pH o su barrera de protección y no provoquen irritación dérmica.

Los productos de detergencia en general (detergentes, vajillas, suavizantes, etc.) son ricos en tensioactivos y, por tanto, en ingredientes con capacidad de producir un efecto irritante en la piel. No obstante, es bien sabido que se dan lugar interacciones sinérgicas entre las mezclas de diferentes familias de tensioactivos que dan lugar a una mejora de sus propiedades como es la eficacia de limpieza o la generación/estabilidad de espuma, así como una reducción del potencial irritante. De hecho, el método más sencillo para reducir la capacidad irritante de un tensioactivo aniónico es añadir otro a la mezcla, especialmente si es de diferente naturaleza (no iónico o anfótero) debido especialmente a su capacidad para generar micelas de mayor tamaño y más estables, así como reducir la CMC.

Por ello, es de gran importancia estudiar el comportamiento de las mezclas de tensioactivos, así como mezclas tensioactivo-polímero, o con cualquier otro tipo de aditivo con el que se genere una sinergia para así ayudar a conocer mejor las propiedades del producto final formulado en lo que se refiere por ejemplo al potencial de irritación dérmica (desnaturalización de proteínas, daños a la barrera de protección de la piel o citotoxicidad) o a la eficacia que cabe esperar en parámetros como son la generación de espuma o la eliminación de suciedad.



3. Objetivos del proyecto

El objetivo principal del proyecto Clean2Green2025 consiste en el desarrollo de formulaciones de suavizantes/perfumadores sostenibles y eficaces a partir de ingredientes y/o aditivos naturales que permitan reducir el uso de tensioactivos, polímeros sintéticos u otros ingredientes de baja biodegradabilidad que generan un gran impacto ambiental. Asimismo, se investigarán las sinergias e interacciones que tienen lugar entre tensioactivos y entre mezclas tensioactivo-polímero y se evaluará el efecto que tiene esta sinergia sobre parámetros como el potencial irritante o sobre parámetros de eficacia como la generación de espuma o la eliminación de suciedad.

1. Línea de productos *Home Care*:

- ✓ Desarrollar formulaciones base *Home Care* (suavizantes y perfumadores para ropa) a partir de ingredientes de origen natural. Se espera obtener formulaciones con al menos un 80% de índice de naturalidad.
- ✓ Investigar y seleccionar tensioactivos (*esterquats*) de origen natural y alta biodegradabilidad que ofrezcan eficacia similar a la de los tensioactivos convencionales.
- ✓ Investigar la incorporación de diferentes aditivos en formulaciones en las formulaciones desarrollada que mejoren la eficacia del suavizante en parámetros tales como suavidad, ausencia de arruga o facilidad del planchado y permitan reducir el uso de tensioactivos, polímeros sintéticos o siliconas.
- ✓ Estudiar la viabilidad de conservar las formulaciones desarrolladas mediante aditivos multifuncionales libres de biocidas y aplicando la tecnología de barreras.
- ✓ Evaluar la biodegradabilidad (OECD 301), así como el porcentaje de origen natural mediante la aplicación de la ISO 16128 de las formulaciones desarrolladas.
- ✓ Evaluar la eficacia de los prototipos desarrollados teniendo en cuenta parámetros como la suavidad, la reducción de arrugas o la facilidad del planchado.

2. Línea de tensioactivos:

- ✓ Puesta a punto de metodologías para caracterizar mezclas de tensioactivos y tensioactivo/polímero, en lo que se refiere a la concentración micelar crítica (CMC) o al potencial de irritación dérmico (test de la zeína para evaluar la desnaturalización de proteínas).
- ✓ Analizar las sinergias que tienen lugar en mezclas de tensioactivos, evaluando cuales son las familias de tensioactivos entre las que se genera una mayor sinergia (reducción de la CMC).
- ✓ Analizar las sinergias que tienen lugar en las mezclas tensioactivo-polímero, evaluando algunos de los polímeros de mayor aplicación en la industria *Home Care* (reducción de la CMC).



- ✓ Determinar el potencial de irritación dérmica de las mezclas de tensioactivos o tensioactivo-polímero evaluadas que presenten sinergia, así como otras metodologías que permitan evaluar la irritación dérmica tales como la evaluación transepidérmica de agua (TEWL) mediante sonda de medición, o la evaluación de la citotoxicidad in vitro.
- ✓ Evaluar el efecto que tienen las sinergias entre tensioactivos evaluadas sobre parámetros de eficacia tales como la generación/estabilidad de espuma o la capacidad de eliminación de manchas.

4. Plan de trabajo

PAQUETES DE TRABAJO	MESES											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
PT1 GESTIÓN Y SEGUIMIENTO												
Actividad 1.1 Gestión y seguimiento del proyecto												
PT2 EJECUCIÓN TÉCNICA												
ACTIVIDAD 2.1. Estado del arte/Viabilidad técnica/ Diagnóstico de necesidades												
ACTIVIDAD 2.2. Experimental												
ACTIVIDAD 2.3 Caracterización												
ACTIVIDAD 2.4 Coordinación técnica y validación												
PT3 COMUNICACIÓN, DIFUSIÓN Y TRANSFERENCIA DE RESULTADOS												
ACTIVIDAD 3.1. Comunicación, difusión y transferencia de resultados												
PT4 SUPERVISIÓN Y SEGUIMIENTO DEL PROYECTO												
ACTIVIDAD 4.1 Supervisión y seguimiento del proyecto												

PT1. GESTION Y SEGUIMIENTO

- ACTIVIDAD 1.1. GESTIÓN Y SEGUIMIENTO DEL PROYECTO

PT2. EJECUCIÓN TÉCNICA

- ACTIVIDAD 2.1. ESTADO DEL ARTE / VIABILIDAD TÉCNICA / DIAGNÓSTICO DE NECESIDADES
- ACTIVIDAD 2.2. EXPERIMENTAL
- ACTIVIDAD 2.3. CARACTERIZACIÓN
- ACTIVIDAD 2.4. COORDINACIÓN TÉCNICA Y VALIDACIÓN

PT3. COMUNICACIÓN, DIFUSIÓN Y TRANSFERENCIA DE RESULTADOS

- ACTIVIDAD 3.1. COMUNICACIÓN, DIFUSIÓN Y TRANSFERENCIA DE RESULTADOS.

PT4. SUPERVISIÓN Y SEGUIMIENTO DEL PROYECTO

- ACTIVIDAD 4.1. SUPERVISIÓN Y SEGUIMIENTO DEL PROYECTO



5. Resultados obtenidos

5.1. LINEA 1 HOMECARE: SUAVIZANTES Y PERFUMADORES

Esta línea se ha dividido en dos partes principales:

- Desarrollo, formulación y caracterización de suavizantes y perfumadores de ropa: Se ha trabajado en la creación de formulaciones optimizadas mediante la prueba de diferentes velocidades y tiempo de agitación, velocidad de enfriamiento y porcentajes de materia activa. El objetivo ha sido obtener productos con alta estabilidad, buena compatibilidad de ingredientes y elevada deposición de activos sobre el tejido.
- Evaluación de la eficacia de los suavizantes: Se han realizado ensayos de rendimiento en distintos tipos de tejidos, valorando parámetros como la suavidad, reducción de la electricidad estática, facilidad de planchado. Además, se han llevado a cabo estudios de percepción sensorial mediante paneles entrenados, y se han correlacionado las propiedades fisicoquímicas de las formulaciones con los resultados de eficacia, con el objetivo de establecer criterios de optimización del producto.

A continuación, se detallan los resultados más significativos.

5.1.1. DESARROLLO DE PROTOTIPOS DE SUAVIZANTES DE ROPA

Los **esterquats** se emplean como componentes principales en la formulación de suavizantes. Se estudiaron los parámetros más importantes de la formulación de estos. Se planteó trabajar con diferentes concentraciones de materia activa (6-10%), diferentes velocidades de enfriamiento (25, 35 o 45°C), y diferentes velocidades de agitación (150, 300 rpm). En la siguiente tabla se pueden observar las condiciones de preparación de las bases de suavizantes.

Tabla 1. Condiciones de preparación de las bases de suavizantes.

Acrónimo	Velocidad enfriamiento (°C)	% Materia Activa (MP)	Velocidad agitación	t agitación tras esterquat (min)	tiempo agitación final (min)
BS_1	25	6	150	5	10
BS_2	35	6	150	5	10
BS_3	45	6	150	5	10
BS_4	25	10	150	5	10
BS_5	35	10	150	5	10
BS_6	45	10	150	5	10
BS_7	45	10	200	5	10
BS_8	45	10	250	5	10

A partir de los resultados obtenidos, se desarrollaron los prototipos de suavizante (SR_1 y SR_2, siguiente figura) completos con las siguientes características:

- 10% de materia activa (sobre materia prima)
- Enfriamiento a 45 grados

- Velocidad de agitación de 200 rpm y agitación del esterquat durante 5 minutos



Figura 1. Prototipos de suavizante de ropa completos: SR_1 (izquierda) y SR_2 (derecha).

Con ellos se estudiaron diferentes propiedades como el cambio de las viscosidades cuando se añadía etanol o IPA (figura siguiente). Con ellos se ve que disminuye la viscosidad, siendo más pronunciado ese efecto con IPA.

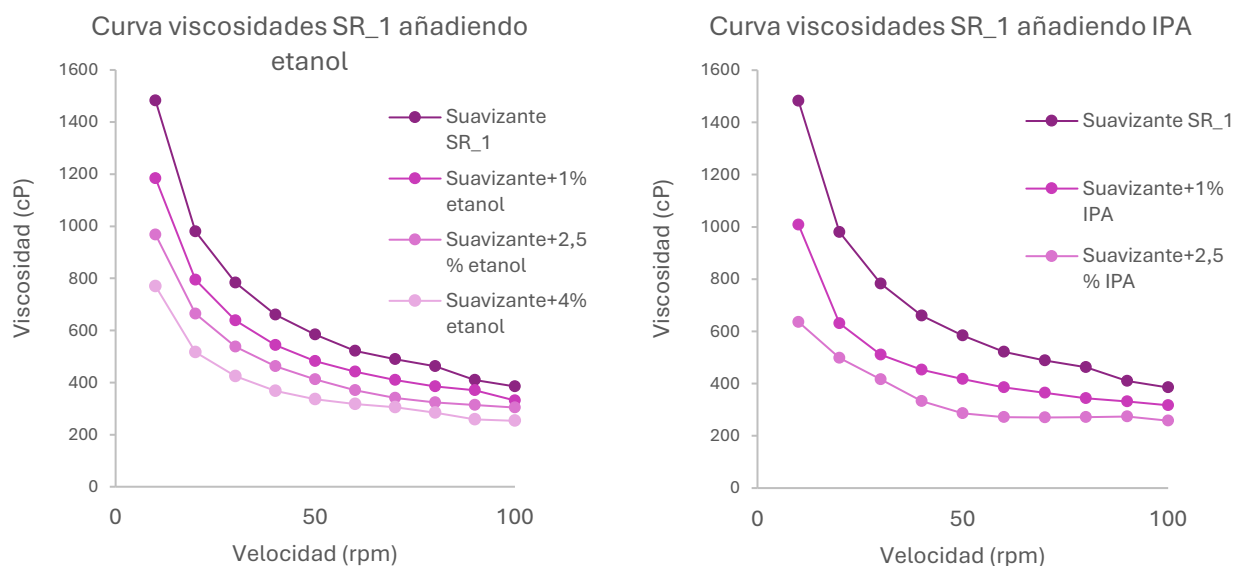


Figura 2. Barrido de viscosidades de SR_1 con diferentes concentraciones de etanol (izquierda) e IPA (derecha).

Del mismo modo, se estudió la generación y estabilidad de la espuma en presencia de un aditivo, Coltide HSI, el cual contiene proteínas de trigo y siliconas. Este ingrediente aporta suavidad, acondicionamiento y protección de fibras. En el caso de los suavizantes se busca que no haya espuma y que si la hay sea inestable. En el siguiente gráfico se ve la generación de espuma. Podemos observar que con el aditivo se genera un poco más.

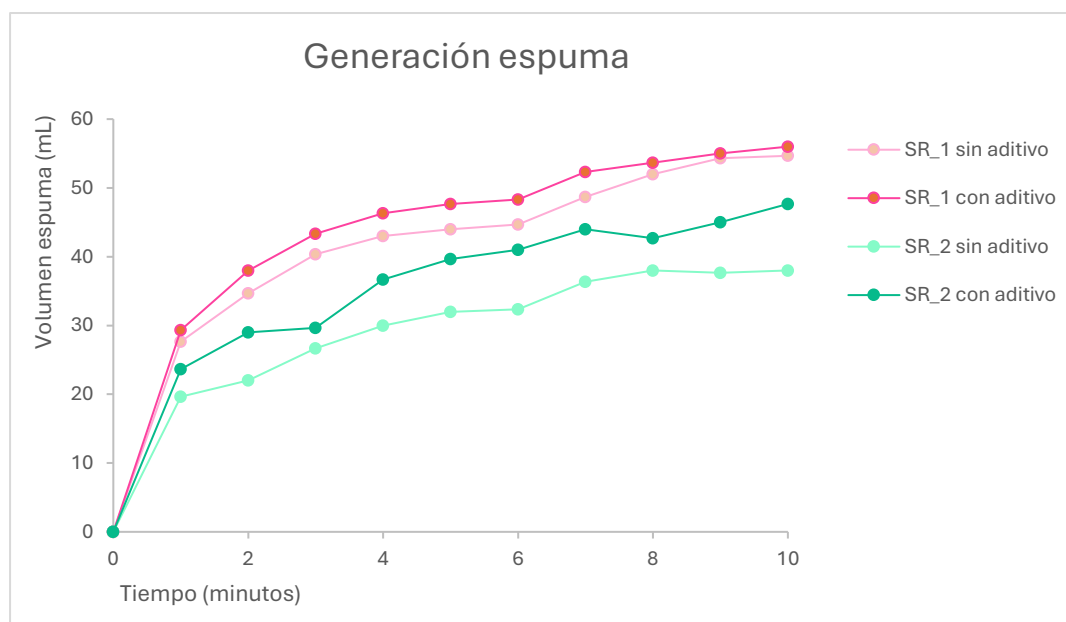


Figura 3. Curva del crecimiento de la espuma a lo largo de las lecturas en los diferentes suavizantes.

Pero, en términos de decaimiento de espuma, como se ve en la tabla siguiente, cuando añadimos el aditivo cae más rápido, por tanto, es más inestable.

Tabla 2. Incremento del volumen de espuma a lo largo del tiempo

Incremento espuma	
SR_1 sin aditivo	-3,3 ml
SR_1 con aditivo	-8,7 ml
SR_2 sin aditivo	-3,7 ml
SR_2 con aditivo	-8,7 ml

5.1.2. EVALUACIÓN DE LA EFICACIA DE LOS SUAVIZANTES

A partir de los resultados obtenidos en la fase anterior (*apartado 5.1.1*), donde se formularon los prototipos SR_1 y SR_2 con 10% de materia activa, se realizó un estudio comparativo de diferentes esterquats para determinar su comportamiento en parámetros clave como viscosidad, estabilidad de espuma y compatibilidad con aditivos.

En la siguiente figura se muestra la curva de generación y estabilidad de la espuma obtenida con dos tipos de esterquats: de origen natural de palma y de origen sebo, obteniendo una menor generación de espuma con este último. Tras este análisis, se seleccionó el esterquat de origen sebo como base para la siguiente etapa, debido a su equilibrio entre suavidad, estabilidad y facilidad de incorporación de ingredientes funcionales.

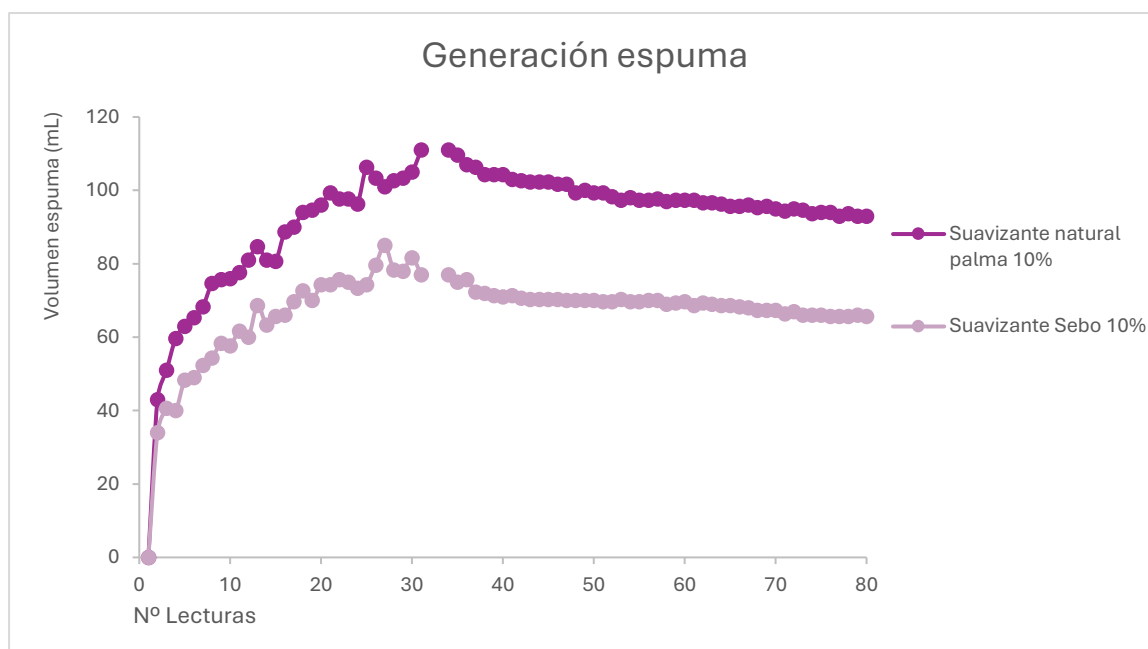


Figura 4. Curva comparativa generación y estabilidad espuma del suavizante natural palma 10% frente al suavizante de origen sebo 10%.

En esta fase, el objetivo es evaluar la eficacia del suavizante seleccionado y su optimización mediante aditivos que aporten propiedades adicionales, como el efecto fácil planchado y la mejora sensorial. Para ello, se desarrollaron nuevos prototipos basados en el esterquat de sebo (SR_4), a los que se incorporaron ingredientes específicos (Aurist, ácido oleico, siliconas) y se sometieron a ensayos comparativos en condiciones reales de uso.

Para la evaluación se lavaron tejidos de algodón tipo CALI, seleccionados por su facilidad para evidenciar la formación y recuperación de las arrugas después del lavado.

Tabla 3. Condiciones del lavado de los tejidos de algodón.

Programa lavadora	Temperatura	Centrifugado (rpm)	Duración lavado (min)
"Solo aclarado"	Fría	900	28

Los tejidos se lavaron con los siguientes suavizantes:

- **SR_4_HSI:** Suavizante sebo SR_4 aditivado con coltide HSI 1%
- **SR_4_OLEICO:** Suavizante sebo SR_4 aditivado con ácido oleico 1%
- **SR_4_AURIST:** Suavizante sebo SR_4 aditivado con Aurist 1%

Apariencia visual de los tejidos tras el lavado (AATCC Test Method 124:2011)

El objetivo de este ensayo ha sido determinar la apariencia de los tejidos después de ser sometidos a un procedimiento de lavado doméstico. Para ello se utiliza la siguiente escala de valoración, siendo la S1 la que muestra más arrugas y la S5 la que muestra menos arrugas:



Figura 5. Escala de valoración

En la siguiente tabla se muestran los resultados obtenidos tras el lavado de los tejidos.

Tabla 4. Resultados obtenidos en la apariencia visual de los tejidos tras el lavado

Muestras	Valoración
Tejido Algodón lavado con suavizante sebo 10% (SR_4)	SA-1
Tejido Algodón lavado con SR_4 + aditivo HSI 1% (SR_4_HSI)	SA-1
Tejido Algodón lavado con SR_4 + aditivo ácido oleico 1% (SR_4_OLEICO)	SA-3
Tejido Algodón lavado con SR_4 + aditivo aurist 1% (SR_4_AURIST)	SA-3

El aditivo Coltide HSI al 1% no mejora la apariencia visual respecto al suavizante base SR_4 (ambos SA-1). En cambio, el ácido oleico y Aurist al 1% aportan una mejora significativa (SA-3), lo que refleja una mejora en la apariencia visual del tejido tras el lavado. Entre los aditivos evaluados, el Aurist al 1% es el que ha proporcionado los mejores resultados, mostrando una mayor eficacia en la reducción de arrugas en el tejido tras el lavado.

Determinación de la capacidad al desarrugado de una probeta de tejido plegada horizontalmente (EN 22313)

Este ensayo mide la capacidad del tejido para volver a su forma original tras ser arrugado; cuanto mayor es el ángulo, mejor es la recuperación y mayor la eficacia suavizante.

Tabla 5. Resultados obtenidos en el ángulo de recuperación de la arruga en tejidos de algodón

Muestra			Valoración
Tejido Algodón lavado con suavizante sebo 10% (SR_4)	Urdimbre	Haz	83
		Envés	87

	Trama	Haz	94
		Envés	86
	MEDIA		87.5°
	Urdimbre	Haz	103
		Envés	95
Tejido Algodón lavado con SR_4 + aditivo Aurist 1% (SR_4_AURIST)	Trama	Haz	97
		Envés	102
	MEDIA		99.25°
	Urdimbre	Haz	101
		Envés	100
Tejido Algodón lavado con SR_4 + aditivo HSI 1% (SR_4_HSI)	Trama	Haz	101
		Envés	100
	MEDIA		100.5°
	Urdimbre	Haz	99
		Envés	107
Tejido Algodón lavado con SR_4 + aditivo ácido oleico 1% (SR_4_OLEICO)	Trama	Haz	102
		Envés	110
	MEDIA		104.5°

De acuerdo con los resultados obtenidos, se puede concluir que:

- El suavizante base SR_4 sin aditivos presenta el valor promedio más bajo ($\approx 87,5^\circ$), indicando menor eficacia en suavizar el tejido.
- Todos los aditivos evaluados (Aurist, HSI y ácido oleico) mejoran significativamente el ángulo de recuperación respecto a SR_4, demostrando que potencian el efecto suavizante.
- Ácido oleico al 1% es el aditivo más eficaz, alcanzando $\approx 104,5^\circ$, lo que supone la mayor mejora en la recuperación de arrugas. HSI al 1% también muestra una mejora notable ($\approx 100,5^\circ$), con valores muy homogéneos entre urdimbre y trama, lo que sugiere una distribución uniforme en el tejido.

En conjunto, la incorporación de aditivos al suavizante SR_4 optimiza claramente la recuperación de arrugas en tejidos de algodón, siendo el ácido oleico el más eficaz, seguido por HSI y Aurist.

Fabric Touch Tester (FTT)

El Fabric Touch Tester M293 evalúa el tacto y confort del tejido midiendo parámetros físicos como grosor, compresión, doblado, aspereza, fricción y propiedades térmicas, tanto en urdimbre como en trama. En este ensayo se comparó **SR_4_Aurist** frente a **SR_4 (referencia)** para analizar diferencias en suavidad y comportamiento físico.

- **Percepción sensorial:** No se detectan diferencias entre SR_4 y SR_4_Aurist en tacto activo y pasivo; ambas muestras presentan suavidad similar.
- **Propiedades físicas:** SR_4_Aurist muestra menor rigidez y energía de doblado, lo que indica mayor flexibilidad y sensación de fluidez al manipular el tejido, aunque no se refleje directamente en la percepción táctil.



- **Rugosidad:** SR_4 presenta mayor rugosidad, lo que podría influir en una sensación menos suave al tacto. SR_4_Aurist, con menor rugosidad, sería más agradable en contacto directo con la piel.

5.2. LINEA 2: SINERGIAS ENTRE TENSIOACTIVOS

Esta línea se ha dividido en dos partes principales:

- Estudio de sinergias en mezclas binarias de tensioactivos: SLS:LDAO, SLES:AE y LAS:AE. En estos estudios se han evaluado propiedades interfaciales (CMC y tensión superficial mínima), performance (generación de espuma, eliminación de suciedad, etc.) y potencial irritante. Asimismo, se ha calculado la interacción (sinérgica/antagonismo) de las mezclas en la generación de micelas mixtas y la reducción de tensión superficial.
- Obtención de una base de datos de tensioactivos para relacionar potencial irritante (Zeína) con propiedades físicoquímicas de los tensioactivos (CMC, R, HLB, etc.). Aplicación de machine learning y metodologías de correlación para predecir el potencial irritante a partir de las propiedades FQ.

A continuación, se detallan los resultados más significativos.

5.2.1. SINERGÍAS EN MEZCLAS BINARIAS DE TENSIOACTIVOS

MEZCLAS SLS:LDAO

Las mezclas binarias de sodium lauril sulfate (SLS) y lauril dimetil amine oxide (LDAO) son de gran aplicación en formulaciones de detergencia que requieran la generación de elevada cantidad de espuma y de gran estabilidad, como es el caso de los lavavajillas manuales. Por ello, para este sistema, además de evaluar los parámetros interfaciales y determinar el potencial irritante mediante el test de la zeína, se han obtenido las curvas de generación y estabilidad de espuma. El estudio se centra en mezclas SLS:LDAO 90:10, 80:20, 70:30, 60:40 y 50:50, por ser proporciones de uso en detergencia y, con el fin de determinar la proporción que ofrece los mejores resultados.

- Parámetros superficiales

El siguiente gráfico muestra las curvas de tensión superficial vs. concentración para los tensioactivos individuales y las diferentes mezclas. A partir de este gráfico se puede obtener la CMC (cambio de pendiente en las curvas) y la tensión superficial mínima alcanzada.

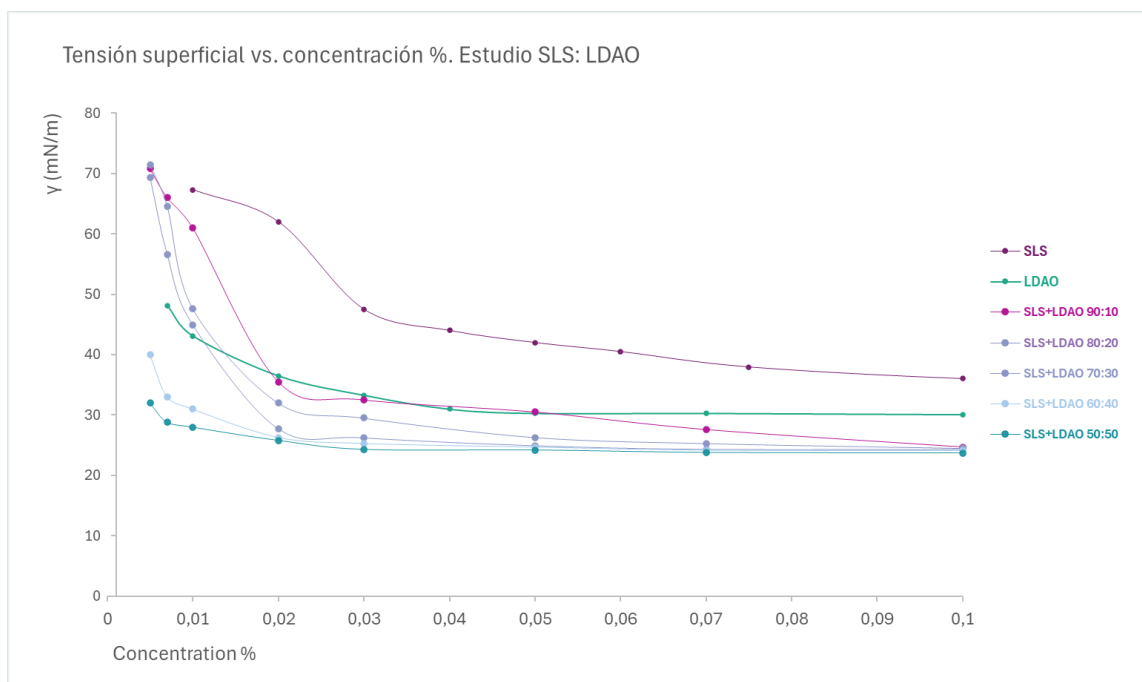


Figura 6. Tensión superficial vs. concentración. Sistema SLS:LDAO

La siguiente tabla muestra a modo de resumen la CMC y la tensión superficial mínima para cada una de las mezclas así como los tensioactivos individuales.

Tabla 6. Concentración micelar crítica y tensión superficial mínima sistema SLS:LDAO

DISOLUCIONES	CMC (%)	CMC (mM)	γ mínima (mN/m)
SLS+LDAO 90:10	0,0208	0,7382	24,7
SLS+LDAO 80:20	0,0212	0,7747	24,5
SLS+LDAO 70:30	0,0202	0,7549	24,3
SLS+LDAO 60:40	0,0219	0,8382	24,1
SLS+LDAO 50:50	0,0263	1,0310	23,7
LDAO	0,0418	1,8204	30,1
SLS	0,084	2,9126	32,05

Todas las mezclas analizadas, consiguen reducir la CMC de los tensioactivos individuales, así como la tensión superficial mínima, probando así la interacción sinérgica entre el SLS y la LDAO.

- Potencial irritante (test de la zeína)

Se ha determinado el potencial irritante de las mezclas SLS:LDAO, en lo que se refiere a la capacidad de desnaturalización de proteínas, aplicando el test de la zeína.

El siguiente gráfico, muestra el valor de zeína para cada una de las mezclas en comparación con el valor obtenido para el SLS. El SLS es irritante tipo I y, con pequeñas cantidades de LDAO ya se obtienen mezclas moderadamente irritantes o no irritante cuando la LDAO alcanza el 40%.

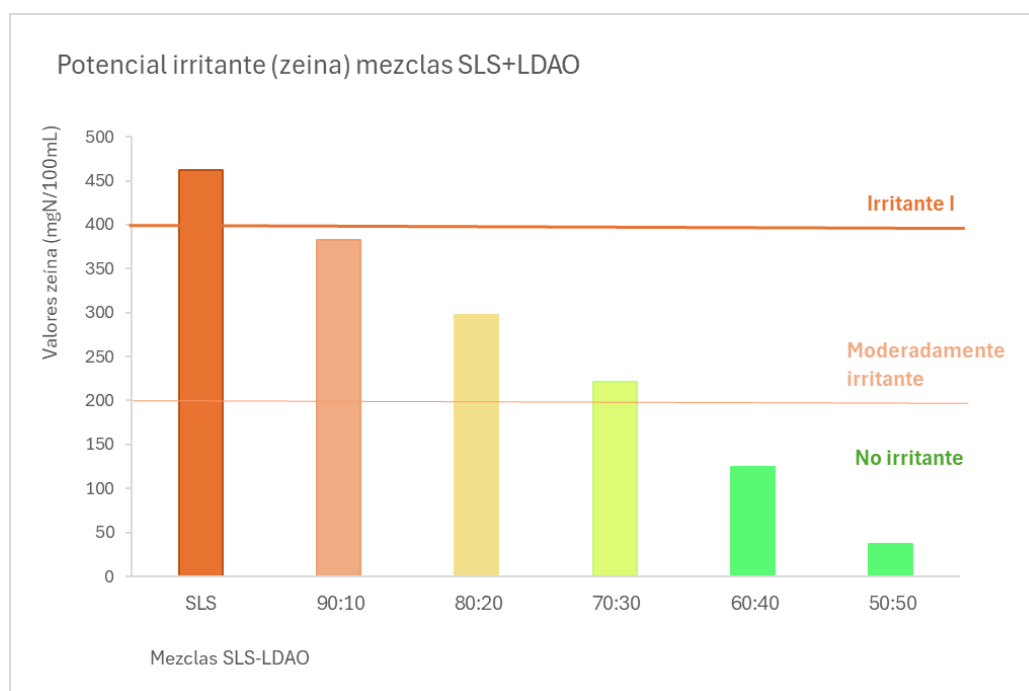


Figure 1. Potencial irritante (zeína) vs. Ratio SLS: LDAO

Además, para poder cuantificar la sinergia de las micelas mixtas de SLS: LDAO para la reducción del potencial irritante, se ha evaluado la zeína disuelta de los tensioactivos individuales en la proporción en la que se encuentran en las diferentes mezclas, para posteriormente obtener la zeína acumulada sumando el aporte de cada uno de los tensioactivos.

Tabla 7. Comparativa valor de zeína experimental vs. acumulada y % de aumento

Disoluciones tensioactivos puros	N total (mgN/100mL)	N LDAO (mgN/100mL)	N Zn (mgN/100mL)	Zeína acumulada (mgN/100mL)	Zeína experimental (mgN/100mL)	% aumento
SLS 90	412	NA	412	421,13	383,0	9,95
LDAO 10	15	5,87	9,13			
SLS 80	341,6	NA	341,6	346,36	297,8	16,32
LDAO 20	16,5	11,74	4,76			
SLS 70	285,3	NA	285,3	287,59	221,0	30,14
LDAO 30	19,9	17,61	2,29			
SLS 60	259,8	NA	259,8	262,12	124,9	109,83
LDAO 40	25,8	23,48	2,32			
SLS 50	208	NA	208	209,55	36,5	474,90
LDAO 50	30,9	29,35	1,55			

Se observa que, para todas las mezclas evaluadas, el valor de zeína experimental es menor que el valor de zeína acumulada, siendo especialmente acentuada esta diferencia cuanto mayor es el contenido de LDAO en la mezcla.

Queda probado con este estudio que existe una interacción sinérgica en el sistema SLS:LDAO que permite la obtención de micelas mixtas de mayor tamaño y más estables, así como la reducción de

la CMC y los monómeros libres en disolución, lo cual impacta en el potencial irritante obteniendo mezclas moderadamente irritantes o no irritantes. Además, la sinergia en estas mezclas se acentúa especialmente para las mayores ratios de LDAO.

- Generación y estabilidad de espuma

Se ha evaluado la generación y la estabilidad de espuma aplicando las siguientes condiciones: 0,1% de tensioactivos en agua desionizada, 20 lecturas de generación de espuma, 1500 rpm, 5 minutos de estabilidad y lectura cada 20 segundos.

A continuación, se muestran las curvas obtenidas para generación y para estabilidad de espuma:

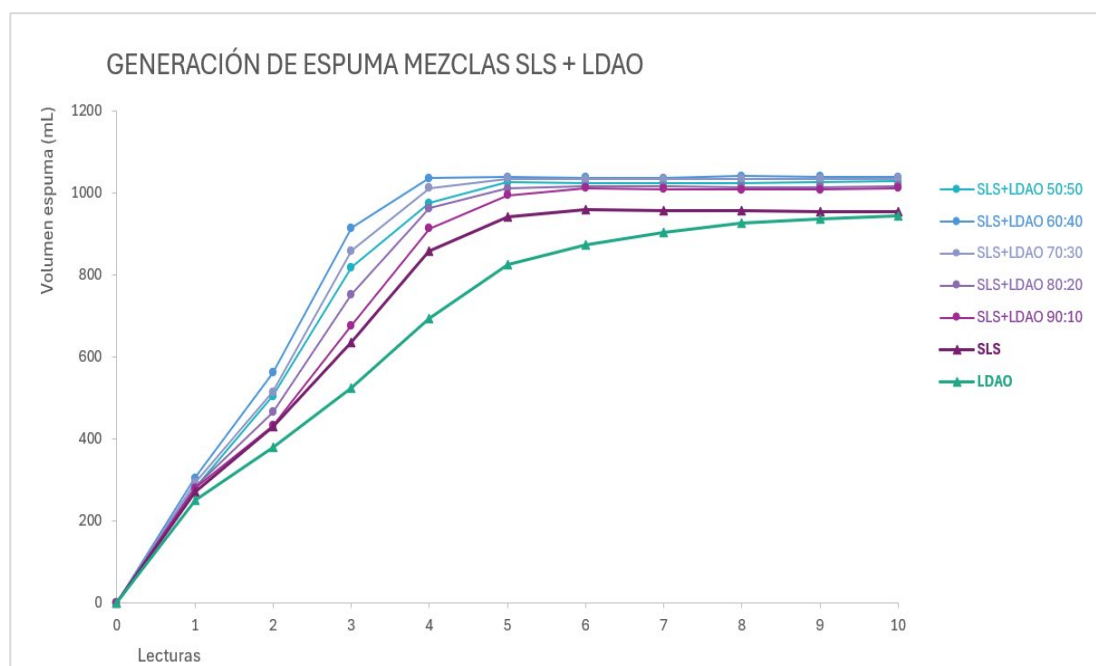


Figura 7. Curvas de generación de espuma sistema SLS: LDAO

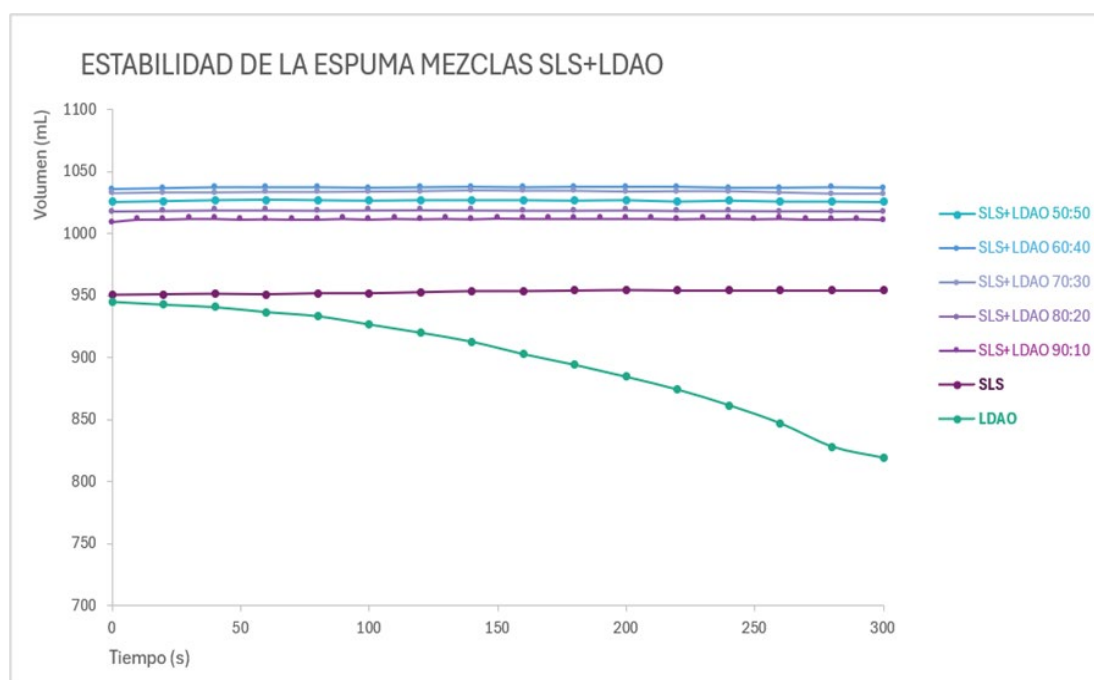


Figura 8. Curvas de estabilidad de espuma sistema SLS: LDAO

De los gráficos previos se pueden extraer las siguientes conclusiones:

- La generación de espuma es mayor cuanto mayor es el contenido de LDAO en la mezcla, alcanzando un máximo en 60:40
- Todas las mezclas, así como el SLS muestran una gran estabilidad de espuma, mientras que la LDAO genera una espuma inestable que decrece con el tiempo.
- Pese a ser inestable la espuma de la LDAO, queda probado como las mezclas de sulfato con LDAO permiten potenciar la generación de espuma, así como su estabilidad.
- La mejora en la espumación va en línea con la mejora de propiedades interfaciales comentada previamente ya que hay una relación directa entre tensión superficial/CMC y generación/estabilidad de espuma.

MEZCLAS LAS:AE

Las mezclas binarias de alquilbenzeno sulfonato lineal + alcohol etoxilado son de gran aplicación en formulaciones de detergentes para ropa. Con este estudio se pretende determinar la ratio entre estos tensioactivos que potencia las propiedades interfaciales de interés en detergencia (CMC, tensión superficial, etc.) a la vez que se reduce el potencial irritante de la mismas.

- Parámetros superficiales

La siguiente gráfica muestra las curvas de tensión superficial vs. concentración para las diferentes mezclas, así como para los tensioactivos individuales.

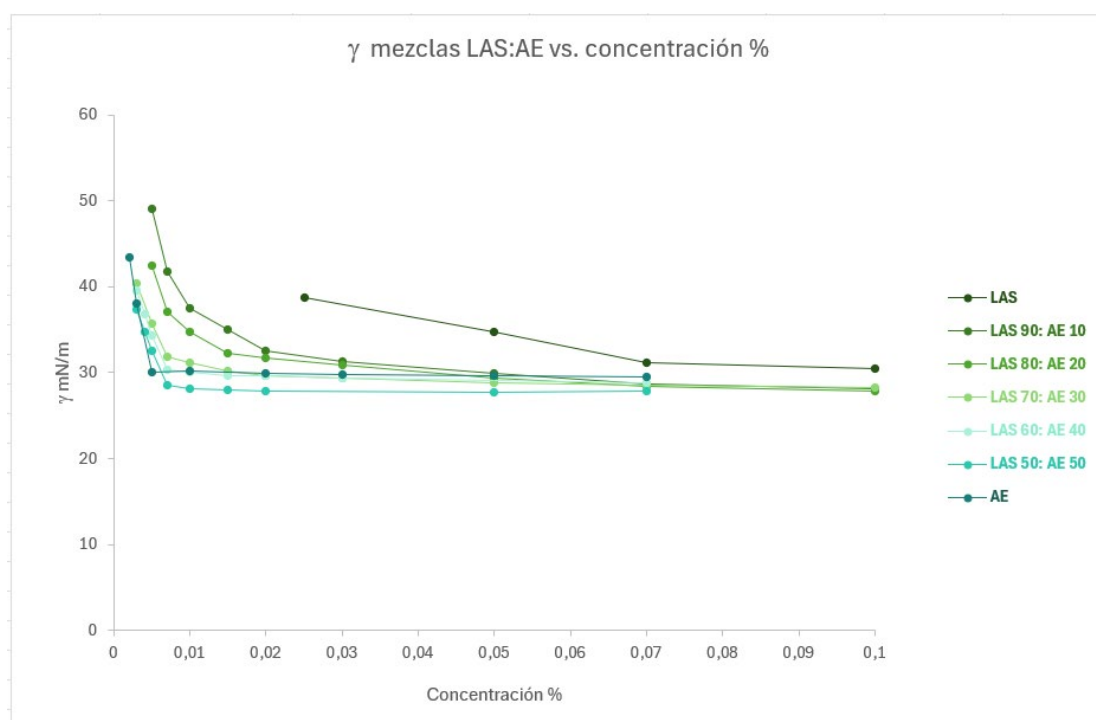


Figura 9. Curvas tensión superficial vs. concentración. Sistema LAS:AE

En la siguiente tabla se resumen los valores obtenidos de CMC y tensión superficial mínima para las diferentes mezclas, así como para los tensioactivos individuales. Se aprecia que, gracias a la generación de micelas mixtas, se consigue una gran reducción de la CMC en comparativa con el LAS, no obstante, en este caso no se logra mejorar la CMC del AE. Esta situación es muy común en los casos en los que las CMC de los tensioactivos individuales son muy diferentes como sucede con el LAS y el AE.

Tabla 8. Concentración micelar crítica (CMC) y tensión superficial mínima. Sistema LAS:AE

DISOLUCIONES	CMC (%)	CMC (mM)	γ mínima (mN/m)
LAS	0,0733	2,195	29,4
90:10 LAS:AE	0,0216	0,604	28,7
80:20 LAS:AE	0,0158	0,416	28,4
70:30 LAS:AE	0,0078	0,194	28,3
60:40 LAS:AE	0,0073	0,171	28,8
50:50 LAS:AE	0,0071	0,159	27,8
AE	0,0049	0,087	29,8

- Potencial irritante (test de la zeína)

En relación al potencial irritante, se ha llevado a cabo el mismo estudio que para las mezclas SLS:LDAO. El siguiente gráfico muestra el valor de zeína del LAS, así como de las diferentes mezclas evaluadas.

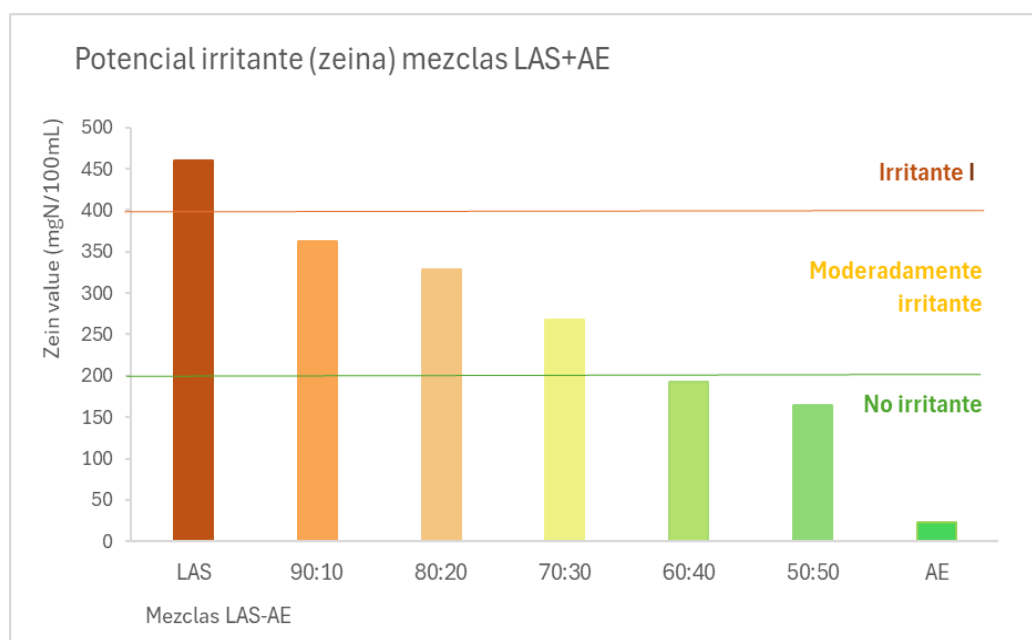


Figura 10. Potencial irritante (zeína) vs. ratio LAS:AE

El Las, como el SLS, es un tensioactivo irritante tipo I, con un valor de zeína cercano a 460mgN/100mL. Gracias a la generación de micelas mixtas, con pequeñas cantidades de AE se reduce drásticamente el potencial irritante, para obtener mezclas moderadamente irritantes o no irritantes para los ratios elevadas de AE.

Para cuantificar la sinergia en la reducción del potencial irritante, se obtiene el valor de zeína de los tensioactivos individuales en la proporción en la que se encuentran en cada una de las mezclas, posteriormente se obtiene la zeína acumulada como la suma del aporte de cada uno de los tensioactivos. Los resultados se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 9. Valor de zeína experimental vs. acumulado y % de aumento (sinergia)

Mezclas tensioactivos	N total (mgN/100mL)	Zeína acumulada (mgN/100mL)	Zeína experimental (mgN/100mL)	% aumento
LAS 90	416,3	434,4	362,0	20,00
AE 10	18,1			
LAS 80	350,3	367,6	328,4	11,94
AE 20	17,3			
LAS 70	303,2	320,7	268,2	19,57
AE 30	17,5			
LAS 60	243,6	261,7	192,9	35,67
AE 40	18,1			
LAS 50	204,1	221,7	164,6	34,69
AE 50	17,6			

En este caso, todos los valores de zeína experimental son bastante menores que la zeína acumulada, no obstante, no se aprecia una tendencia tan clara de aumento de la sinergia con el ratio de AE tal y como sucedía con el sistema SLS:LDAO.

5.2.2. MODELIZACIÓN MATEMÁTICA PARA LA PREDICCIÓN DEL POTENCIAL IRRITANTE

El trabajo realizado en relación a esta línea ha consistido en la obtención de una base de datos de tensioactivos de diferentes familias (aniónico, no iónico, anfótero, etc.), para la cual además de evaluarse el potencial irritante mediante el test de la zeína, se han obtenido (experimentalmente, mediante cálculo o procedente de literatura científica) los siguientes parámetros de interés: longitud de cadena R, concentración micelar crítica CMC, número de etoxilaciones nEO, balance hidrofílico-lipofílico, etc.

A partir de todos estos parámetros y, aplicando metodologías estadísticas y de machine learning como: regresión univariable/multivariable, Principal Component Analysis (PCA), clustering o técnicas de clasificación, se ha podido evaluar la correlación entre las diferentes variables analizadas, la existencia de grupos o clusters en la base de datos creada, y se ha obtenido un modelo matemático predictivo que permite clasificar a un tensioactivo como irritante o no irritante.

Regresión Lineal

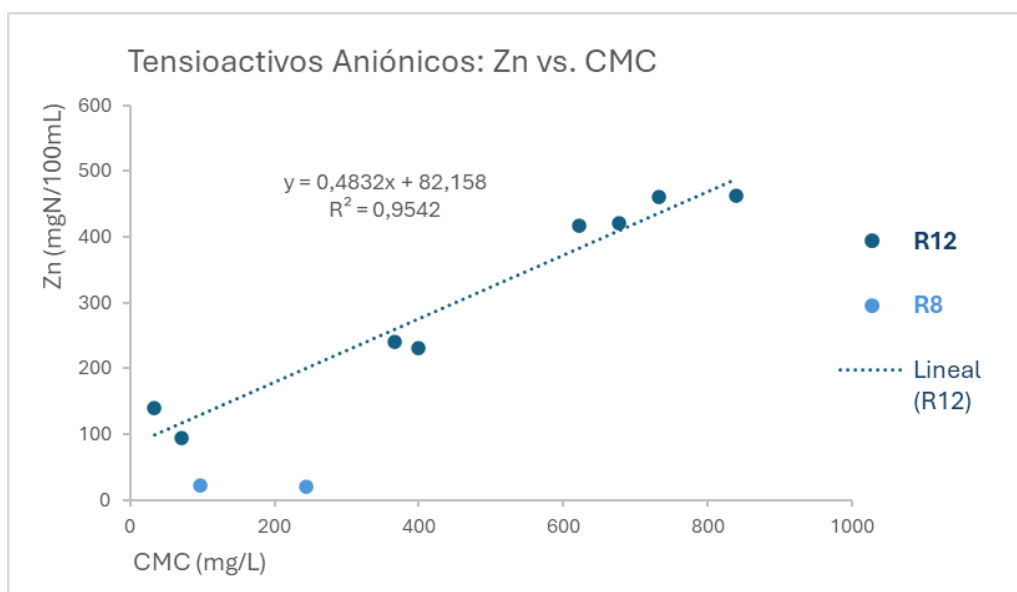


Figura 11. Correlación Zeína vs. CMC tensioactivos aniónicos R12.

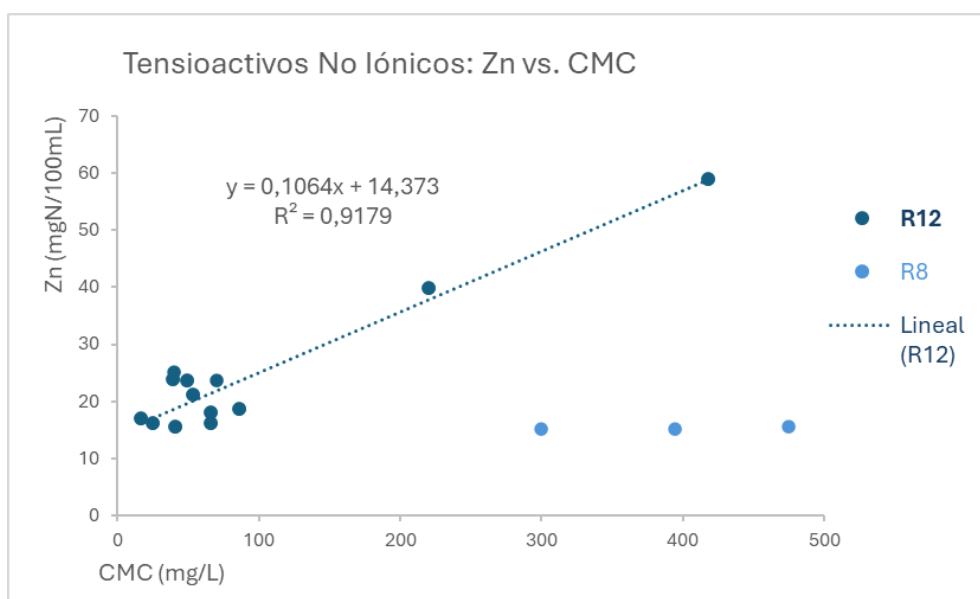


Figura 12. Correlación Zeína vs. CMC tensioactivos no iónicos R12

Clustering

Las metodologías de clustering permiten agrupar, en este caso los tensioactivos, en diferentes grupos o clusters con propiedades similares. Estos métodos generan gráficos y diagramas muy útiles para visualizar rápidamente las propiedades de los tensioactivos y detectar correlaciones entre variables. A continuación, se muestra un heat map y un dendrograma agrupando los tensioactivos de la base de datos en diferentes grupos según sus propiedades (Zeína, peso molecular, CMC, etc.)

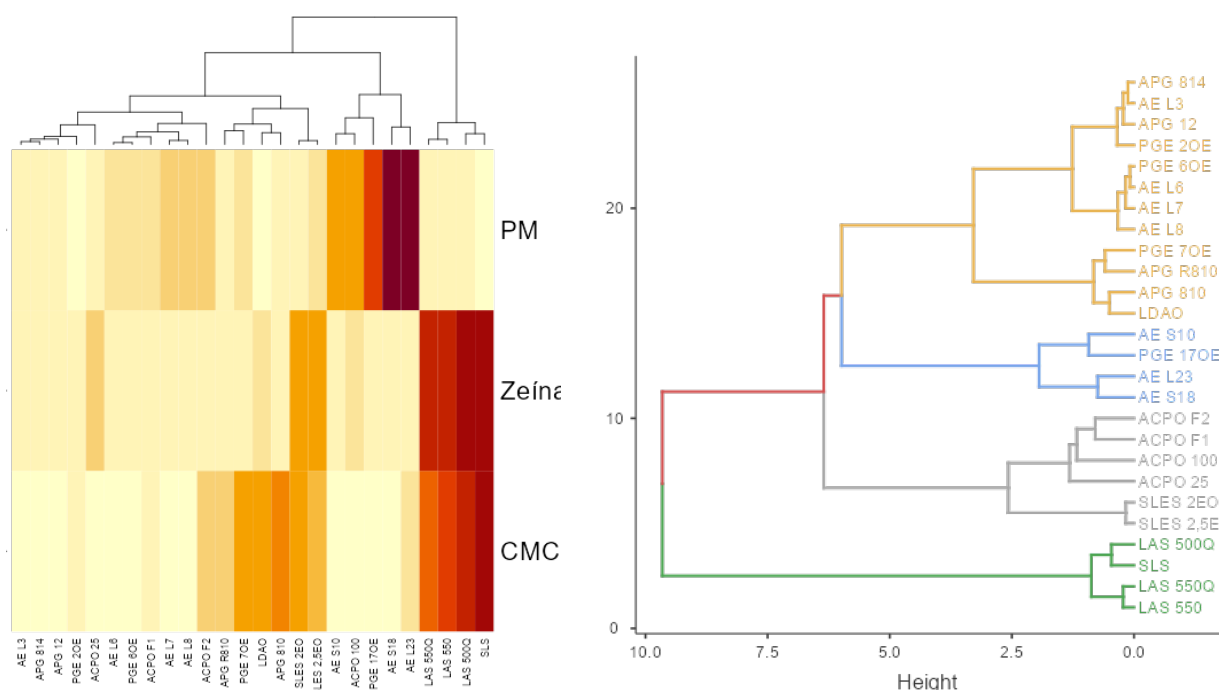


Figura 13. Clustering de la base de datos de tensioactivos mediante (a) heat map y (b) dendrograma

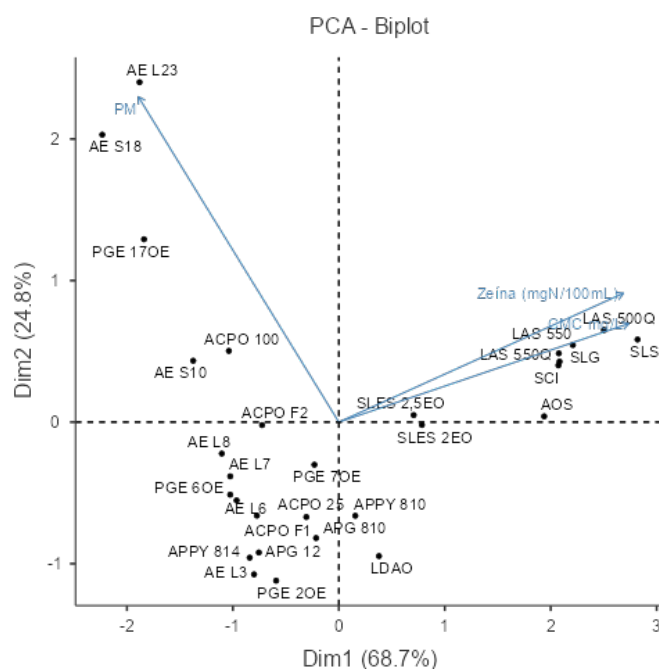


Figura 15. PCA Biplot indicando tanto los individuales como las variables y su direccionalidad

Clasificación

Se ha desarrollado con el software JASP un modelo basado en el algoritmo random forest para la predicción de la clasificación un tensioactivo como irritante/no irritante.

Para crear el modelo, se utilizan las variables: carácter del tensioactivo (aniónico o no iónico), la CMC y el peso molecular.

El modelo se ha creado optimizando el número de árboles para obtener la mayor exactitud con respecto a los OOB. Se ha entrenado con 19 tensioactivos, se ha validado con 5 tensioactivos (100% de aciertos) y se ha testado con 5 tensioactivos (100% exactitud). La exactitud OOB también es 100%.

Tabla 10. Modelo de clasificación (random forest) desarrollado para la predicción de la clasificación de un tensioactivo como irritante/ no irritante

Model Summary: Random Forest Classification ▼

Trees	Features per split	n(Train)	n(Validation)	n(Test)	Validation Accuracy	Test Accuracy	OOB Accuracy
37	1	19	5	5	1.000	1.000	1.000

Note. The model is optimized with respect to the out-of-bag accuracy.

Note. The trained model is saved as ZnPredictedAll.jaspML.

Data Split

Train: 19	Validation: 5	Test: 5	Total: 29
-----------	---------------	---------	-----------

Confusion Matrix

		Predicted	
		Irritante	No irritante
Observed	Irritante	2	0
	No irritante	0	3

En los siguientes gráficos se muestran las variables utilizadas para crear el modelo, así como la variable clasificación Zeína. El color de los puntos corresponde a los valores de zeína experimentales que se utilizan para entrenar el modelo. El color del fondo de los gráficos corresponde a la predicción del modelo. Hay un buen ajuste entre los colores de los puntos y el fondo del gráfico.

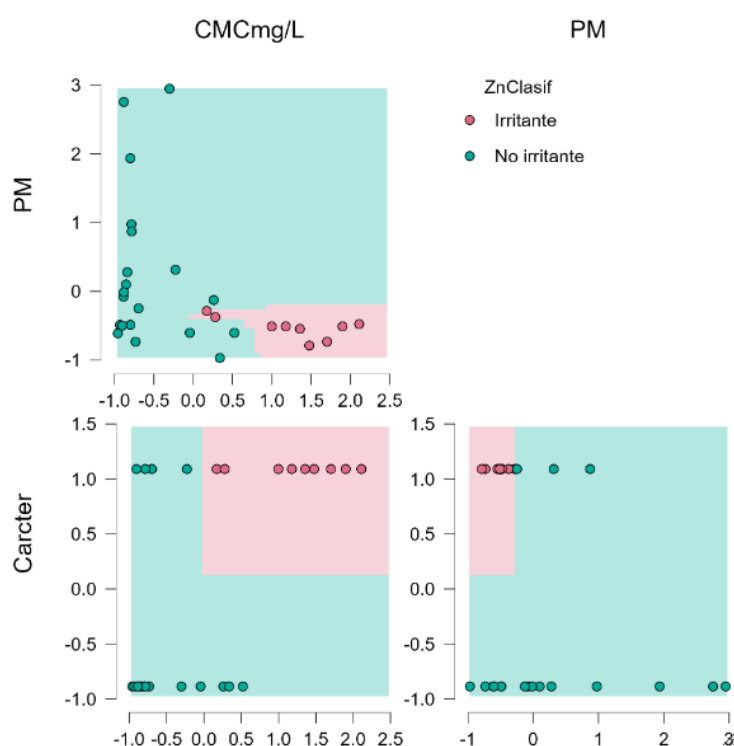


Figura 16. Gráficos con las variables utilizadas para obtener el modelo (PM, carácter y CMC) y la clasificación de Zn obtenida