

“Compuesto cuaternario de amonio a partir de ácidos grasos de aceite de girasol obtenido bajo condiciones supercríticas del metanol, y método de obtención del mismo”

MX-a-2023-012932

Descripción de la Tecnología

La invención presenta un compuesto cuaternario de amonio (QAC o quats) sintetizado a partir de ácidos grasos de aceite de girasol (u otros aceites de origen vegetal como aceite de palma, aceite de oliva, aceite de colza, aceite de soja, aceite de cártamo o aceite de coco) obtenido bajo condiciones supercríticas del metanol (preferiblemente, pero también puede ser etanol, propanol, butanol o pentanol), el cual es obtenido a partir de materia prima de origen natural. Dicho compuesto es altamente soluble en agua y alcohol, actuando en un amplio rango de pH, teniendo una mayor actividad en pH's básicos, en donde el QAC presenta una actividad desinfectante sobre bacterias, hongos y virus, especialmente sobre aquellos que tienen envoltura lipídica.

Se proporciona, además, un proceso de síntesis para la obtención del compuesto de amonio mediante la reacción de alquilación de aminos obtenidas previamente de la reacción entre una dialcanolamina y los ésteres metílicos provenientes de la reacción de transesterificación de los ácidos grasos presentes en el aceite de girasol. Dicho método de síntesis supercrítica del compuesto QAC, involucra tres fases: I) reacción de transesterificación; II) reacción de amidación y, III) reacción de alquilación para la formación del compuesto QAC. En este proceso de síntesis se utilizan disolventes polares como el metanol como disolvente en la reacción de transesterificación, buscando obtener un mayor rendimiento de los triglicéridos en ésteres metílicos, mayor eficiencia en la conversión, tiempos de reacción más cortos y ausencia de formación de jabón por saponificación.

Aplicaciones, beneficios y usos de la tecnología

Las propiedades fisicoquímicas de los QACs pueden ajustarse variando la naturaleza del aminoácido, el número de cadena de acilo/alquilo y el tipo de enlace (amida, éster o alquilo), entre el aminoácido y la porción hidrófoba, lo que da lugar a una gran cantidad de tensoactivos cuaternarios lineales con propiedades fisicoquímicas favorables como lo es la espumabilidad, emulsificación, buena conductividad iónica, capaces de adsorber en una superficie o una interfaz, reduciendo así su tensión superficial. Por otra parte, el alcohol actúa como un catalizador ácido por lo que la mezcla se torna más ácida y la velocidad de reacción se incrementa.

Debido a que los QAC presentan actividad bactericida y viricida, podría ser utilizado como aditivo en la formulación de detergentes líquidos debido a que aumenta y mejora la espuma, viscosidad y muestra buena detergencia, además de actuar como sobreengrasante. Entre otras posibles aplicaciones de los compuestos QAC se encuentra su uso como suavizante de telas, detergente, anti-estático, conservador, biocida y desinfectante. Algunas ventajas que sugiere la invención se enlistarán a continuación:

- La reacción de transesterificación con fluidos supercríticos utilizando disolventes polares como el metanol como disolvente, permite obtener un mayor rendimiento de los triglicéridos en ésteres metílicos, porque la reacción química se acelera drásticamente en condiciones supercríticas.
- La transesterificación en condiciones supercríticas presenta un mayor porcentaje de conversión de ésteres metílicos (99.084%) frente a la transesterificación en condiciones ambientales, donde la conversión de ésteres metílicos es de 96.887%.
- Mayor eficiencia en la conversión, tiempos de reacción más cortos, ausencia de formación de jabón por saponificación.
- La transesterificación a condiciones supercríticas difiere de la convencional en el sentido de que el material oleaginoso siempre se encuentra en contacto directo con el alcohol acidificado.
- El estado supercrítico del disolvente favorece considerablemente a la solubilidad de los ácidos grasos, además los ésteres metílicos obtenidos tras la transesterificación, contienen pocas impurezas.
- Los métodos de transesterificación supercrítica a alta temperatura y presión proporcionan una solubilidad mejorada en las fases del sistema en reacción, disminuye las limitaciones de la transferencia de masa, proporciona mayores velocidades de reacción y se facilitan los pasos de separación y purificación.
- A condiciones supercríticas las reacciones de transesterificación y aminólisis forman una solución homogénea, esto se debe al parámetro de solubilidad y a la constante dieléctrica del metanol, lo que lo convierte en una sustancia no polar adecuada para favorecer estas reacciones.
- La reacción de transesterificación y amidación a condiciones supercríticas son más tolerantes a la presencia de agua y ácidos grasos libres, lo que podría evitar la necesidad de pretratar las materias primas utilizadas en la reacción de transesterificación.
- El uso de CO2 en la reacción de transesterificación y aminólisis favorece a la solubilidad de la mezcla aceite-alcohol, porque actúa como un cosolvente, además, reduce la resistencia al transporte másico conforme aumenta la velocidad de reacción.
- El uso de disolventes a condiciones supercríticas reduce la generación de residuos, este proceso podría reducir los costos de producción ya que tiene menos operaciones unitarias.
- Se convierte una amina terciaria en su compuesto cuaternario mediante su reacción con un halógeno de alquilo, lo que favorece el aumento de la velocidad de reacción con la polaridad del disolvente supercrítico empleado como medio de reacción.

Nivel de madurez de la tecnología

Como resultado de las pruebas de caracterización del aceite de girasol, de su interpretación acerca de la composición y estado del aceite para el uso en la síntesis del compuesto de amonio cuaternario, se obtuvo: índice de acidez, índice de Saponificación, masa molecular promedio de los ácidos grasos ligados, índice de refracción. Asimismo, el aceite de girasol y sus respectivos derivados (ésteres metílicos, amida grasa y QAC) fueron caracterizados mediante análisis de espectrofotometría (FT-IR), análisis de cromatografía acoplada a masas (HPLC-MS), análisis de resonancia magnética nuclear (1HRMN); y se caracterizó la actividad superficial de la amida grasa del aceite de girasol y de su respectivo derivado (QAC).

Por tanto, se estima que esta invención tiene un TRL de 2 que corresponde a la formulación de un Concepto tecnológico y/o de su aplicación, de acuerdo con la escala de la NASA y del estándar internacional ISO/FDIS 16290:2013 “Space Systems – Definition of the Technology Readiness Levels (TRLs) and their criteria of assessment”. Este nivel de maduración tecnológica se caracteriza porque los requisitos de desempeño son definidos de manera general y en congruencia con el concepto o aplicación formulado, como en el caso de esta invención.

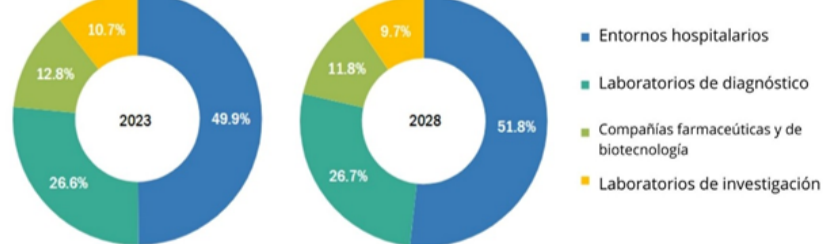
Información de mercado

Las principales aplicaciones que pudiesen derivar de la invención están orientadas a su uso como desinfectante, detergente y biocida, especialmente en entornos hospitalarios por su capacidad contra algunos virus emergentes tales como SARS-CoV-2, estos productos forman parte del mercado desinfectante de superficies. Los desinfectantes de superficies son agentes químicos que se utilizan en superficies duras y en el agua, como el agua potable o las aguas residuales, para destruir, inactivar o reducir significativamente la concentración de patógenos, como bacterias, virus y hongos. Los desinfectantes de superficies se utilizan para evitar la contaminación microbiana cruzada y la transmisión de infecciones microbianas a través de las superficies en hospitales, laboratorios de patología y en laboratorios de investigación de empresas farmacéuticas y biotecnológicas donde se manipulan y mantienen células humanas para investigación y desarrollo. Entre los desafíos de este mercado está el desarrollo de productos con menor impacto al medio ambiente, que se ajusten a las regulaciones internacionales (MarketsandMarkets, 2023).

De acuerdo con MarketsandMarkets (2023), se pronostica que el mercado mundial de desinfectantes de superficies alcance los 4,211.5 millones de USD en 2028, frente a los 2,688.1 millones de USD en 2023, dando una TCAC del 9.4% durante el periodo de pronóstico. El crecimiento de este mercado está impulsado principalmente por factores como la creciente prevalencia de las infecciones asociadas a la atención sanitaria, el aumento de la población de pacientes y el aumento de la prevalencia de enfermedades crónicas. Actualmente las tecnologías que abarcan este mercado incluyen los compuestos con base de alcohol (34.6%), compuestos de cloro (23.2%), compuestos cuaternarios de amonio (13.1%), peróxido de hidrógeno (9.6%), ácido peracético (8.3%) y otras composiciones (11.2%).

MERCADO DE DESINFECTANTES DE SUPERFICIES, PARTICIPACIÓN POR USUARIO FINAL, 2023 FRENTE A 2028

LOS ENTORNOS HOSPITALARIOS DOMINARÁN EL MERCADO DURANTE EL PERIODO DE PRONÓSTICO



Fuente: US Food and Drug Administration (US FDA), National Institutes of Health (NIH), National Center for Biotechnology Information (NCBI), Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD), Centers for Disease Control and Prevention (CDC), World Health Organization (WHO), International Monetary Fund (IMF), Healthcare Infection Society (HIS), Association for Professionals in Infection Control and Epidemiology (APIC), Asia Pacific Society of Infection Control (APSIC), International Federation of Infection Control (IFIC), US Environmental Protection Agency (US EPA), Ministry of Health and Family Welfare India, India Brand Equity Foundation (IBEF), US Census Bureau, Annual Reports, SEC Filings, Expert Interviews, and MarketsandMarkets Analysis.

En general, “los QAC se clasifican como fungicidas y viricidas contra virus con envoltura, pero tienen poca actividad contra micobacterias y virus sin envoltura como el norovirus” (Boyce, 2023). En el mercado existe una amplia variedad de productos a base de QACs, como las toallitas desinfectantes o en compuestos líquidos. Las toallitas desinfectantes a base de compuestos de amonio cuaternario se utilizan en instalaciones clínicas para la desinfección preoperatoria de instrumentos no críticos, la limpieza de superficies duras y la desodorización y desinfección de equipos médicos. Aunque estos compuestos son activos tanto en forma ácida como alcalina, la forma alcalina de estos productos se considera más eficaz. Las toallitas a base de compuestos de amonio cuaternario también tienen una actividad germicida superior, son poco espumosas y presentan una gran tolerancia a las cargas proteínicas y al agua dura. (MarketsandMarkets, 2023)

Ahora bien, México abarca el 25.2% del mercado latinoamericano de desinfectantes de superficies. En México, la infraestructura de salud al 2023 es de aproximadamente 3,400 hospitales, arriba de 170,000 camas hospitalarias y más de 7,200 salas de operación (Statista, 2023), todo lo cual denota el potencial de aplicación de los desinfectantes de superficies. Debido a la prevalencia de las infecciones asociadas a la atención sanitaria y del crecimiento de la población geriátrica, la demanda de esterilización de equipo médico ha crecido en el país. (MarketsandMarkets, 2023)

MÉXICO: MERCADO DE DESINFECTANTES DE SUPERFICIES, POR COMPOSICIÓN, 2021-2028 (MILLONES DE DÓLARES ESTADOUNIDENSES)

Composición	2021	2022	2023	2024	2025	2026	2027	2028	TCAC (2023-2028)
Alcohol	12.3	13.2	14.1	15.3	16.5	18.0	19.6	21.5	8.8%
Compuestos de cloro	8.9	9.1	9.5	9.8	10.3	10.7	11.3	12.1	5.0%
Compuestos cuaternarios de amonio	5.1	5.2	5.4	5.6	5.8	6.1	6.4	6.8	4.7%
Peróxido de hidrógeno	3.7	3.8	4.0	4.1	4.2	4.4	4.6	4.9	4.1%
Ácido peracético	3.3	3.3	3.4	3.5	3.7	3.8	4.0	4.2	4.3%
Otros compuestos	4.4	4.5	4.6	4.7	4.9	5.0	5.3	5.6	4.0%
Total	37.7	39.1	41.0	43.0	45.4	48.0	51.2	55.1	6.1%

Fuente: US Food and Drug Administration (US FDA), National Institutes of Health (NIH), National Center for Biotechnology Information (NCBI), Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD), Centers for Disease Control and Prevention (CDC), World Health Organization (WHO), International Monetary Fund (IMF), Healthcare Infection Society (HIS), Association for Professionals in Infection Control and Epidemiology (APIC), Asia Pacific Society of Infection Control (APSIC), International Federation of Infection Control (IFIC), US Environmental Protection Agency (US EPA), Ministry of Health and Family Welfare India, India Brand Equity Foundation (IBEF), US Census Bureau, Annual Reports, SEC Filings, Expert Interviews, and MarketsandMarkets Analysis.