

Informe Analisis
Determinación molecular y efectos Fisicoquímicos
Muestras AG20N – AG22N
Francisca Leiva Moret
Química Molecular
06.12.2019
Santiago, Chile

Introducción

La determinación de los principios activos presentes, pretende esclarecer la composición química del agua utilizada en los carros lanza agua para el control de disturbios.

Identificación molecular de los compuestos o PA en dos muestras acuosas rotuladas AG20N – AG22N; Las muestras fueron otorgadas con dicho rotulo, sin conocimiento alguno de su composición.

Establecer los efectos y respuestas ante la exposición, interna y externa del organismo

Protocolo de Analisis

Disposición de muestras:

- **AG20N** [Toma de muestra correspondiente al 20 de Noviembre, intersección calle Ramon Corbalán con Libertador Bernardo O´Higgins, Plaza Baquedano. Santiago, Chile]
- **AG22N** [Toma de muestra correspondiente al 22 de Noviembre, intersección calle Ramon Corbalán con Libertador Bernardo O´Higgins, Plaza Baquedano. Santiago, Chile]

Se procedió a realizar pruebas específicas para alcaloides (metabolitos secundarios), ensayo de Dragendorff, Mayer y Wagner.

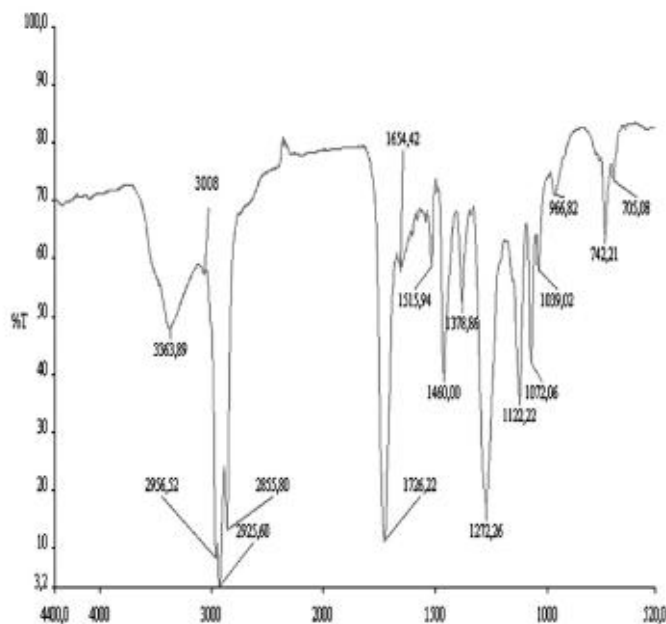
Para purificación del PA se utilizo Columna cromatográfica LiChroCART® RP-18(5 µm) Reactivo Etanol grado HPLC (Merck)

Finalmente se hicieron pruebas de identificación por espectroscopia de absorción atómica (EAA) e Infrarojo (IR)

Equipo de Espectrofotometría de Absorción Atómica, Marca THERMO, Modelo A5.
Espectrofotómetro de Infrarrojo Bruker IFS 25.

Resultados

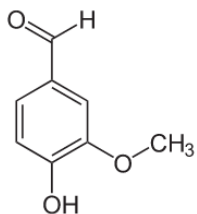
Determinación **AG20N IR**



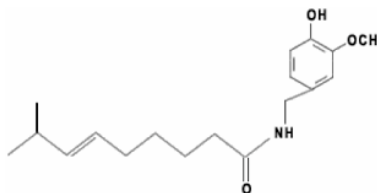
(Fig.1)

<< Espectro IR de Capsaicina

La figura presenta el espectro de infrarrojo de Vaniloide (Figura 1) de Capsaicina en el cual se distingue en la banda 3363,89 cm⁻¹ que corresponde a vibraciones de tensión de enlace N-H amidas. La banda en 3011 cm⁻¹ app corresponde a vibraciones enlace C-H en compuestos aromáticos. Banda 2876 cm⁻¹ Vibración de tensión enlace C-H en alquenos. Finalmente en 1729 cm⁻¹ vibraciones en enlace C=O del grupo amida. (Figura 2)

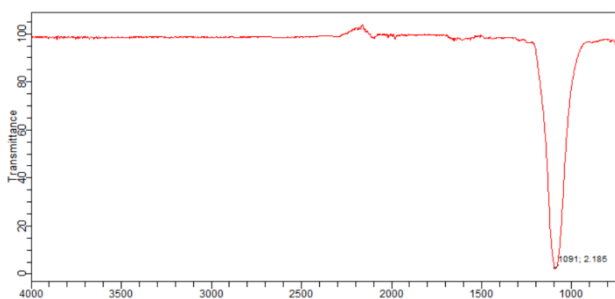


(Fig. 2) Vaniloide



[cola apolar] (Fig. 3) Capsaicina

Determinación **AG22N IR/ RMN**



(4) IR NA (Sodio)

<< Espectro IR de Sodio

La figura presenta el espectro de infrarrojo de Sodio (Figura 4) el cual se distingue en la banda 1091 cm⁻¹: 2185

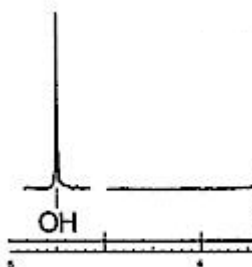
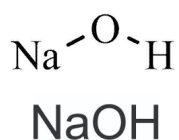


Figura (5) representa la señal del OH (Hidroxido) ubicado en 3,875 ppm -1

Determinandose por simulacion en ChemDraw® según señal obtenida en RMN Espectro H+ de Hidroxido de Sodio.

(5) RMN OH



Iones Na^+ y OH^- interaccionan mutuamente mediante la atracción electrostática de sus cargas opuestas.

Tales interacciones son no direccionales, por lo que las atracciones de un par iónico Na^+OH^- puede afectar las de otros a una cierta distancia. El resultado es que los iones Na^+ se repelen entre sí, de igual modo que los OH^- , hasta definir un cristal de mínima energía donde establecen una estructura ordenada y periódica (cristalina).

Mecanismo de Acción Capsaicina

La capsaicina interacciona con el receptor vaniloide VR1 de las fibras sensitivas tipo C. Presenta un 92% de homología con el receptor VR1 de la rata (rVR1) Este receptor es un canal no selectivo de cationes, con una alta permeabilidad para el calcio²⁺. Hay un creciente número de proteínas que poseen una alta homología con el receptor VR1. Sin embargo, ninguna de estas proteínas parece responder a los ligandos del receptor VR1.

La capsaicina favorece la liberación e inhibe la biosíntesis y el transporte axonal de la sustancia P, lo que conlleva una depleción de la sustancia P en el sistema nervioso central y periférico

La sustancia P es un mediador de los impulsos nociceptivos, incrementando la transmisión de estímulos dolorosos desde la perifera hasta el SNC

También disminuyen los niveles de otros neuropéptidos, como la somatostatina, el polipéptido vasoactivo intestinal, etc.

80% de los casos puede darse sensación de quemazón o escozor cutáneo en la zona de aplicación. La quemazón puede impedir realizar estudios de doble ciego. Esta sensación desagradable disminuye a medida que se repiten las aplicaciones y parece ser consecuencia de la liberación de sustancia P de las terminaciones nerviosas periféricas y su acumulación en la sinapsis. El agua caliente, la excesiva sudoración o la oclusión pueden intensificar dicha sensación.

La exposición accidental de los ojos a capsaicina puede producir cambios en la estructura fina de las neuronas sensoriales de la córnea. El eritema es también un efecto común. Cuando se vierte en los ojos de las ratas, 50 mg/ml producen blefaroespasma y dolor. Los estudios en animales han demostrado que los ojos expuestos a capsaicina, además de irritarse, reaccionan en forma diferente, posiblemente debido a la depleción de sustancia P. Si estos ojos se pretratan con capsaicina y luego se exponen a un tóxico ocular con mostaza nitrogenada, formaldehído o capsaicina, no desarrollan la miosis normal, hiperemia del iris ni elevación de la presión intraocular que se espera en animales no tratados. Mucosas Capsaicina irrita todas las membranas de las mucosas. Tocarse las fosas nasales luego de haber estado en contacto con plantas u objetos que contienen capsaicina produce irritación. El humo proveniente de quemar el PA también produce irritación de la nariz y el tracto respiratorio.

Su mecanismo de acción parece que se basa en la estimulación selectiva de las neuronas de las fibras amielínicas C, provocando la liberación de sustancia P y posiblemente otros neurotransmisores; y finalmente una depleción de sustancia P, con lo que se produciría una alteración de la transmisión del dolor a los sistemas centrales produciéndose un fenómeno de desensibilización.

Mecanismo de acción NAOH

Síntomas

A continuación se encuentran síntomas de una intoxicación o una exposición al hidróxido de sodio en distintas partes del cuerpo.

VÍAS RESPIRATORIAS Y PULMONES

- Dificultad respiratoria (por inhalar hidróxido de sodio)
Inflamación del pulmón
- Estornudo
- Inflamación en la garganta (que también puede causar dificultad respiratoria)

ESÓFAGO, INTESTINOS Y ESTÓMAGO

- Sangre en las heces
- Quemaduras en el esófago y el estómago
- Diarrea
- Dolor abdominal fuerte
- Vómitos, posiblemente con sangre

OJOS, OÍDOS, NARIZ Y GARGANTA

- Babeo
- Fuerte dolor en la garganta
- Fuerte dolor o ardor en la nariz, los ojos, los oídos, los labios o la lengua
- Pérdida de la visión

CARDIOVASCULARES

- Desmayo
- Presión arterial baja (se presenta rápidamente)
- Cambio grave en el pH de la sangre (demasiado o muy poco ácido en la sangre)
- Shock

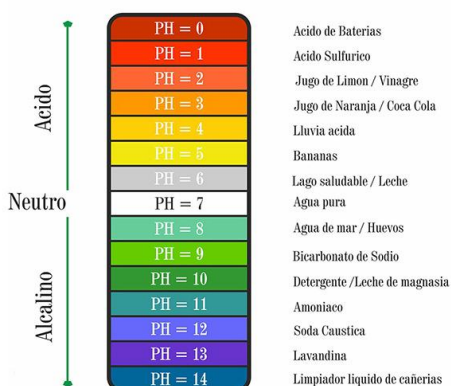
PIEL

- Quemaduras
- Urticaria
- Irritación
- Orificios en la piel o tejidos debajo de esta

CONCLUSIÓN

De la muestra **AG20N** acuosa, se determina la presencia de PA Vaniloide Capsaicina, (**oleorresina capsicum** (ORC)). Esta señal presenta algo de ruido lo que interfiere en la dilucidación de otras moléculas presentes, probablemente la molécula original se hidrolizó por la alcalinidad del medio lo que hace suponer la presencia de NaOH.

La muestra **AG22N** muestra una disolución acuosa alcalina de PH 12, que coincide con la escala de compuestos químicos más comunes (Ver tabla PH), donde se determina la presencia de la molécula de hidróxido de sodio y Vaniloide Capsaicina (confirmada en la muestra AG20N)



El **hidróxido de sodio** es un compuesto inorgánico que consiste de una base o álcali metálica muy fuerte. Una solución al 5 % de la misma en agua tiene un pH cercano a 14. Tanto el Na^+ como el OH^- son iones que las moléculas de agua solvatan (hidratan) con facilidad. Esto favorece su hidratación por encima de la energía reticular de sus cristales, por lo que el NaOH libera mucha energía cuando entra en contacto con el agua. No obstante, los cristales anhidros pueden hospedar moléculas de agua sin disolverse; esto es, el hidróxido de sodio puede formar numerosos hidratos, $\text{NaOH}\cdot n\text{H}_2\text{O}$.

La molécula de agua puede bien formar un puente de hidrógeno con el OH^- ($\text{HOH}-\text{OH}$), o coordinarse con el Na^+ (Na^+-OH_2). Dependiendo de la proporción molar entre NaOH y H_2O , pueden surgir monohidratos ($\text{NaOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$), dihidratos ($\text{NaOH}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$), trihidratos ($\text{NaOH}\cdot 3.5\text{H}_2\text{O}$), tetrahidratos ($\text{NaOH}\cdot 4\text{H}_2\text{O}$), heptahidratos ($\text{NaOH}\cdot 7\text{H}_2\text{O}$), y otros más.

Las oleorresinas provenientes de las especies de *Capsicum* son insolubles en agua (inmiscibles), debiendo utilizar medios álcalis para su incorporación a ésta. La mezcla álcali - Capsaicina genera un aumento considerable en la acción del vaniloide, una fuerte sensación de ardor (pungencia) en la boca, mucosas y piel. La capsaicina y otras sustancias relacionadas se denominan **capsaicinoides** y se producen como un metabolito secundario en diversas especies de plantas del género *Capsicum* para su obtención de origen natural.

Actúan a nivel del sistema nervioso, mientras que el hidróxido de sodio genera el medio físico para su propagación sumándose los efectos irritantes y corrosivos que este último genera en el ser humano.

Los niveles permitidos por la Administración de Alimentos y Medicamentos (FDA) del hidróxido de sodio como aditivo en alimentos son inferiores al 1%.

BIBLIOGRAFÍA

Coderre TJ, Katz J, Vaccarino AL, Melzack R. Contribution of central neuroplasticity to pathological pain: review of clinical and experimental evidence. *Pain* 1993; 52: 259-85.

Vanilloid (Capsaicin) Receptors and Mechanisms Arpad Szallasi and Peter M. Blumberg, *Pharmacological Reviews* June 1999, 51 (2) 159-212

Policy and Research, U. S. Department of Health and Human Services, Public Health Service, 1994.

International Association for the Study of Pain. Classification of chronic pain. *Pain* 1986 (Supl. 3): S216-221.

Hayes P, Meadows HJ, Gunthorpe MJ, et al. Cloning and functional expression of a human orthologue of rat vanilloid receptor-1. *Pain* 2000; 88: 205-15.

Hokfelt T, Kellerth JO, Nilsson G, Pernow B. Substance P: localization in the central nervous system and in some primary sensory neurons. *Science* 1975; 190: 889-90.

Simone DA, Ochoa J. Early and late effects of prolonged topical capsaicin on cutaneous sensibility and neurogenic vasodilation in humans. *Pain* 1991; 47: 285-94

Fitzgerald M. Capsaicin and sensory neurones -a review. *P* 1983; 15: 109-30.

Kennis P. Response of single nerve fibres to capsaicin applied to the skin. *Neuroscience Letters* 1982; 29: 83-8.

Winter J, Bevan S, Campbell A. Capsaicin and pain mechanisms. *Br J Anaesth* 1995; 75: 157-68.

Szolcsanyi J. Actions of capsaicin on sensory neurones. In: Wood JN, ed. *Capsaicin in the study of pain*. London: Academic Press 1993. p. 1-26

Szolcsanyi J, Anton F, Reeh PW, Handwerker HO. Selective excitation by capsaicin of mechano-heat sensitive nociceptors in rat skin. *Brain Res* 1988; 446: 262-8. [

Culp WJ, Ochoa J, Cline M, Dotson R. Heat and mechanical hyperalgesia induced by capsaicin: cross modality threshold modulation in human C nociceptors. *Brain* 1989; 112: 1317-31

Nolano M, Simone DA, Wendelschafer-Crabb G, Kennedy WR. Decreased sensation and loss of epidermal nerve fibers following repeated topical application of capsaicin in humans. *Society for Neuroscience* 1996; 22: 1802

Vidal MA, Calderón E, Román D, Pérez-Bustamante F, Torres LM. Topical capsaicin for the management of neuropathic pain. *Rev Soc Esp Dolor* 2004; 11: 306-318.

[khanacademy.org/science/organic-chemistry/spectroscopy-jay](https://www.khanacademy.org/science/organic-chemistry/spectroscopy-jay) 2019

Helmut Duddeck, Wolfgang Dietrich, Gábor Tóth – 2000, 245

Stephen J. Weininger Frank R. Stermitz- 1988, 332

Determinacion Estructural de Compuestos Organicos, Ernő Pretsch – 2002, 125

La revolución química: Entre la historia y la memoria, José Ramón Bertomeu Sánchez, Antonio García Belmar – 2011, 264

Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR) website. Atlanta, GA: U.S. Department of Health and Human Services, Public Health Service. Medical Management Guidelines for Sodium Hydroxide

(NaOH). www.atsdr.cdc.gov/MMG/MMG.asp?id=246&tid=45. Updated October 21, 2014. Accessed May 14, 2019.

Hoyte C. Caustics. In: Walls RM, Hockberger RS, Gausche-Hill M, eds. *Rosen's Emergency Medicine: Concepts and Clinical Practice*. 9th ed. Philadelphia, PA: Elsevier; 2018:chap 148.

Thomas SHL. Poisoning. In: Ralston SH, Penman ID, Strachan MWJ, Hobson RP, eds. *Davidson's Principles and Practice of Medicine*. 23rd ed. Philadelphia, PA: Elsevier; 2018:chap 7.

Shiver & Atkins. (2008). *Química Inorgánica*. (Cuarta edición). Mc Graw Hill.

Wikipedia. (2019). Sodium hydroxide. Recuperado de: en.wikipedia.org

National Center for Biotechnology Information. (2019). Sodium hydroxide. PubChem Database. CID=14798. Recuperado de: pubchem.ncbi.nlm.nih.gov

American Elements. (2019). Sodium hydroxide solution. Recuperado de: americanelements.com

Chemical Safety facts. (2019). Sodium hydroxide. Recuperado de: chemicalsafetyfacts.org

NJ Health. (2015). Sodium hydroxide. [PDF]. Recuperado de: nj.gov

Canadian Centre for Occupational Health & Safety. (2019). OSH Answers Fact Sheets: sodium hydroxide. Recuperado de: ccohs.ca

Ausetute. (s.f.). Sodium Hydroxide and Chlorine Production by Electrolysis. Recuperado de: ausetute.com.au

Francisca Leiva Moret
Msc Química Molecular
Santiago 06 de diciembre de 2019