

REACCIÓN DE SAPONIFICACIÓN. JABÓN POTÁSICO

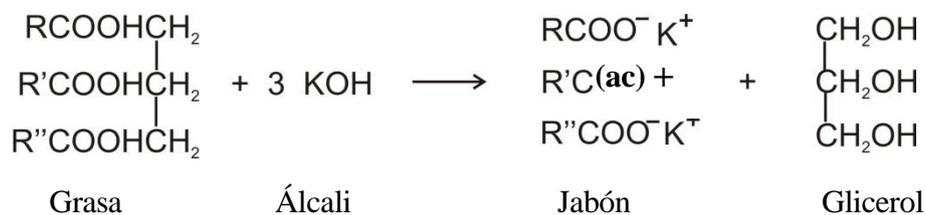
Interés de la situación planteada

El jabón es ese producto que todos tenemos en casa y que usamos para la higiene personal y para la limpieza de la ropa y otros objetos. Consiste básicamente en una sal sódica o potásica de un ácido graso.

Los jabones se obtienen mediante reacción entre grasas o aceites vegetales y un álcali, (generalmente hidróxido de sodio o hidróxido de potasio). El proceso se conoce como reacción de saponificación.

A temperatura ambiente, las grasas son sólidos y los aceites son líquidos, pero a pesar de esta diferencia, su estructura es la misma: ambos son triésteres del glicerol (o glicerina) y algunos ácidos orgánicos de cadena larga (ácidos grasos). En general se denominan “triglicéridos”.

En la ecuación química siguiente se muestra una reacción general de saponificación utilizando como álcali el hidróxido de potasio:



El proceso anterior representa la reacción de un triglicérido con hidróxido de potasio. En ese proceso, por cada molécula de triglicérido que reaccione, se forman tres moléculas distintas de jabón y una de glicerol (propano-1,2,3-triol). Cada molécula de jabón corresponde a la sal de un ácido graso.

Los jabones ejercen su acción limpiadora gracias a que al disolverse en agua disminuyen la tensión superficial, con lo que favorecen la capacidad de mojar de la misma y son capaces de solubilizar las grasas. Esto lo consiguen gracias a la estructura de sus partículas que contienen una parte lipófila correspondiente a la cadena hidrocarbonada y otra hidrófila correspondiente al grupo carboxilato. En el proceso de limpieza las partículas de jabón rodean a las partículas de grasa por su parte lipófila y orientan su extremo hidrófilo hacia el agua formando micelas coloidales cargadas que se repelen manteniéndose en suspensión. Según las grasas o aceites y los álcalis utilizados en la reacción de saponificación se obtienen jabones de diferentes propiedades.

El jabón potásico además de utilizarse en limpieza se utiliza en jardinería y agricultura ecológica, donde se ha mostrado un eficaz insecticida, biodegradable y totalmente inocuo para personas y otros animales.

La preparación de jabón es un proceso relativamente sencillo; antiguamente se realizaba en los hogares como una forma de reutilizar las grasas o aceites sobrantes. A este respecto, es necesario tener en cuenta que los aceites usados no se deben de eliminar por el fregadero, puesto que generan problemas en la depuración del agua y perjudican seriamente la calidad de las aguas de ríos y mares. Una posible solución al problema de la gestión de este residuo, sería usarlo en la producción de jabón potásico para ser utilizado en la limpieza y el tratamiento de las plantas en los hogares.

Puesto que desconoceremos la naturaleza exacta de las grasas en los aceites usados, para obtener un jabón de calidad deberemos determinar la cantidad de hidróxido de potasio necesaria para realizar la reacción de

saponificación de forma correcta. Esta cantidad se realiza mediante el cálculo del índice de saponificación (en adelante, IS), el cual indica la masa mínima de álcali (dada en miligramos) necesaria para la saponificación de 1 gramo de un aceite o grasa dados. De acuerdo con la definición anterior:

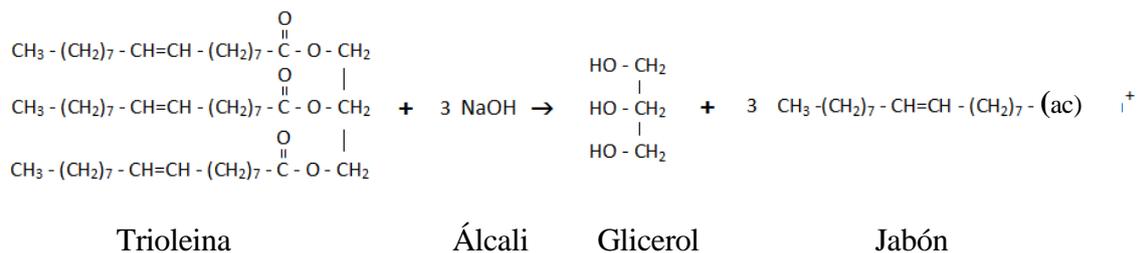
$$IS = \frac{m_{alc}}{m_{ace}} \cdot 1000$$

En la ecuación anterior, m_{alc} es la masa de álcali y m_{ace} la masa de aceite (ambas en gramos), por lo que el cociente representa los gramos de álcali necesarios por cada gramo de aceite. El hecho de multiplicar dicho cociente por 1000 es para transformar esos gramos de álcali en miligramos.

A continuación, se proponen algunos problemas sobre saponificación. Comenzaremos por abordar una situación muy simple como la que corresponde a una saponificación en la que interviene un único ácido graso.

11-a. La trioleína es el triglicérido del ácido oléico y se puede encontrar en el aceite de oliva, aceite de almendras y en muchos otros aceites de origen animal y vegetal. Se utiliza para la fabricación del jabón de Marsella mediante una reacción de saponificación. Calculad la masa de hidróxido de sodio necesaria para la saponificación de 120 g de trioleína.

La reacción de saponificación se muestra en la siguiente ecuación química:



De la estequiometría de la reacción, se deduce que cada mol de trioleína que reaccione lo hará con tres moles de hidróxido de sodio para dar un mol de glicerina y 3 moles de oleato de sodio.

En general, en una reacción de este tipo, la masa de álcali mínima necesaria para que reaccione todo el triglicérido, es decir, para la saponificación completa, aumentará al aumentar la masa de triglicérido, también cuando disminuya la masa molar del triglicérido (puesto que a mayor masa molar menor será el número de moles de triglicérido para una igual cantidad de gramos), y cuando aumente la masa molar del álcali (puesto que al aumentar esta, a un mismo número de moles, le corresponderá más masa).

Esquemáticamente:

$$m_{alc} = f(m_{tri}, M_{tri}, M_{alc})$$

Obviamente, cuando la masa de triglicérido sea nula la masa de álcali también deberá de ser cero.

Para resolver el problema, podemos utilizar primero la proporción en moles en la que se combinan los reactivos y, después, a partir de la relación existente del número de moles con la masa y la masa molar, obtener la masa que buscamos:

En efecto, mediante los coeficientes estequiométricos de la reacción, sabemos que:

$$\frac{n_{\text{NaOH}}}{n_{\text{tri}}} = \frac{3}{1} \rightarrow n_{\text{NaOH}} = 3 \cdot n_{\text{tri}}$$

Teniendo en cuenta ahora que $n = m/M$, la última ecuación anterior se transforma en:

$$\frac{m_{\text{NaOH}}}{M_{\text{NaOH}}} = 3 \cdot \frac{m_{\text{tri}}}{M_{\text{tri}}}$$

Y, despejando:

$$m_{\text{NaOH}} = 3 \cdot \frac{m_{\text{tri}}}{M_{\text{tri}}} \cdot M_{\text{NaOH}}$$

Finalmente, sustituyendo los valores numéricos (masa molar del hidróxido de sodio 40 g/mol y de la trioleína 885'43 g/mol), se obtiene que $m_{\text{NaOH}} = 16'3$ g

Comprobamos que el resultado literal es dimensionalmente homogéneo (masa en ambos lados de la ecuación) y que, además, se cumplen todas las predicciones respecto a las relaciones entre variables. Cuando la masa de triglicérido es cero la masa de álcali (NaOH) se anula. La masa de álcali aumentará al aumentar su masa molar.

El índice de saponificación será:

$$IS = \frac{m_{\text{alc}}}{m_{\text{ace}}} \cdot 1000 = \frac{16'3}{120} \cdot 1000 = 135'83$$

El IS obtenido, indica que se necesitan 135'83 miligramos de NaOH por cada gramo de trioleína, para que se produzca la saponificación correctamente.

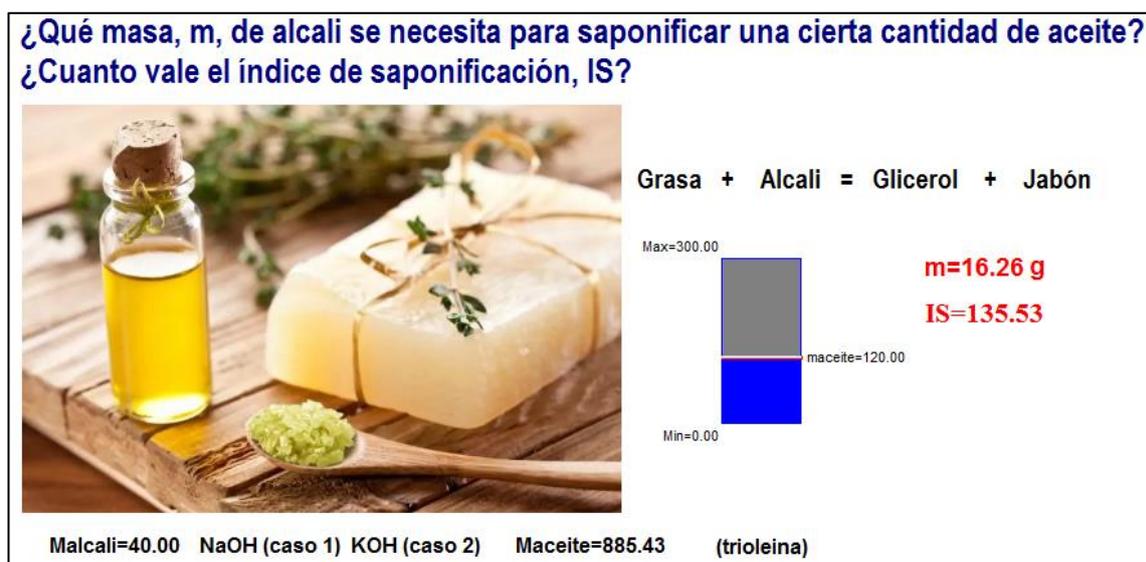
Podemos simplificar la expresión del índice de saponificación teniendo en cuenta que habitualmente los álcalis (bases) utilizadas para la saponificación son hidróxido de sodio (NaOH) o hidróxido de potasio (KOH).

$$IS = \frac{m_{\text{alc}}}{m_{\text{tri}}} \cdot 1000 = \frac{3 \cdot \frac{m_{\text{tri}}}{M_{\text{tri}}} \cdot M_{\text{alc}}}{m_{\text{tri}}} \cdot 1000 = \frac{3000 M_{\text{alc}}}{M_{\text{tri}}}$$

Sustituyendo en la expresión anterior las masas molares de los álcalis por 40 g/mol y 56'1 g/mol para hidróxido de sodio y potasio respectivamente, se obtienen:

$$IS(\text{NaOH}) = \frac{120000}{M_{tri}} ; IS(\text{KOH}) = \frac{168300}{M_{tri}}$$

Refuerzo: Para reforzar este problema, se puede usar una animación *Modellus* que hemos elaborado sobre él. Ilustra la reacción de saponificación y obtiene la masa de álcali necesaria para dicha saponificación, así como el índice IS. En la pantalla se dispone de un controlador manual con el que los estudiantes pueden modificar el valor de la masa de triglicérido, cuya masa molecular también puede variarse si se desea. Además, la animación plantea dos casos posibles, según se utilice como álcali NaOH o KOH. La imagen adjunta muestra el aspecto de la pantalla en el primer caso (NaOH) y para los valores de los parámetros que hemos considerado aquí.



La animación y el programa para hacerla correr están disponibles en la página “Web de Materiales para la Enseñanza y la Divulgación de la Física”, de la Sección Local de Alicante de la RSEF. <http://rsefalicante.umh.es/fisica.htm>

La situación planteada en este problema, en la que interviene un único ácido graso no es muy común, aunque se puede dar en procesos en los que se trata de fabricar jabones cosméticos de alta calidad. Se puede, ahora, avanzar un poco más y plantearse qué ocurrirá en la saponificación cuando en lugar de un único ácido graso, intervengan varios ácidos grasos diferentes en el proceso.

11-b. Determinad el índice de saponificación de una muestra de aceite de girasol que contiene un 65’7% de ácido linoléico $\text{C}_{18}\text{H}_{32}\text{O}_2$, 19’5% de ácido oleico $\text{C}_{18}\text{H}_{34}\text{O}_2$, 5’9% de ácido palmítico $\text{C}_{16}\text{H}_{32}\text{O}_2$ y 4’8% de ácido esteárico $\text{C}_{18}\text{H}_{32}\text{O}_2$.

Vemos que en el caso propuesto (al igual que en el problema anterior), a pesar de que los ácidos grasos en los aceites y grasas derivan realmente de las moléculas de triglicéridos (es decir, no están presentes como tales ácidos grasos), se trabaja directamente con ácidos grasos. Ello se debe a que esta es la forma más habitual en que se da la composición de los aceites más comunes. A efectos de estequiometría, esto no tiene ninguna relevancia en la reacción de saponificación y únicamente deja sin explicación la aparición de glicerina en el proceso.

El índice de saponificación será:
$$IS = \frac{m_{KOH}}{m_{aceite}} \cdot 1000$$

Cabe esperar que el IS (masa de álcali necesaria para la saponificación de 1 g de aceite), será tanto mayor cuanto más altas sean las proporciones en masa (m_i) de los ácidos grasos considerados o, lo que es equivalente, cuanto mayor sea el número de moles (n_i) y menor la masa molar (M_i) en cada uno de ellos.

Puesto que la composición del aceite está expresada en porcentaje en masa, tomaremos como masa de aceite 100 g.

Debido a que cada ácido graso consume una masa diferente de hidróxido de potasio deberemos de realizar el cálculo por separado y después realizar la suma.

$$m_{KOH} = \sum_{i=1}^N m_{KOH,i} = \sum_{i=1}^N n_{KOH,i} \cdot M_{KOH} = M_{KOH} \cdot \sum_{i=1}^N n_{KOH,i}$$

Como la estequiometría de la reacción entre RCOOH y KOH es 1:1, el número de moles de KOH coincidirá con los moles de ácido graso (RCOOH) en cada uno de dichos casos. Y estos moles se podrán expresar en función de la masa en gramos y de la masa molar (g/mol). Es decir:

$$n_{RCOOH,i} = \frac{m_i}{M_i}$$

Por tanto:

$$m_{KOH} = M_{KOH} \cdot \sum_{i=1}^N n_{KOH,i} = M_{KOH} \cdot \sum_{i=1}^N n_{RCOOH,i} = M_{KOH} \cdot \sum_{i=1}^N \frac{m_{RCOOH,i}}{M_{RCOOH,i}}$$

Sustituyendo en IS

$$IS = \frac{m_{KOH}}{m_{aceite}} \cdot 1000 = \frac{M_{KOH} \cdot \sum_{i=1}^N \frac{m_{RCOOH,i}}{M_{RCOOH,i}}}{m_{aceite}} \cdot 1000$$

O, lo que es equivalente:

$$IS = \frac{M_{KOH}}{m_{aceite}} \cdot 1000 \cdot \sum_{i=1}^N \frac{m_{RCOOH,i}}{M_{RCOOH,i}} \quad (1)$$

Sustituyendo los valores numéricos en la ecuación (1) para una masa de aceite de 100 g y teniendo en cuenta las masas molares del hidróxido de potasio (56,1), ácido linoléico $C_{18}H_{32}O_2$ (280), ácido oleico $C_{18}H_{34}O_2$ (282), ácido palmítico $C_{16}H_{32}O_2$ (256) y ácido esteárico $C_{18}H_{32}O_2$ (284), obtenemos el resultado:

$$IS = \frac{56,1}{100} \cdot 1000 \cdot \left(\frac{67,5}{280} + \frac{19,5}{282} + \frac{5,9}{256} + \frac{4,8}{284} \right) = 196$$

Analizando el resultado literal obtenido (1), se observa que es dimensionalmente homogéneo (concretamente, en este caso ambos lados de la ecuación son adimensionales). Además, se cumplen las hipótesis planteadas, aumentando el índice de saponificación al aumentar la proporción en masa de los ácidos grasos y disminuyendo al aumentar la masa molar de los mismos.

El resultado obtenido es razonable porque su orden de magnitud es similar a los de los valores expresados en tablas¹ para el aceite de girasol (188'70), con una desviación entre ambos valores que no llega al 4%. No obstante, en muchos casos, especialmente cuando se trabaja con restos de aceites usados (por ejemplo, en la cocina), no se conoce la proporción de los ácidos grasos que intervienen en la saponificación, por lo que cabe plantearse, cómo ha de procederse en estos casos. En el problema siguiente se aborda, a modo de ejemplo, una de estas situaciones, en la que se han utilizado datos reales, procedentes de un trabajo experimental.

11-c. Queremos preparar jabón potásico a partir del aceite usado en la cocina de casa. Para saber la cantidad de hidróxido de potasio necesaria se ha determinado el índice de saponificación, mediante una valoración ácido-base por retroceso, siguiendo el procedimiento descrito a continuación:

Se pesan 2 gramos de aceite, se les añade 20 mL de KOH 0'5 M en etanol y se mantiene la mezcla en ebullición, a reflujo, durante 30 minutos. Seguidamente se añaden 3 gotas del indicador fenolftaleína y se valora con ácido clorhídrico 0'2 M.

Para tres muestras diferentes del mismo aceite se han obtenido experimentalmente los resultados que se muestran en la tabla siguiente.

muestra	m (g) masa de aceite	V _{HCl} (mL) [HCl]= 0'2 M
1	2'08	14'0
2	2'15	13'7
3	2'01	14'9

A partir de estos datos determinar la masa de hidróxido de potasio necesaria para preparar jabón potásico a partir de una masa de aceite reciclado de 850 g.

Dado que desconocemos la composición en ácidos grasos del aceite reciclado, debido a que será una mezcla de diferentes aceites y grasas, y debido también a las posibles descomposiciones de ácidos grasos por calentamiento en el proceso de cocinado, debemos determinar el valor del IS de forma experimental. Los resultados del procedimiento seguido se muestran en la tabla incluida en el propio enunciado.

$$\text{En este caso: } IS = \frac{m_{KOH}}{m_{aceite}} \cdot 1000 \quad (1)$$

Para calcular la masa total de KOH que reacciona, se realiza una valoración por retroceso. Para ello, se añade una cantidad en exceso de hidróxido de potasio al aceite y se deja reaccionar hasta asegurarse que se ha completado el proceso de saponificación. El hidróxido de potasio sobrante se determina mediante una

¹ <https://jabonnatural.com/wp-content/uploads/2008/04/TABLA-DE-SAPONIFICACION-C3%93N-JABON-NATURAL-1.pdf>

valoración ácido-base utilizando ácido clorhídrico como valorante. El valor de m_{KOH} para calcular el IS, corresponderá a la masa que reacciona y se puede calcular como la diferencia entre la masa añadida inicialmente (que depende del volumen y concentración de la disolución empleada) y la masa sobrante (indicada por volumen y concentración del HCl empleado en la valoración).

Cuanto mayor sea la diferencia anterior mayor será, pues, el valor del IS correspondiente al aceite reciclado.

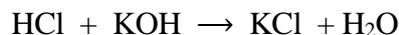
Por tanto, el IS dependerá del volumen y concentración de la disolución de KOH añadida inicialmente y de la cantidad de ácido clorhídrico consumido en la valoración, es decir, del volumen y su concentración. También dependerá de la masa de aceite analizada.

Esquemáticamente podemos representar, a modo de hipótesis, la relación entre variables de la siguiente forma:

$$IS = f(c_{\text{KOH}}, v_{\text{KOH}}, c_{\text{HCl}}, v_{\text{HCl}}, m_{\text{aceite}})$$

En la expresión anterior, c es concentración molar y v es volumen en litros.

Los moles de KOH consumidos (es decir, que reaccionan), serán los añadidos ($c_{\text{KOH}} \cdot v_{\text{KOH}}$) menos los sobrantes. Para determinar los moles que sobran es para lo que se hace la valoración con ácido clorhídrico. La reacción es una reacción de neutralización de estequiometría 1:1, tal y como se muestra en la siguiente ecuación química:



Según los coeficientes estequiométricos:

$$\frac{n_{\text{KOH}}}{n_{\text{HCl}}} = \frac{1}{1}$$

Los moles de hidróxido de potasio sobrantes coincidirán con los moles de ácido clorhídrico consumidos en la valoración, es decir, el producto de su concentración molar por el volumen consumido.

$$n_{\text{KOH}} = n_{\text{añadidos}} - n_{\text{sobrantes}} = (c_{\text{KOH}} \cdot v_{\text{KOH}} - c_{\text{HCl}} \cdot v_{\text{HCl}})$$

$$IS = \frac{m_{\text{KOH}}}{m_{\text{aceite}}} \cdot 1000 \rightarrow IS = \frac{n_{\text{KOH}} \cdot M_{\text{KOH}}}{m_{\text{aceite}}} \cdot 1000 = \frac{(c_{\text{KOH}} \cdot v_{\text{KOH}} - c_{\text{HCl}} \cdot v_{\text{HCl}}) \cdot M_{\text{KOH}}}{m_{\text{aceite}}} \cdot 1000$$

$$IS = \frac{(c_{\text{KOH}} \cdot v_{\text{KOH}} - c_{\text{HCl}} \cdot v_{\text{HCl}}) \cdot 1000}{m_{\text{aceite}}} \quad (2)$$

Sustituyendo los valores numéricos de la tabla incluida en el enunciado, obtenemos los siguientes resultados:

		$c_{\text{KOH}} = 0,5 \text{ M}$	$v_{\text{KOH}} = 20 \text{ mL}$	
muestra	m (g) masa de aceite		$v_{\text{HCl}} \text{ (mL)}$ $[\text{HCl}] = 0,2 \text{ M}$	IS

1	2'08	14'0	194'19
2	2'15	13'7	189'44
3	2'01	14'9	195'93

Calculando el valor medio de IS se obtiene $IS = 193'19$

Para calcular la imprecisión utilizamos la estadística inferencial que nos permite calcular el intervalo de confianza para una media de una muestra pequeña². Puesto que la varianza de la población se desconoce utilizamos como estadístico de inferencia de la muestra la distribución t de Student. La expresión de la media será:

$$\mu = m \pm t_{\frac{\alpha}{2}, n-1} \cdot \frac{s}{\sqrt{n-1}}$$

Siendo μ la media poblacional, t el estadístico t de Student, s la desviación típica de la muestra, α la significación estadística y n el número de medidas de la muestra. Determinamos el valor estadístico $t(0'025, 2)$ en tablas³ siendo este de 4'303, correspondiente a un nivel de significación $\alpha = 0'05$ y, por tanto, a una probabilidad del 95%. De esta forma, el intervalo de imprecisión (error absoluto) para la media será:

$$\varepsilon = t_{\frac{\alpha}{2}, n-1} \cdot \frac{s}{\sqrt{n-1}} = 4'303 \cdot \frac{2,74}{\sqrt{2}} = 8'33$$

Por tanto, el valor representativo de las medidas, con un 95% de certeza, estará comprendido en el intervalo: $IS = (193 \pm 8)$. El error relativo de dicha determinación sería ligeramente superior al 4%.

Dado que el IS, por definición, es la masa en miligramos de KOH necesaria para saponificar un gramo de aceite podemos relacionarlo con la masa de KOH en gramos " m_{KOH} " y la masa de aceite " m_{aceite} " en gramos mediante la expresión:

$$IS = \frac{m_{KOH}}{m_{aceite}} \cdot 1000$$

Por lo tanto, $m_{KOH} = \frac{IS \cdot m_{aceite}}{1000}$ (3)

Sustituyendo valores numéricos, $m_{KOH} = \frac{193 \cdot 850}{1000} = 164'05$ g de KOH

Análisis del resultado obtenido y nuevos problemas

Se puede comparar también el resultado numérico obtenido con el valor propuesto en recetas de jabón potásico casero⁴ disponibles en Internet. Según estas, se han de añadir 20 g de KOH y 20 g de agua por cada 120 g de aceite vegetal. Si sustituimos en la expresión (3) los 120 g de aceite vegetal obtenemos un valor de masa de KOH de 23'16 g, un valor muy próximo a los 20 g propuestos en la receta de "jabón potásico casero". Es decir, que el resultado numérico obtenido es razonable.

² <https://openstax.org/books/introducci%C3%B3n-estad%C3%ADstica-empresarial/pages/8-2-un-intervalo-de-confianza-para-una-desviacion-tipica-de-poblacion-desconocida-caso-de-una-muestra-pequena>

³ <https://estdg.blogs.upv.es/files/2018/01/Tabla-T-Student-2.pdf>

⁴ <https://www.ecologiaverde.com/como-hacer-jabon-potasico-1699.html>

Existen aplicaciones informáticas, disponibles en Internet⁵, que permiten calcular las masas necesarias de KOH para preparar jabón a partir del tipo de aceite utilizado. Haciendo uso de la aplicación “la calculadora de Mendrullandia” para 850 g de aceite de girasol se proponen 153 g de KOH valor próximo a los 164’05 calculados con la expresión 3 y el IS calculado en el problema.

El problema puede completarse incorporando una parte experimental:

Diseñad un procedimiento para obtener jabón potásico a partir del aceite usado en vuestras casas. Tras realizar una puesta en común en clase y consensuar el diseño experimental, realizad la producción del jabón.

Una vez conseguido el jabón, diseñad sendas investigaciones para determinar las características del jabón potásico producido como producto de limpieza y como producto para el tratamiento y cuidado de plantas

⁵ <https://calc.mendrullandia.es/>