

## **Análisis de los efectos del Triclosan en la piel de las manos usando Química Cuántica**

**Manuel González Pérez<sup>1</sup>**

[m.gonzalez.perez@personal.uttecam.edu.mx](mailto:m.gonzalez.perez@personal.uttecam.edu.mx)

<https://orcid.org/0000-0001-8700-2866>

Universidad Tecnológica de Tecamachalco  
(UTTECAM)  
Tecnológico Nacional  
de México/ITS de Tepeaca  
México

**Giovanny Flores Romero**

[L20320416@acapulco.tecnm.mx](mailto:L20320416@acapulco.tecnm.mx)

<http://orcid.org/0009-0005-5552-3241>

Tecnológico Nacional de México/ IT de  
Acapulco (TecNM/ITA).  
Departamento de Ingeniería Bioquímica.  
México

**Ana Karen Pérez Pérez**

[ana.perez37@unach.mx](mailto:ana.perez37@unach.mx)

<http://orcid.org/0009-0004-2158-4700>

Universidad Autónoma de Chiapas (UNACH)  
Escuela de Ciencias Químicas sede  
Ocozocoautla (ECQO).  
México

**Medardo Galdámez Velázquez**

[medardo.galdamez12@unach.mx](mailto:medardo.galdamez12@unach.mx)

<https://orcid.org/0009-0002-4762-8973>

Universidad Autónoma de Chiapas (UNACH)  
Escuela de Ciencias Químicas sede  
Ocozocoautla (ECQO)  
México

**Samantha Suárez Rodríguez**

[zS21010584@estudiantes.uv.mx](mailto:zS21010584@estudiantes.uv.mx)

<https://orcid.org/0009-0006-9173-4801>

Universidad Veracruzana (UV)  
Facultad de Ciencias Biológicas y  
Agropecuarias (FCBA)  
México

**Alexis Torres Solano**

[zs19006179@estudiantes.uv.mx](mailto:zs19006179@estudiantes.uv.mx)

<https://orcid.org/0009-0004-0749-1436>

Universidad Veracruzana (UV)  
Facultad de Ciencias Agrícolas  
México

### **RESUMEN**

El triclosán (TCS) es un químico antibacteriano que se usa como ingrediente común en productos relacionados con el cuidado de la salud y el hogar. Los consumidores están expuestos a estos productos. Se utilizó el software Hyperchem para realizar todos los cálculos cuánticos. Se eligió el método semiempírico de PM3 (SE-PM3). La energía mínima se calculó utilizando el teorema de Richard Feynman y el algoritmo de Polak-Rebire. Los cálculos específicos de HOMO, LUMO y la densidad de electrones, el ancho de banda y el coeficiente de transferencia de electrones (CTE) se realizaron interacción por interacción. El TCS está ubicado en la interacción más alta del pozo cuántico. Esta interacción es la más débil y la menos similar de todas. En las interacciones oxidación-reducción se observa el poder oxidante del TCS. Esta interpretación nos lleva a predecir que el TCS ataca a los aminoácidos con mayor afinidad química y probabilidad de forma oxidativa (destruktiva), pero no así a las bases nitrogenadas. Las interacciones de TCS con BNs nos llevan a concluir que es poco probable que esta sustancia cause mutaciones de ADN y ARN.

**Palabras clave:** triclosan; Piel humana; ADN; ARN; química cuántica.

---

<sup>1</sup> Autor principal

Correspondencia: [m.gonzalez.perez@personal.uttecam.edu.mx](mailto:m.gonzalez.perez@personal.uttecam.edu.mx)

# **Analysis of the effects of Triclosan on the skin of the hands using Quantum Chemistry**

## **ABSTRACT**

Triclosan (TCS) is an antibacterial chemical used as a common ingredient in household and health care related products. Consumers are exposed to these products. Hyperchem software was used to carry out all quantum calculations. The semi-empirical PM3 method (SE-PM3) was chosen. The minimum energy was calculated using the Richard Feynman theorem and the Polak-Rebiere algorithm. The specific calculations of HOMO, LUMO, and the electron density, bandwidth, and Coefficient of Electron Transfer (CTE) were performed interaction by interaction. The TCS is located in the highest interaction of the quantum well. This interaction is the weakest and least similar of all. In the oxidation-reduction interactions, the oxidizing power of TCS is observed. This interpretation leads us to predict that TCS attacks amino acids with greater chemical affinity and probability in an oxidative (destructive) manner, but not so to nitrogenous bases. The interactions of TCS with BNs lead us to conclude that this substance is unlikely to cause DNA and RNA mutations.

***Keywords:** triclosan; human skin; DNA; RNA; quantum chemistry*

*Artículo recibido 30 junio 2023*

*Aceptado para publicación: 30 julio 2023*

## INTRODUCCIÓN

El TCS es un químico antibacteriano utilizado como ingrediente común en productos domésticos y relacionados con el cuidado de la salud. Los consumidores están expuestos a través de estos productos. Numerosos estudios muestran niveles detectables de TCS en la piel, la orina y el plasma que van desde concentraciones de nM a  $\mu\text{M}$ . TCS puede sufrir una transformación biótica y abiótica, lo que lleva a la producción de una multitud de subproductos. Estos subproductos no se han investigado a fondo y otros resultaron ser más tóxicos que el compuesto TCS original. (Campbell, 2006); (Ramos, 2009); (Weatherly y Gosse, 2017); (Bedoux, 2012).

Dubey et al. (2019) Estudiaron la fototoxicidad, la fotogenotoxicidad de TCS y su mecanismo molecular que involucra la vía de la proteína quinasa activada por mitógeno p38 (MAPK) bajo exposición a UVB / luz solar. El TCS fotosensibilizado induce una generación significativa de  $\text{O}_2^{\bullet-}$ ,  $\bullet\text{OH}$  y peroxidación lipídica a través de un mecanismo de reacción fotoquímica de tipo I bajo exposición a la luz solar/UVB. Además, realizaron un estudio intracelular de TCS en queratinocitos de piel humana (línea celular HaCaT) bajo la intensidad ambiental de UVB ( $0,6 \text{ mW/cm}^2$ ) y la exposición a la luz solar. Estos investigadores encontraron: A) Fotodegradación y formación de subproductos dañinos para la salud humana. B) Generación de ROS. C) Estrés en el retículo endoplásmico. D) Detención del ciclo celular a través del aumento de la fase sub-G1. E) Desestabilización lisosomal/mitocondrial. Ellos concluyeron que TCS foto excitado puede ser perjudicial para la salud humana en las intensidades ambientales de la luz solar que llega a la superficie de la tierra.

Zhu et al (2017) Investigaron el metabolismo de fase I del TCS mediante estudios de simulación electroquímica en laboratorio. Ellos concluyeron que el potencial tóxico de TCS y los productos identificados se estimaron mediante el modelado de la relación estructura-actividad cuantitativa (QSAR) en 16 proteínas dianas.

Mi et al. (2018) exploraron el mecanismo de interacción entre el superóxido dismutasa (SOD) y el TCS. Ellos nos dicen que el análisis de acoplamiento molecular reveló el TCS ubicado entre dos subunidades de SOD y había un enlace de hidrógeno entre el TCS y el residuo Asn51 de SOD, esto influyó en la estructura de la proteína y resultó en una disminución de la actividad enzimática. Este trabajo podría ayudar a comprender el mecanismo de interacción entre SOD y TCS. Además, podría usarse para

consultar la evaluación de toxicidad de TCS a nivel molecular.

Dinwiddie et al. (2014) revisaron los estudios de los niveles de exposición humana y evaluaron los resultados de los estudios; además examinaron los efectos del TCS en el desarrollo del cáncer. Estos investigadores sugirieron posibles direcciones para futuras investigaciones y llegaron a la conclusión que la evidencia reciente sugiere que el TCS puede desempeñar un papel en el desarrollo del cáncer.

Fort et al (2017) realizaron un ensayo de crecimiento y desarrollo en renacuajos de anfibios para evaluar los efectos potenciales de las concentraciones de TCS relevantes para el medio ambiente en el desarrollo y crecimiento de los anfibios. Estos científicos encontraron varios fenómenos estadísticamente significativos en las renacuajos expuestas a TCS; por ejemplo una disminución en la prevalencia de los conductos müllerianos en etapa 3 en las secciones anteriores del tronco de las hembras del grupo de dosis de  $25,0 \mu\text{g l}^{-1}$  de TCS en comparación con los controles; la mayoría no se consideró toxicológicamente relevante.

La descamación de corneocitos en la superficie de la piel es un evento biológico complejo. Este proceso ocurre a través de la interacción entre las proteasas y sus inhibidores que controlan la degradación de los corneodesmosomas. La descamación se regula para proporcionar un desprendimiento discreto de corneocitos individuales. Cuando se altera el proceso da lugar a condiciones xeróticas e ictióticas. Existe una relación compleja entre la producción de células epidérmicas, la maduración y la pérdida descamativa. La hidratación de los corneocitos, la función de barrera del estrato córneo y la corneodesmólisis enzimática están involucradas en una interrelación dinámica. En la descamación influyen factores fisiológicos y ambientales, además, se ignora en gran medida a menos que la tasa o la cantidad de producción de incrustaciones se vuelva anormal. (Milstone, 2004); (Suzuki, 1996); (Pierard, 2000); (Roberts y Marks 1980).

## **METODOLOGÍA**

Se usó el software hyperchem para llevar a cabo todos los cálculos cuánticos. Se escogió el método semiempírico PM3 (SE-PM3). La energía mínima se calculó de acuerdo al teorema Richard Feynman y con el algoritmo Polak-Rebiere.

Los cálculos específicos de HOMO, LUMO y la densidad electrónica, ancho de banda y el CTE se realizaron interacción por interacción. Las primeras interacciones estudiadas fueron las sustancias

puras, luego las interacciones de óxido-reducción y por último todas las interacciones posibles de los AAs con el TCS. Todos estos cálculos fueron llevados a cabo aplicando dos teorías, la teoría de los orbitales moleculares (TOM) y la teoría cuántica del coeficiente de transferencia de electrones (TCTE). (González-Pérez, 2017 A). (Ahuactzin-Pérez et al 2018); (González-Pérez, 2017 B); (Leyva, 2021); (Olmos, 2018)

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la tabla 1 se observa que el TCS se ubica en la interacción 21. Esta interacción la más débil y menos afin de todas de acuerdo al pozo cuántico, esto significa que el TCS es inestable comparado con los ETCs de los AAs. Es decir, el TCS es una sustancia de acción no prolongada, fácil de eliminar de un sistema biológico.

**Tabla 1.** ETCs. Ordenados de acuerdo con el pozo cuántico.

No.	Reductor	Oxidante	HOMO eV	LUMO eV	BG eV	$\square\square$ eV/a°	$\square\square$ eV/a°	EP eV/a°	ETC a°
21	TCS	TCS	-9.202	-0.600	8.603	-0.006	0.136	0.142	60.581
20	Val	Val	-9.914	0.931	10.845	-0.131	0.109	0.240	45.188
19	Ala	Ala	-9.879	0.749	10.628	-0.124	0.132	0.256	41.515
18	Leu	Leu	-9.645	0.922	10.567	-0.126	0.130	0.256	41.279
17	Phe	Phe	-9.553	0.283	9.836	-0.126	0.127	0.253	38.879
16	Gly	Gly	-9.902	0.902	10.804	-0.137	0.159	0.296	36.500
15	Ser	Ser	-10.156	0.565	10.721	-0.108	0.198	0.306	35.037
14	Cys	Cys	-9.639	-0.236	9.403	-0.129	0.140	0.269	34.956
13	Glu	Glu	-10.374	0.438	10.812	-0.111	0.201	0.312	34.655
12	Ile	Ile	-9.872	0.972	10.844	-0.128	0.188	0.316	34.316
11	Thr	Thr	-9.896	0.832	10.728	-0.123	0.191	0.314	34.167
10	Gln	Gln	-10.023	0.755	10.778	-0.124	0.192	0.316	34.108
9	Asp	Asp	-10.370	0.420	10.790	-0.118	0.204	0.322	33.509
8	Asn	Asn	-9.929	0.644	10.573	-0.125	0.193	0.318	33.249
7	Lys	Lys	-9.521	0.943	10.463	-0.127	0.195	0.322	32.495
6	Pro	Pro	-9.447	0.792	10.238	-0.128	0.191	0.319	32.095
5	Trp	Trp	-8.299	0.133	8.431	-0.112	0.155	0.267	31.577
4	Tyr	Tyr	-9.056	0.293	9.349	-0.123	0.193	0.316	29.584
3	His	His	-9.307	0.503	9.811	-0.169	0.171	0.340	28.855
2	Met	Met	-9.062	0.145	9.207	-0.134	0.192	0.326	28.243
1	Arg	Arg	-9.176	0.558	9.734	-0.165	0.199	0.364	26.742

*Fuente: elaboración propia.*

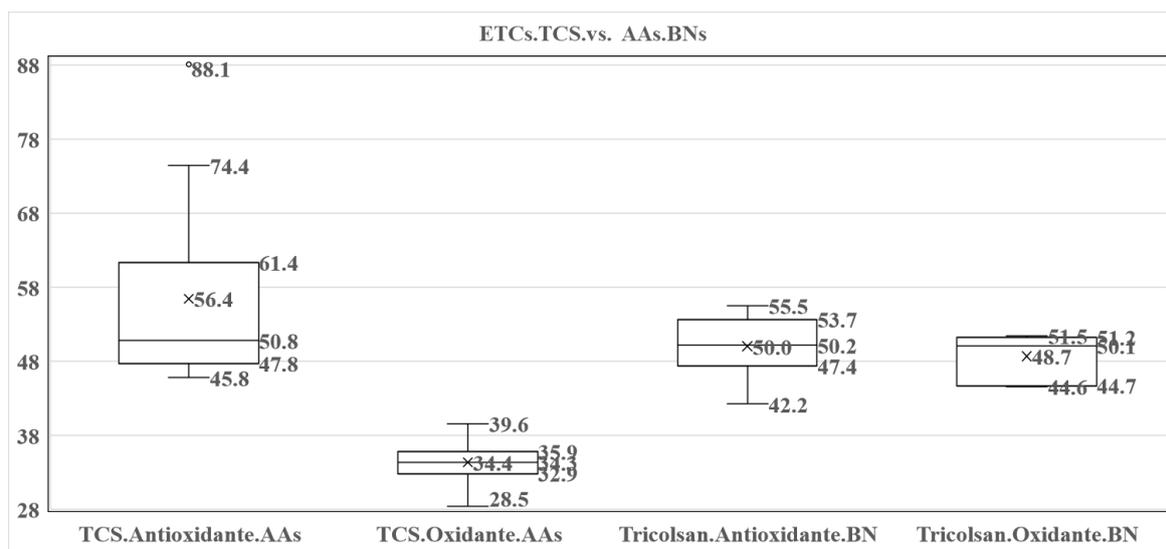
En la figura 1 podemos observar cuatro diagramas de bigotes y cajas. Estos diagramas fueron calculados de acuerdo con el pozo cuántico. En la parte más baja del pozo cuántico se acumulan las interacciones más afines y probables.

En el eje de las “y”, se cuantifican las unidades de radio de Bohr, el eje de las “x” es totalmente cualitativo para cada diagrama.

Se puede observar que el diagrama de las interacciones del TCS y los AAs ocupan la parte más baja del pozo cuántico. Esto nos lleva a predecir que el TCS ataca con mayor afinidad química y probabilidad a los aminoácidos en forma oxidativa (destructiva); pero no así a las bases nitrogenadas.

Las interacciones del TCS con las BNs nos llevan a la conclusión de que esta sustancia es poco probable que cause cáncer. Esta afirmación se debe a que la interacción más baja del TCS vs BNs es de 42.2 a°. Por la lejanía del fondo del pozo cuántico, esta interacción más baja del TCS tiene poca afinidad química por los AAs y además es poco probable.

**Figura 1.** Diagrama de bigotes y cajas de interacciones de óxido reducción del TCS para los aminoácidos y bases nitrogenadas.

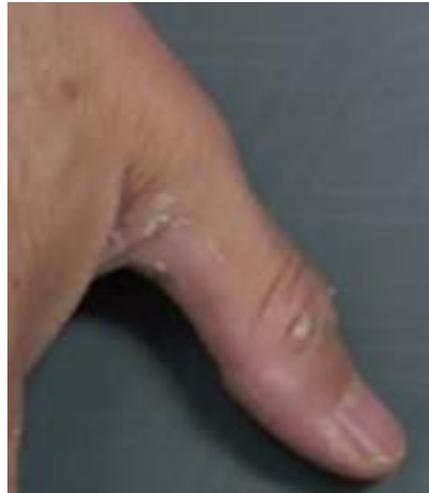


En la figura 2 se muestran las manos de un paciente de 69 años de edad. Este paciente estuvo expuesto a la aplicación del TCS como desodorante en las manos y en los pies. A las 48 horas, el paciente presentó descamación de corneocitos en las manos, mientras que en los pies no se presentó este fenómeno.

**Figura 2.** Mano de un paciente con descamación de corneocitos después de 48 horas de haber estado en contacto con el TCS.



A) Mano derecha del paciente



B) Detalle, pulgar derecho



C) Detalles del dedo índice



D) Detalles del dedo medio

## CONCLUSIONES

### Objetivo.

- Analizar los efectos del triclosan en la piel de las manos usando química cuántica.

### Tesis.

Se encontró que el TCS es un agente oxidante a nivel molecular. Figura 1.

Debido a esta propiedad que presenta el TCS; éste puede atacar la piel del paciente formando descamación de corneocitos (figura 2).

### **Corolario.**

- Se encontró que el TCS no es una sustancia de acción prolongada dentro del sistema biológico humano (tabla 1). Es decir, puede salir muy rápido del cuerpo. Además por medio de la literatura encontramos que la interacción del TCS con la piel de las manos se vuelve problemática por la luz solar debido a que se generan subproductos de las interacciones químicas. No sucede lo mismo sin la luz solar. En las manos expuesta a la luz solar si hay interacciones adversas. En los pies, dentro del calzado, no suceden estas interacciones indeseables o por lo menos no tan drásticas.
- Es poco probable que el TCS pueda causar cáncer debido a su uso como desodorante (figura 2, bigotes y cajas interacciones con las BN de los ácidos nucleicos)

### **Nuevas hipótesis.**

#### ***Derivados de este análisis se generan las siguientes hipótesis.***

- El TCS puede usarse como agente quimioterapéutico debido a sus propiedades oxidantes de los AAs.
- El TCS en uso diario (como desodorante) puede actuar como agente antibacteriano y antifúngico.
- El TCS no causa mutaciones en el ADN y el ARN.

### **LISTA DE REFERENCIAS**

- Ahuactzin-Pérez, M., Tlecuitl-Beristain, S., García-Dávila, J., Santacruz-Juárez, E., González-Pérez, M., Gutiérrez-Ruíz, M. C., & Sánchez, C. (2018). A novel biodegradation pathway of the endocrine-disruptor di (2-ethyl hexyl) phthalate by *Pleurotus ostreatus* based on quantum chemical investigation. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 147, 494-499.
- Bedoux, G., Roig, B., Thomas, O., Dupont, V. y Le Bot, B. (2012). Presencia y toxicidad del triclosán antimicrobiano y subproductos en el medio ambiente. *Environmental Science and pollution research international*, 19(4), 1044–1065. <https://doi.org/10.1007/s11356-011-0632-z>
- Campbell, L. y Zirwas, M. J. (2006). Triclosán. *Dermatitis: contacto, atópica, ocupacional, droga*, 17(4), 204–207.
- Dinwiddie MT, Terry PD, Chen J. Recent evidence regarding triclosan and cancer risk. *Int J Environ Res Public Health*. 2014 Feb 21;11(2):2209-17. doi: 10.3390/ijerph110202209. PMID: 24566048; PMCID: PMC3945593.

- Dubey D, Srivastav AK, Singh J, Chopra D, Qureshi S, Kushwaha HN, Singh N, Ray RS. Photoexcited triclosan induced DNA damage and oxidative stress via p38 MAP kinase signaling involving type I radicals under sunlight/UVB exposure. *Ecotoxicol Environ Saf.* 2019 Jun 15; 174:270-282. doi: 10.1016/j.ecoenv.2019.02.065. Epub 2019 Mar 4. PMID: 30844667.
- Electrochemical simulation of triclosan metabolism and toxicological evaluation. *Sci Total Environ.* 2018 May 1;622-623:1193-1201. doi: 10.1016/j.scitotenv.2017.11.317. Epub 2017 Dec 13. PMID: 29890587.
- Fort DJ, Mathis MB, Pawlowski S, Wolf JC, Peter R, Champ S. Effect of triclosan on anuran development and growth in a larval amphibian growth and development assay. *J Appl Toxicol.* 2017 Oct;37(10):1182-1194. doi: 10.1002/jat.3474. Epub 2017 Apr 24. PMID: 28436085.
- González-Pérez, M. (2017). Quantum modeling to determine the carcinogenic potential of aflatoxin B1 produced by *Aspegillus* sp and its metabolic derivate aflatoxin M1. *Mexican Journal of Biotechnology*, 2(2), 255-270.
- González-Pérez, M. (2017). Quantum Theory of the Electron Transfer Coefficient. *International Journal of Advanced Engineering, Management and Science*, 3(10), 239932.
- Leyva, H. S. V., Sesma, B. S. C., & Pérez, M. G. (2021). In silico analysis of the interactions of metformin vs. amino acids using quantum chemistry. *World Journal of Pharmaceutical Research*, 10(6), 1565-1577.
- Mi, C., Teng, Y., Wang, X., Yu, H., Huang, Z., Zong, W., & Zou, L. (2018). Molecular interaction of triclosan with superoxide dismutase (SOD) reveals a potentially toxic mechanism of the antimicrobial agent. *Ecotoxicology and environmental safety*, 153, 78–83. <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2018.01.055>
- Milstone LM. Epidermal desquamation. *J Dermatol Sci.* 2004 Dec;36(3):131-40. doi: 10.1016/j.jdermsci.2004.05.004. PMID: 15541634.
- Olmos, N. L., Sánchez, C. D. C. P., Ramírez, M. A., Soria, R., Mioni, L. C., & Perez, M. G. (2018). Quantum chemical analysis of ethanol and its interaction with amino acids and dipeptides (carnosine). *World Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences*, 7(10), 199-208.
- Pierard GE, Goffin V, Hermans-Le T, Pierard-Franchimont C. Corneocyte desquamation. *Int J Mol*

- Med. 2000 Aug;6(2):217-21. doi: 10.3892/ijmm.6.2.217. PMID: 10891569.
- Ramos, A. I., Braga, S. S. y Almeida Paz, F. A. (2009). Triclosán. Acta crystallographica. Sección C, Comunicaciones de estructura cristalina, 65(Pt 8), o404–o405. <https://doi.org/10.1107/S0108270109026511>.
- Roberts, D. y Marks, R. (1980). La determinación de las variaciones regionales y de edad en la tasa de descamación: una comparación de cuatro técnicas. La revista de dermatología de investigación, 74(1), 13-16. <https://doi.org/10.1111/1523-1747.ep12514568>.
- Suzuki, Y., Koyama, J., Moro, O., Horii, I., Kikuchi, K., Tanida, M. y Tagami, H. (1996). El papel de dos proteasas endógenas del estrato córneo en la degradación de la desmogleína-1 y su actividad reducida en la piel de pacientes ictióticos. La revista británica de dermatología, 134(3), 460–464.
- Weatherly, L. M. y Gosse, J. A. (2017). Exposición al triclosán, transformación y efectos en la salud humana. Revista de toxicología y salud ambiental. Parte B, Revisiones críticas, 20(8), 447–469. <https://doi.org/10.1080/10937404.2017.1399306>