La jara en la industria cosmética: extracción supercrítica de compuestos activos y evaluación in silico de su permeabilidad dérmica

Belgharbi Fallah¹, Monzón Yasmin E.¹, Navarro-Rocha Juliana², Sanz María Á.², Urieta José S.¹, Mainar Ana M.^{1*}

¹ Grupo GATHERS, Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A) Universidad de Zaragoza, Mariano Esquillor s/n, 50018, Zaragoza, España.

² Grupo GATHERS, Centro de Investigación y Tecnología Agroalimentaria de Aragón (CITA). Av. de Montañana, 930, 50059 Zaragoza, España.
e-mail: ammainar@unizar.es

Resumen

Este estudio combina la extracción con CO₂ supercrítico de compuestos bioactivos de *Cistus ladanifer* y simulaciones con COSMOperm para predecir su permeación cutánea. Se identificaron 31 compuestos (monoterpenos, sesquiterpenos y diterpenos). Las desviaciones en la permeabilidad estimada entre COSMOperm y DERMWIN fueron bajas (≤ 2 unidades log Kp), lo que valida este enfoque como una alternativa sostenible para formular cosméticos seguros y eficaces.

Introducción

La jara (*Cistus ladanifer*) es una planta mediterránea rica en compuestos bioactivos, como **fenoles y terpenos**, que son esenciales en cosmética y farmacéutica [1]. Para su extracción se emplea **CO₂ supercrítico**, una tecnología verde sin emplear disolventes tóxicos [2]. Asimismo, la normativa europea que prohíbe los ensayos en animales ha impulsado el uso de modelos computacionales para predecir la permeación dérmica de nuevos ingredientes cosméticos [3].

Materiales y Métodos

- Materia prima: hojas y ramas secas de jara (*Cistus ladanifer*) suministradas por el CITA. El material vegetal seco se molió hasta obtener un tamaño de partícula de 0,9 mm.
- Extracción con CO₂ supercrítico: Se emplearon tres extracciones con 100 g de material vegetal, el tiempo de extracción fue de 3 horas por cada carga de material vegetal.

Tabla 1. Condiciones de extracción con CO₂ supercrítico:

Condiciones	Extractor	Colector 1	Colector 2
Temperatura (°c)	40	24	15
Presión (bar)	90	65	20

- Análisis: GC-MS para la identificación de los compuestos.
- Modelado dérmico: simulación de las interacciones moleculares, las rutas de absorción y la permeabilidad cutánea mediante COSMOperm, con validación posterior en DERMWIN.

Resultados iniciales

- La extracción con el CO₂ supercrítico recuperó **3,52 g** de extracto (rendimiento 1,2 %).
- **Se identificaron 31 compuestos**, entre ellos: Monoterpenos, sesquiterpenos, diterpenos. el Viridiflorol (8,8 %), trans-pinocarveol (5,1 %), lediol (4,5%) y α -pineno (2,7 %) fueron los compuestos mayoritarios.
- Se modelaron 31 compuestos con COSMOperm los cuales siguieron principalmente dos rutas de permeación: absorción intercelular en el estrato córneo (SC) y transcelular en el estrato espinoso (SS). La única excepción fue la verbenona, que presentó una vía transcelular en el estrato córneo.
- Las desviaciones entre **COSMOperm y DERMWIN** fueron bajas (0.16 a 2 unidades logarítmicas), confirmando la validez de COSMOperm para predecir la permeación dérmica.

Conclusión

La integración de la extracción con CO₂ supercrítico y la predicción *in silico* permite evaluar ingredientes activos de *Cistus ladanifer* para su aplicación en cosmética natural, reduciendo tiempo y disolventes tóxicos. La consistencia de los valores de permeación de los compuestos identificados permite: i) validar el uso de herramientas computacionales como COSMOperm para la selección de activos cosméticos, y ii) asegurar la idoneidad de los extractos supercríticos de jara en formulaciones cosméticas sostenibles.

Agradecimientos

El Proyecto CARUSO (EFA085/01) ha sido cofinanciado al 65% por la Unión Europea a través del programa Interreg VI-A España-Francia-Andorra POCTEFA (2021-2027). El Objetivo del POCTEFA es reforzar la integración económica y social de la zona fronteriza España-Francia-Andorra, Los autores también quieren agradecer al Departamento de Ciencia, Universidad y Sociedad del Conocimiento del Gobierno de Aragón-Fondo Social Europeo (Grupo E39_23R) el soporte económico recibido.

Referencias

- [1]. GAWEL-BEBEN, K.; KUKULA-KOCH, W.; HOIAN, U.; CZOP, M.; STRZEPEK-GOMOLKA, M.; ANTOSIEWICZ, B. Characterization of *Cistus x incanus* L. and *Cistus ladanifer* L. Extracts as Potential Multifunctional Antioxidant Ingredients for Skin Protecting Cosmetics. *Antioxidants*, 2020, 9, 202, 2-18. Doi:10.3390/antiox9030202
- [2]. COELHO, J.; CRISTIANO, A.; MATOS, P.; RAUTER, A.; NOBRE, B.; MENDES, R.; BARROSO, J.; MAINAR, A.; URLETA, J.; FARELEIRA, J.; HELENA, S.; PALABRA, A. Extraction of Volatile Oil from Aromatic Plants with Supercritical Carbon Dioxide: Experiments and Modeling. *Molecules*. 2012, 17, 10550-10573. Doi:10.3390/molecules170910550.
- [3]. SCHWOBEL, J.A.H.; KLAMT, A. Mechanistic skin penetration model by the COSMOperm method: Routes of permeation, vehicle effects and skin variations in the healthy and compromised skin. *Computational Toxicology*. 2019,11, 50-64. <https://doi.org/10.1016/j.comtox.2019.02.004>.