

## RELACIÓN ESTRUCTURA MOLECULAR-VISCOSIDAD DE SUSPENSIONES DE BENTONITAS ORGANOFÍLICAS

### MOLECULAR STRUCTURE-VISCOSITY RELATIONSHIP OF ORGANOPHILIC BENTONITE SUSPENSIONS

Jorge Alejo Pinzón Bello\*

Recibido: 26/01/06 – Aceptado: 26/05/06

#### RESUMEN

Una bentonita del Valle del Cauca en Colombia se trató con los cationes: tetrametilamonio, tetraetilamonio, benciltrietilamonio, tetrabutilamonio, tetradeciltrimetilamonio, benciltributilamonio, hexadeciltrimetilamonio, didecildimetilamonio, alquilbencildimetilamonio, bencildimetiltetradecilamonio, metiltrioctilamonio y bencildimetilhexadecilamonio, para obtener compuestos organofílicos. La viscosidad de suspensiones de los compuestos preparados en mezclas etanol-glicerina se relacionó con descriptores moleculares de la estructura de los cationes de amonio cuaternario. Para establecer las ecuaciones de regresión, los datos se dividieron en dos grupos: uno correspondiente a los cationes con cadenas alifáticas únicamente y el otro en el cual las cadenas de los cationes contienen el grupo bencilo. Para ambos grupos se encontró una ecuación lineal de varias variables con coeficiente de correlación 0,9956 y 0,9997, respectivamente.

**Palabras clave:** montmorillonita, bentonitas organofílicas, relaciones estructura-propiedad, viscosidad.

#### ABSTRACT

A sample of bentonite, was treated with the cations tetramethylammonium, tetraethylammonium, benzyltriethylammonium, tetrabutylammonium, tetradecyltrimethylammonium, benzyltributhylammonium, hexadecyltrimethylammonium, didecyl dimethylammonium, alkylbencyldimethylammonium, benzyl dimethyltetradecyl ammonium, methyltrioctylammonium and benzyl dimethylhexadecyl ammonium, to obtain organophilic compounds. The viscosity of suspensions of the compounds, in ethanol-glycerine mixtures was related with molecular descriptors of the structure of the quaternary ammonium cations. In order to establish the regression equations, the data were divided in two groups: one of them corresponding to cations with aliphatic chains only, and the other one, in which the cation chains contain the benzyl group. For

\* Profesor pensionado. Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia. Correo electrónico: japinzonb@etb.net.co

both groups, a linear equation with several variables was found, with correlation coefficient 0.9956 and 0.9997, respectively.

**Key words:** montmorillonite, organophilic bentonites, molecular structure-property relationships, viscosity.

## INTRODUCCIÓN

Las propiedades reológicas de las suspensiones de arcillas, tanto en su estado natural como modificadas químicamente, son de interés científico y tecnológico (1, 2, 3, 4). El interés científico corresponde al estudio de los sistemas coloidales y dispersos para resolver los problemas que surgen en la preparación y dispersión de emulsiones, suspensiones, y al conocimiento de fenómenos interfaciales. En el campo tecnológico, los procesos industriales de estabilidad, transferencia, floculación, sedimentación, etc., de sistemas coloidales están relacionados con sus propiedades reológicas.

La bentonita es un mineral arcilloso hidrofílico que al ser tratado con sales de amonio cuaternario se transforma en organofílico, propiedad que le permite producir fenómenos tixotrópicos de amplia aplicación en diferentes campos de la industria, tales como pinturas y barnices, en los cuales es importante el desarrollo y control de la viscosidad. Las arcillas organofílicas se pueden considerar como un puente entre materia orgánica e inorgánica, y cada día aumentan las aplicaciones tecnológicas y los trabajos de investigación de esta clase de compuestos (5).

Un concepto fundamental de la química es que la estructura de una molécula es la responsable de sus propiedades; en

efecto, las sustancias tienen diferentes propiedades porque tienen estructuras diferentes (6).

El análisis de patrones de conectividad entre los componentes de una molécula ha sido utilizado ampliamente en estudios de relaciones cuantitativas entre estructura molecular y sus propiedades o actividades. En resumen, estos trabajos se interesan particularmente por estudiar qué átomos están unidos, cómo están unidos y qué patrones de unión presentan, sin importar la forma o el tamaño. El estudio de las moléculas en este sentido corresponde a la aplicación de una rama de la matemática discreta conocida como la teoría de grafos. Un grafo es una estructura matemática conformada por los conjuntos de puntos y líneas donde los puntos se conocen como vértices y las líneas como aristas. La teoría de grafos se originó hace aproximadamente unos 200 años con trabajos en diferentes campos de la ciencia realizados por Euler en la solución del puente de Königsberg, Kirchhoff con circuitos eléctricos y Cahley en la enumeración de isómeros orgánicos. Bajo esta perspectiva, los átomos se representan por puntos y los enlaces, ya sean dobles o triples, como líneas sencillas, sin contar los átomos de hidrógeno (7).

Sobre un plano, el grafo de una molécula como la del 2 metilbutano, descrita en la Figura 1, se representa según se muestra en la Figura 2.

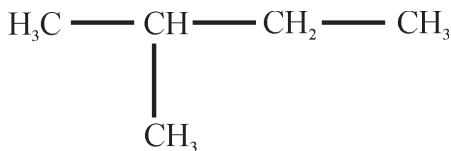


Figura 1. Fórmula estructural del 2 metilbutano.

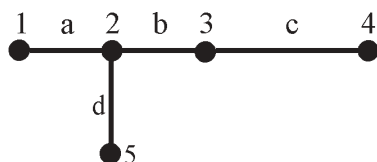


Figura 2. Grafo químico del 2 metilbutano.

Los números indican los vértices y las letras las aristas.

Algunas propiedades grafo-teóricas de interés corresponden a las definiciones de invariantes o índices grafo-teóricos, en donde los índices corresponden al número que lo caracteriza. Los índices grafo-teóricos pueden calcularse por medio de un algoritmo cuyo resultado es un descriptor cuantitativo de la estructura de una molécula. Existe una gama muy amplia de descriptores moleculares, entre ellos el más sencillo es el número de átomos de carbono, y los más avanzados son los obtenidos mediante cálculos cuánticos que tiene en cuenta geometrías optimizadas de las moléculas, polarizabilidades, etc. Entre los índices que han mostrado ser buenos descriptores de la estructura de una molécula están el número de Wiener,  $W$ , y los llamados índices de conectividad molecular,  $\chi$ :  $\chi_R$  y  $\chi$  de valencia:  $\chi^V$  también conocidos respectivamente como de Randić y de Kier y Hall, los cuales pueden ser de grado cero, uno, dos y tres. Es también muy útil emplear, en ciertos estudios de compuestos de amonio cuaternario, el índice  $\chi$  path cluster de grado cuatro:  ${}^4\chi_{PC}$ , el volumen molecular  $V_M$  y el área superficial molecular  $S_M$ .

En la literatura se describen detalladamente los algoritmos necesarios para el cálculo de estos índices grafo-teóricos (6, 7, 8, 9, 10, 11).

A continuación se presenta un ejemplo para obtener los índices grafo-teóricos para el 2 metilbutano:

El índice  $W$  que se fundamenta en la noción de distancia entre dos vértices, esto es, el número de aristas entre ellos es la suma de todas las distancias grafo-teóricas entre todos los pares de átomos de la molécula y se calcula formando el cuadro descrito en la Tabla 1.

Tabla 1. Distancias entre pares de átomos del 2 metilbutano

	1	2	3	4	5
1	0				
2	1	0			
3	2	1	0		
4	3	2	1	0	
5	2	1	2	3	0

$$W = 8 + 4 + 3 + 3 + 0 = 18$$

en donde los números de entrada (la primera fila y la primera columna), representan los vértices, y los números en la tabla indican las distancias (número de arista) entre ellos.

Para el cálculo del índice de Randić se le asigna a cada vértice una valencia  $\delta$ , que corresponde al número de aristas unidas a éste. En la Tabla 2 se dan los valores  $\delta$  correspondientes al grafo químico del 2 metilbutano.

Cada arista  $(i, j)$  se caracteriza mediante el número  $c_{ij} = (1 / \delta_i \delta_j)^{1/2}$ . El índice de Randić  $\chi_R$  es la suma de estos términos:  $\sum c_{ij}$ .

El grado  $m$  de este índice,  ${}^m\chi_R$ , lo define el número de aristas que se incluyan en cada término, tal como se ilustra en las

**Tabla 2.** Valores de valencia para los átomos del 2-metilbutano

Vértice	$\delta$
1	1
2	3
3	2
4	1
5	1

ecuaciones [1] al [4], para m igual a 0, 1, 2 y 3, respectivamente.

$${}^0\chi_R = \Sigma(1 / \delta_i)^{1/2} = (1 / 1)^{1/2} + (1 / 3)^{1/2} + (1 / 1)^{1/2} + (1 / 2)^{1/2} + (1 / 1)^{1/2} = 4,2845 \quad [1]$$

En esta ecuación, por ser m cero, el subíndice i corresponde a cada uno de los átomos de carbono y, en consecuencia, la sumatoria comprende la suma de los respectivos valores  $\delta$ .

$${}^1\chi_R = \Sigma(1 / \delta_i \delta_j)^{1/2} = (1 / 1 \times 3)^{1/2} + (1 / 3 \times 2)^{1/2} + (1 / 2 \times 1)^{1/2} + (1 / 3 \times 1)^{1/2} = 2,2701 \quad [2]$$

En este caso, como m = 1, cada término de la sumatoria corresponde al producto de los  $\delta_i$  y  $\delta_j$  de los vértices unidos por cada arista. De acuerdo con el grafo de la Figura 2 y los valores  $\delta$  dados en la Tabla 2, se tiene: arista a  $\delta_i = 1$  y  $\delta_j = 3$ ; arista b  $\delta_i = 3$  y  $\delta_j = 2$ ; arista c  $\delta_i = 2$  y  $\delta_j = 1$ , y finalmente, arista d  $\delta_i = 3$  y  $\delta_j = 1$ .

$${}^2\chi_R = \Sigma(1 / \delta_i \delta_j \delta_k)^{1/2} = (1 / 1 \times 3 \times 1)^{1/2} + (1 / 1 \times 3 \times 2)^{1/2} + (1 / 1 \times 3 \times 2)^{1/2} + (1 / 3 \times 2 \times 1)^{1/2} = 1,8020 \quad [3]$$

Dado que m = 2, cada término incluye dos aristas consecutivas, es decir: ad, ab, db y bc con sus correspondientes valo-

res  $\delta$  involucrados. Es importante tener en cuenta que los subíndices ijk indican dos aristas consecutivas.

$${}^3\chi_R = \Sigma(1 / \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l)^{1/2} = (1 / 1 \times 3 \times 2 \times 1)^{1/2} + (1 / 1 \times 3 \times 2 \times 1)^{1/2} = 0,8165 \quad [4]$$

Para m = 3 existen sólo dos combinaciones de tres aristas consecutivas, esto es: abc y dbc; por ello la sumatoria tiene dos términos que incluyen los valores  $\delta$  correspondientes.

El índice  ${}^4\chi_{pc}$  representa la suma de todas las subunidades de la forma



Es evidente que para la molécula del 2-metilbutano sólo existe una sola subunidad de este tipo, en consecuencia se tiene la ecuación [5].

$${}^4X_{pc} = (1 / 1 \times 3 \times 1 \times 2 \times 1)^{1/2} = 0,4082 \quad [5]$$

Los índices de Kier y Hall,  ${}^m\chi^v$  se calculan de manera similar pero reemplazando los  $\delta_i$  por  $\delta_i^v$ , los cuales se calculan mediante la ecuación [6]:

$$\delta_i^v = (Z_i^v - h) / (Z_i - Z_i^v - 1) \quad [6]$$

donde  $Z^v$  y  $Z$  son respectivamente el número de electrones de valencia y total del átomo i y h los enlaces de hidrógeno unidos a él.

El volumen molecular  $V_M$  se calcula aplicando una red tridimensional de cubos arreglados en una caja en forma de paralelepípedo con dimensiones  $X_{max}$ ,  $Y_{max}$  y  $Z_{max}$ , que contienen la molécula, y sumando el volumen de los cubos superpuestos con las esferas atómicas.

El área superficial molecular  $S_M$ , se calcula empleando la ecuación [7]:

$$S_M = \sum li dX \quad [7]$$

donde  $li$  indica el número de franjas de ancho  $dX$  con las cuales se genera un grupo de círculos correspondientes a la intercepción de las esferas de Van der Waals con el corte del plano.

El estudio de relaciones cuantitativas entre la estructura de las moléculas y sus propiedades o actividades (QSPR, Quantitative structure property relations o QSAR, Quantitative structure activity relations), consiste en la búsqueda de relaciones matemáticas entre la estructura de una molécula, representada por un índice grafo-teórico, y sus propiedades (químicas o físicas), o su actividad biológica, respectivamente. Estas relaciones matemáticas permiten predecir las propiedades o la actividad biológica de las moléculas calculando uno o varios descriptores moleculares adecuados, a partir del grafo molecular, aun sin necesidad de disponer físicamente del compuesto químico correspondiente, siempre y cuando se haya realizado previamente un estudio a compuestos relacionados estructuralmente (12, 13).

En la literatura se encuentran numerosos trabajos sobre la relación entre la estructura molecular de compuestos químicos y sus propiedades físicas, por ejemplo: solubilidad en agua, punto de ebullición (14),  $\Delta H$  de vaporización (15), densidad (16), volúmenes molares de compuestos de amonio cuaternario (9), reparto de medicamentos (17), ángulos de contacto de sólidos (18), modelos biexponenciales linealizados para el reparto (19), farmacocinética/farmacodinámica de corticosteroides en humanos (20) y solubilidad de compuestos orgánicos en agua (21).

En este trabajo se estudian las relaciones matemáticas entre la viscosidad de

suspensiones de bentonitas organofílicas, en mezclas etanol-glicerina, como función de índices grafo-teóricos que describen la estructura molecular de los cationes de amonio cuaternario adsorbidos sobre la arcilla.

## METODOLOGÍA

**Materiales.** Se usó una bentonita natural procedente del Valle del Cauca (Colombia). Las fases cristalinas presentes en la muestra se determinaron mediante difracción de rayos X con un barrido entre 2 y 64 grados sobre las siguientes muestras: polvo desorientado, polvo orientado en agua y en etilenglicol, polvo calcinado (a 110, 300, 500 y 600 °C) desorientado y orientado en agua y en etilenglicol. Se confirmó la presencia de montmorillonita con pequeñas cantidades de caolinita, cuarzo y feldespato. Mediante un análisis semicuantitativo por rayos X se encontraron los siguientes resultados: minerales laminares > 90%, cuarzo < 5%, feldespato < 5%. Capacidad catiónica de cambio (CEC): 836,4 meq /Kg. Área superficial específica BET (determinada por adsorción de  $N_2$ ): 34 m<sup>2</sup>/g. El tamaño de grano está comprendido entre 0,6 y 100 micrómetros observándose cuatro grupos de poblaciones con máximos a 2,5; 9, 20 y 50 micrones respectivamente, que corresponden a cada uno de los componentes de la muestra (22, 23).

Las bentonitas organofílicas se prepararon al 100% de la capacidad catiónica de cambio de la bentonita natural mediante el tratamiento con haluros de los siguientes cationes de amonio cuaternario: tetrametilamonio (Sigma R.A.), tetraetilamonio (Merck R.A.), benciltrietilamonio (Merck R.A.), tetrabutilamonio (Merck R.A.), te-

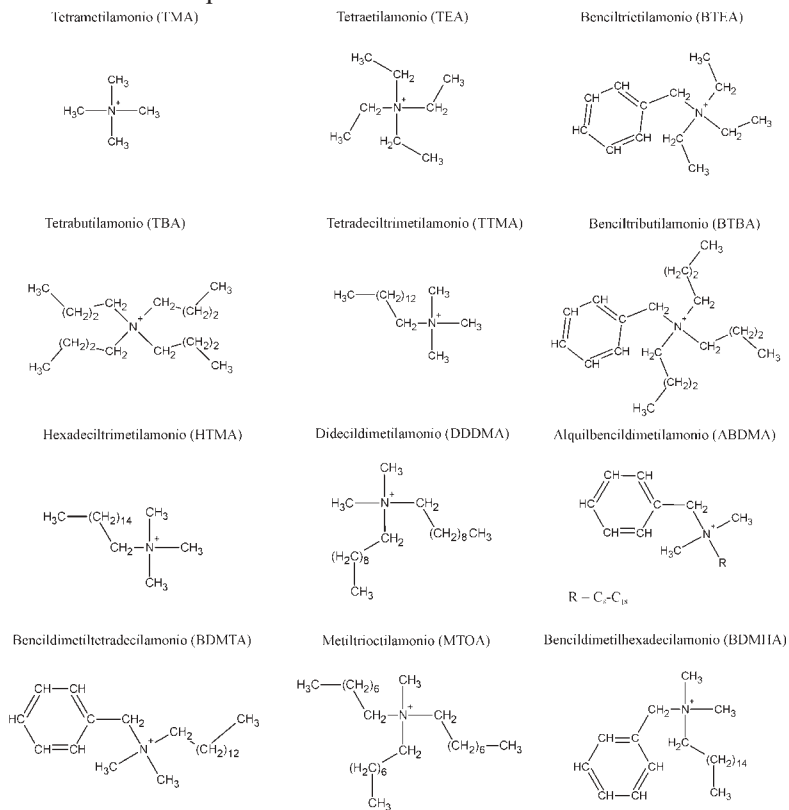
tradiciltrimetilamonio (Merck R.A.), benciltributilamonio (Merck R.A.), hexadeciltrimetilamonio (Sigma R.A.), didecildimetilamonio (Merck R.A.), alquilbencildimetilamonio ( $R = C_8H_{17}$  a  $C_{18}H_{37}$ ; en los cálculos se toma el valor promedio del número de átomos de carbono, es decir  $C = 13$ ) (Merck G.A.), bencildimetilhexadecilamonio (Chemicals R.A.), metiltrioctilamonio (Merck R.A.) y bencildimetiltetradecilamonio (Merck R.A.), cuyas estructuras y abreviaturas se describen en la Tabla 3.

**Preparación de las bentonitas organofílicas:** a 100 mL de dispersión de bentonita natural en agua destilada (100 g/L)

se le añadieron 100 mL de solución (0,17 molal) del catión de amonio cuaternario correspondiente. Las mezclas se agitaron mecánicamente durante dos horas y luego se lavaron con agua desionizada mediante decantación y centrifugación hasta final de haluros. Las muestras se secaron a 65 °C durante 48 horas como tiempo mínimo, se molieron a 100 mesh, se colocaron en frascos con tapa y se guardaron dentro de un desecador (22, 24).

**Preparación de las suspensiones:** el medio de dispersión empleado fue una mezcla que contenía igual volumen de etanol y glicerina USP (25). A 30 mL del medio de dispersión en agitación (500

**Tabla 3.** Estructura esquemática de los cationes de amonio cuaternario



RPM) se añadieron lentamente 0,75 gramos de la bentonita organofílica; a los cinco minutos se añadió 1 mL de N, N dimetilformamida (como activante); a los cinco minutos se agregó 40 mL del medio de dispersión y se continuó la agitación de la mezcla durante 20 minutos. Luego, la mezcla se colocó en un balón aforado de 100 mL y se completó a volumen.

**Medida de la viscosidad:** se empleó un viscosímetro Stormer colocado dentro de un termostato de aire a  $25,00 \pm 0,10$  °C. El viscosímetro se calibró con soluciones de sacarosa R.A. Merck. Para cada una de las medidas se colocaron 90 mL de suspensión en la celda del viscosímetro, y se midió el tiempo necesario para que el vástago diera 100 revoluciones.

**Programas empleados para los cálculos:** los descriptores moleculares:  $W$ ,  ${}^0\chi_R$ ,  ${}^1\chi_R$ ,  ${}^2\chi_R$ ,  ${}^3\chi_R$ ,  ${}^0\chi^v$ ,  ${}^1\chi^v$ ,  ${}^2\chi^v$ ,  ${}^3\chi^v$ ,  $V_M$  y  $S_M$  se calcularon empleando el programa CODESSA (26), mientras que  ${}^4\chi_{PC}$  se calculó manualmente.

La búsqueda de una función matemática que relacione la viscosidad de las suspensiones de los compuestos organofílicos con la estructura de sus cationes de amonio cuaternario, descrita mediante uno o varios descriptores moleculares, se realizó mediante el programa Table Curve para las funciones de una variable, y el Statgraf para funciones lineales de varias variables.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

**Viscosidad de las suspensiones:** las bentonitas organofílicas se representan así: B, guión y la abreviación correspondiente al catión de amonio cuaternario. El efecto

de los compuestos organofílicos sobre la viscosidad de una suspensión se puede interpretar considerando que una lámina de bentonita tiene unidas a sus dos caras las cadenas orgánicas dispuestas en forma de hebras las cuales se enredan y entrelazan produciendo cambios en la viscosidad del medio en el cual se dispersan.

Los valores de viscosidad, que se presentan en la Tabla 4 para cada una de las suspensiones de bentonitas organofílicas, corresponden al promedio de diez lecturas independientes. Se puede apreciar que la viscosidad es función de la naturaleza del catión constituyente del compuesto organofílico, esto es, del número de átomos de carbono y de la estructura de las cadenas. En efecto, el valor de viscosidad más pequeño corresponde a la bentonita organofílica que tiene el catión tetrametilamonio; igualmente, la viscosidad va aumentando a medida que aumenta el número de átomos de carbono del catión. También se observa que cationes con el mismo número de átomos de carbono pero con diferente estructura muestran valores de viscosidad diferentes. Esto se encuentra al comparar los valores de viscosidad de los compuestos organofílicos que tienen los cationes: benciltributilamonio y hexadeciltrimetilamonio (19 átomos de carbono); didecildimetilamonio y alquilbencildimetilamonio (22 átomos de carbono) y bencildimetihexadecilamonio y metiltriocetilamonio (25 átomos de carbono).

**Descriptores moleculares:** en las Tablas 5 y 6 se describen los descriptores moleculares calculados para los diferentes cationes estudiados. Es evidente que los descriptores moleculares son diferentes para los cationes (aun para los que tienen igual número de átomos de carbono),



**Tabla 4.** Viscosidad de suspensiones de bentonitas organofílicas

Compuesto organofílico	Viscosidad, $\eta$ , (mPa s)	Número de átomos de carbono
B-TMA	21,9195	4
B-TEA	22,9549	8
B-BTEA	24,3851	13
B-TBA	24,9488	16
B-TTMA	25,8312	17
B-BTBA	23,9943	19
B-HTMA	26,9176	19
B-DDDMA	24,2592	22
B-ABDMA	24,6379	22
B-BDMTA	22,9679	23
B-MTOA	23,6665	25
B-BDMHA	25,6444	25

puesto que son descriptores de estructura e invariantes para cada molécula en particular; con excepción de  $\chi_{PC}$  que puede ser igual para moléculas que tengan ramificaciones similares, tal es el caso de los cationes tetradeciltrimetilamonio y hexadeciltrimetilamonio; y alquilbencildimetilamonio, bencildimetiltetradecilamonio y bencildimetilhexadecilamonio.

**Relaciones cuantitativas entre los descriptores moleculares de los cationes de amonio cuaternario y la viscosidad ( $\eta$ ) de suspensiones de las bentonitas organofílicas.** La ecuación de la regresión que ajusta mejor los datos experimentales, en cada caso, se estableció por medio de los parámetros estadísticos,

definidos para el método de los mínimos cuadrados: el valor más alto del coeficiente de correlación  $r$  y el menor para la desviación estándar del ajuste  $s$  (27).

Inicialmente se ensayó el ajuste a diferentes ecuaciones entre la viscosidad y cada uno de los descriptores moleculares. La ecuación, de forma hiperbólica, viscosidad en función de  $S_M$ , dio el valor más alto de  $r$ : 0,648 y el más bajo de  $s$ : 1,111; resultados que indican un ajuste muy pobre.

Luego se ensayaron ajustes a ecuaciones lineales de la viscosidad en función de dos, tres y cuatro variables independientes correspondientes a combinaciones de los diferentes descriptores moleculares dados en las Tablas 5 y 6. Se encontró que



**Tabla 5.** Descriptores moleculares de los cationes de amonio cuaternario (Parte I)

Catión	W	${}^0\chi_R$	${}^1\chi_R$	${}^2\chi_R$	${}^3\chi_R$
TMA	16	4,5000	2,0000	3,0000	0
TEA	88	7,3284	4,2426	2,9142	3,0000
BTEA	307	10,4413	6,7603	5,2688	4,6964
TBA	560	12,9853	8,2426	5,9142	4,2426
TTMA	926	13,6924	8,5607	7,1997	3,7803
BTBA	838	14,6840	9,7603	7,5188	5,6284
HTMA	1281	15,1066	9,5607	7,9069	4,2803
DDDMA	1804	17,2279	11,1213	8,6140	5,4142
ABDMA	1712	16,8053	11,1390	9,1579	6,0231
BDMTA	1967	17,5124	11,6390	9,5115	6,2731
MTOA	2221	19,3492	12,6820	9,3640	6,4016
BDMHA	2550	18,9266	12,6390	10,2186	6,7731

**Tabla 6.** Descriptores moleculares de los cationes de amonio cuaternario (Parte II)

Catión	${}^0\chi^y$	${}^1\chi^y$	${}^2\chi^y$	${}^3\chi^y$	${}^4\chi_{PC}$	$V_M$	$S_M$
TMA	4,4472	1,7889	2,6833	0	0	93,2204	103,3620
TEA	7,2756	4,0933	2,6066	2,6833	2,1213	159,2775	155,9978
BTEA	9,6624	5,6505	3,9340	3,3733	1,9817	218,5288	229,5455
TBA	13,2254	8,5076	6,0965	4,3525	1,5000	296,7139	294,7493
TTMA	13,6396	8,3650	6,9030	3,6825	0,7500	309,6269	352,4817
BTBA	13,9050	8,6505	6,2168	4,3188	1,8219	318,8898	309,7125
HTMA	15,0538	9,3650	7,6101	4,1825	0,7500	343,2084	391,5300
DDDMA	17,1751	10,9411	8,3327	5,2340	1,2071	393,9685	384,5685
ABDMA	16,0264	9,9982	7,8386	4,8204	1,4871	368,8622	409,9339
BDMTA	16,7335	10,4982	8,1921	5,0704	1,4871	386,7605	426,4975
MTOA	19,2965	12,5172	9,0936	6,1545	1,4357	443,9131	436,2596
BDMHA	18,1477	11,4982	8,8992	5,5704	1,4871	424,3318	471,7471

ninguno de los ajustes ensayados dio resultados satisfactorios.

Finalmente, los descriptores moleculares se dividieron en dos grupos: I correspondiente a los cationes con cadenas lineales únicamente, esto es: TMA, TEA, TBA, TTMA, HTMA, DDDMA y MTOA, y II formado por cationes cuyas cadenas tienen el grupo benzyl, o sea: BTEA, BTBA, ABDMA, BDMTA y BDMHA.

La ecuación de la regresión lineal múltiple [8], en la cual la incertidumbre de los coeficientes corresponde a la desviación estándar, ajusta satisfactoriamente los datos correspondientes al grupo I.

$$\eta = -9,7 \pm 5,8 + (1,10 \pm 0,22) V_M + (0,0613 \pm 0,0055) S_M - (38,6 \pm 7,4) {}^1\chi_R + (5,58 \pm 0,94) {}^4\chi_{PC} \quad [8]$$

$$r = 0,9956 \quad s = 0,2779$$

Esta ecuación muestra que el área superficial molecular  $S_M$  y el volumen molecular  $V_M$  de los cationes, la ramificación de las cadenas codificadas en  ${}^1\chi_R$  y la acomodación estructural codificada mediante  ${}^4\chi_{PC}$  (9) son los factores principales que intervienen en la viscosidad de las suspensiones de bentonitas organofílicas que tiene cationes con cadenas alifáticas únicamente.

Igualmente, la ecuación de la regresión lineal múltiple [9], ajusta muy bien los valores del grupo II.

$$\eta = -(1,526 \pm 0,037) 10^5 + (0,503 \pm 0,012) S_M - (1,960 \pm 0,048) 10^5 {}^0\chi^v + (1,960 \pm 0,048) {}^0\chi_R \quad [9]$$

$$r = 0,9997 \quad s = 0,04524$$

Se podría suponer que el valor alto de  $r$  se debe al número de puntos, es decir, a que se emplean cinco puntos para ajustar una función con tres variables independientes; pero todos los demás ensayos que se realizaron con el mismo número de puntos para el mismo número de variables dieron valores de  $r$  mucho menores, que oscilaron entre 0,9849 y 0,5196. Este resultado confirma la validez del ajuste, puesto que si éste fuera efecto del número de puntos, cualquier otra combinación de tres variables independientes hubiera dado un valor de  $r$  próximo a uno, hecho que no sucedió.

En este caso se encuentra que el área superficial molecular de los cationes  $S_M$  y los descriptores moleculares  ${}^0\chi^v$  y  ${}^0\chi_R$  que codifican información relacionada con el número de átomos de carbono de las cadenas (9), son los determinantes de la viscosidad de las suspensiones de bentonitas organofílicas que contienen cationes en los cuales se encuentra el grupo aromático bencilo.

Los resultados encontrados para la viscosidad coinciden con los de otras propiedades tales como densidad, refracción molar y solubilidad en agua, en el hecho de que para cada serie de un grupo funcional se encuentra una ecuación matemática específica que relaciona la propiedad con los descriptores de estructura (9).

## CONCLUSIONES

Por medio del uso de descriptores moleculares obtenidos con base en la teoría de grafos fue posible construir un modelo cuantitativo entre la viscosidad de suspensiones de bentonitas organofílicas y la estructura de los cationes de amonio cua-

ternario constituyentes del compuesto organofílico. El modelo encontrado funciona adecuadamente siempre y cuando se estudie la población en dos grupos: uno correspondiente a los cationes con cadenas lineales únicamente, y el otro formado por cationes cuyas cadenas tengan el grupo bencilo.

Del análisis de regresión se obtuvo que la viscosidad de las suspensiones de las bentonitas organofílicas es función de la naturaleza de los cationes de amonio cuaternario adsorbidos sobre la bentonita natural.

Los parámetros estadísticos, coeficiente de correlación y la desviación estándar, muestran que la viscosidad es función lineal de los descriptores de estructura  $S_M$ ,  $V_M$ ,  ${}^1\chi_R$  y  ${}^4\chi_{PC}$  para el grupo con cadenas alifáticas; mientras que para el grupo de cadenas hidrocarbonadas que tienen el grupo bencilo es función lineal de los descriptores de estructura  $V_M$ ,  ${}^0\chi^V$  y  ${}^0\chi_R$ .

### AGRADECIMIENTOS

El autor expresa su gratitud al profesor Edgar Eduardo Daza C. por su colaboración en el cálculo de los descriptores moleculares.

### REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Packter, A. (1957). Interaction of Montmorillonite Clays With Polyelectrolyte. *Soil Sci.* 83 (5) 335-343.
2. Van Olphen, H. (1963). An Introduction to Clay Colloid Chemistry. New York: John Wiley & Sons.
3. Moreno, R.; Moya, J. S., Requena, J. (1987). Electroquímica de suspensiones cerámicas. *Bol. Soc. Esp. Ceram. Vidr.* 26 (6), 355-365.
4. Mitra, N. K.; Parya, T. K.; Dhargupta, K. K. (1993). Effect of addition of non-plastic Materials on the Rheological Behaviour of Clay Suspension. *J. Indian Chem. Soc.* 70, 72-73.
5. Hauser, E. A. (1950). Colloid Chemistry. Theoretical and Applied; J. Alexander, ed. Vol VII. New York: Reinhold Publishing Corporation, pp. 431-441.
6. Seybold, P. G.; May, M.; Bagal, U. (1987). Molecular Structure-Property Relationships. *J. Chem. Educ.* 64 (7), 575-581.
7. Hansen, P.; Jurs, P. C. (1988). Chemical Applications of Graph Theory. Part I. Fundamentals and Topological Indices. *J. Chem. Educ.* 65 (7), 574-580.
8. Trinajstić, N. (1983). Chemical Graph Theory. Pres Boca Raton, Florida: C.R.C: Vol II.
9. Kier, L. B.; Hall, L. H. (1986). Molecular Connectivity in Structure - Activity Analysis. New York: John Wiley Sons Inc.
10. Mihalić, Z.; Trinajstić, N. (1992). A graph-Theoretical Approach to Structure-Property Relationships 69 (9), 701-712.
11. Tello, M. E. (2000). Una introducción a la metodología en estudios QSAR. Bogotá: Universidad Nacional de Colombia.

12. Trinajstić, N.; Nikolić, S.; Carter, S. (1989). QSAR: Theory and Application. *Kem. Ind.* **38** (10), 469-484.
13. Karelson, M. (2000). Molecular Descriptors in QSAR / QSPR. New York: John Wiley & Sons, pp. 385.
14. Hall, L. H.; Kier, L. B.; Murray, W. J. (1975). Molecular Connectivity II: Relationship to Water Solubility and Boiling Point. *J. Pharm. Sci.* **64** (12), 1974-1977.
15. Randić, M. (1975). On Characterization of Molecular Branching. *J. A. Chem. Soc.* **97** (23), 6609-6615.
16. Kier, L. B.; Murray, W. J.; Randić, M.; Hall, L. H. (1976). Molecular Connectivity V: Connectivity Series Concept Applied to Density. *J. Pharm. Sci.* **65** (8), 1226-1229.
17. Yap, C. W.; Chen, Y. Z. (2005). Quantitative Structure – Pharmacokinetic Relationships for Drug Distribution Properties by Using General Regression Neural Network. *J. Pharm. Sci.* **94** (1), 153-168.
18. Suihko, E.; Forbes, R. T.; Korhonen, O.; Ketolainen, J.; Paronen, P. (2005). Prediction of Contact Angle for Pharmaceutical Solids from Their Molecular Structure. *J. Pharm. Sci.* **94** (4), 745-758.
19. Buchwald, P. (2005). General Linearized Biexponential Model for Q.S.A.R. Data Showing Bilinear – Type Distribution **94** (11), 2355-2379.
20. Mager, D. E.; Jusko, W. J. (2002). Quantitative Structure – Pharmacokinetic/Pharmacodynamic Relationship of Corticosteroids in Man. *J. Pharm. Sci.* **91** (11), 2441-2451.
21. Chen, X. Q.; Cho, S. J.; Li, Y.; Venkatesh (2002). Prediction of Aqueous Solubility of Organic Compounds Using a Quantitative – Property Relationship. *J. Pharm. Sci.* **91** (8), 1838-1852.
22. Corredor, Y.; Pinzón, Jorge A. (1994). Obtención de Arcillas Organofílicas. *Rev. Col. Quim.* **23** (1), 33-43.
23. Pinzón, J. A.; Requena, J. (1966). Caracterización y estudio reológico de una bentonita colombiana. *Bol. Soc. Esp. Ceram. Vidr.* **35** (5), 337-344.
24. Rodríguez, D. C.; Pinzón, J. A. (2001). Adsorption of Sodium Dodecylbenzene Sulfonate on Organophilic bentonites. *Applied Clay Sci.* **18**, 173-181.
25. USP23-NF18. (1994). The United States Pharmacopeia, 23 edition. Rockville: The United States Pharmacopeial Convention.
26. Katritzky, A.; Lovanov, V.; Karelson, M. (1995). CODESSA: Comprehensive Descriptor for Structural and Statistical Analysis. Version 2.13 (PC). SemiChem and The University of Florida.
27. Bevington, P. R.; Robinson, D. K. (1994). Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences. 2 ed. New York: McGraw-Hill Book Inc.