

Propiedades de disoluciones de BAK

Joan Torrent, Doctor en Ciencias Químicas
Dep. Ingeniería Química, EUOOT-UPC (Terrassa)
e-mail: juan.torrent@upc.edu

Joan Antó, Doctor en Ciencias Físicas
Dep. Óptica y Optometría, EUOOT-UPC (Terrassa)

Resumen

Propiedades fisicoquímicas tales como la tensión superficial y el ángulo de contacto de disoluciones de cloruro de benzalconio (BAK), usado en soluciones para lentes de contacto, han sido medidas, pudiéndose establecer una relación entre ambas. Tanto la tensión superficial como el ángulo de contacto muestran una fuerte dependencia con la concentración para disoluciones diluidas, pero superada una cierta concentración, conocida como concentración micelar crítica (cmc), esta dependencia es muy débil o nula. El tratamiento de los datos permite determinar dicha cmc.

Abstract

Physicochemical properties such as surface tension and contact angle of benzalkonium chloride solutions, used in contact lens solutions, have been measured, and a correlation between both magnitudes has been observed. Surface tension and contact angle show a strong dependence on the concentration for diluted solutions, but above a certain concentration, called critical micelle concentration (cmc), this dependence becomes weak or null. The data treatment allows determining this cmc.

Palabras clave: disolución de BAK, ángulo de contacto, tensión superficial, tensioactivo, concentración micelar crítica

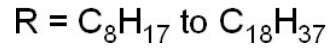
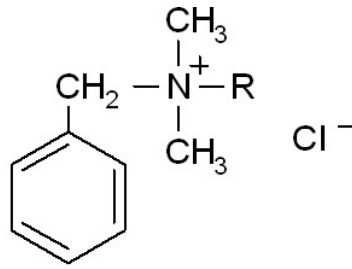
Introducción

Las soluciones para lentes de contacto desempeñan un papel importante dentro de la contactología. Existen diferentes tipos de soluciones, según el tipo de lente de contacto a la que van destinadas y según la función específica requerida. Por tanto, la composición de la solución depende en gran medida de estos factores. En una solución de lentes de contacto, el agua es el componente mayoritario, o disolvente, pero después existen los componentes minoritarios, o solutos, cada uno con una función determinada.

Ciertas sustancias, conocidas como surfactantes o tensioactivos, ejercen una gran influencia sobre la tensión superficial del agua, y sus disoluciones presentan una disminución notable de la tensión superficial, incluso a muy bajas concentraciones. Si γ_0 es la tensión superficial del agua pura y γ la de la disolución, la diferencia entre ambas recibe el nombre de presión superficial.

$$\pi = \gamma_0 - \gamma \quad (1)$$

Los tensioactivos presentan una estructura química con una parte apolar o hidrofóbica, generalmente una cadena hidrocarbonada, y una parte polar o hidrofílica, generalmente un grupo funcional orgánico polar o capaz de ionizarse en disolución. Estos compuestos se concentran en la superficie del agua con el aire y provocan la disminución de γ . Entre las aplicaciones prácticas destacan su acción de limpieza o detergente, y algunos de ellos, como las sales de alquilamonio, también se usan como conservantes en soluciones de lentes de contacto. El cloruro de benzalconio, o BAK, es una sal de alquilamonio, en concreto de alquibencildimetilamonio, con la fórmula molecular indicada en el esquema 1. El BAK aparece en la formulación de ciertas soluciones de lentes de contacto, junto a otros componentes, y su concentración suele ser muy baja, alrededor del 0,004%; a pesar de ello, su efecto en las propiedades fisicoquímicas es ya notable y ejerce una acción conservante efectiva, pero sin que pueda provocar efectos perjudiciales en la lente de contacto o en su aplicación en el ojo.



Esquema 1. Fórmula del cloruro de benzalconio.

Los tensioactivos también tienen influencia en el ángulo de contacto, θ , es decir en la forma que adopta una gota de disolución cuando se coloca sobre una superficie sólida (Figura 1). El ángulo de contacto depende, según la ecuación 2, de la tensión superficial de la disolución γ_L y de la tensión interfacial entre ésta y el sólido $\gamma_{L/S}$, y en ambos casos el tensioactivo puede ejercer una notable influencia [1].

$$\cos \theta = \frac{\gamma_S - \gamma_{L/S}}{\gamma_L} \quad (2)$$

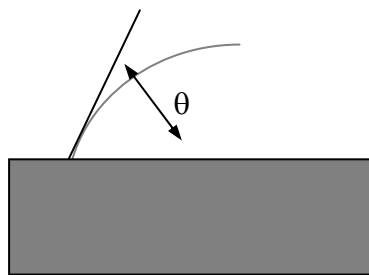


Figura 1. Esquema del ángulo de contacto

En este trabajo se realiza un estudio de disoluciones de BAK preparadas en el laboratorio, donde éste es el único soluto presente, con lo que se puede analizar sin ambigüedad el efecto de este componente. Se han medido los valores de tensión

superficial y de ángulo de contacto para disoluciones acuosas de BAK, en función de la concentración, y se han correlacionado los resultados obtenidos para ambas magnitudes.

Experimental

Las medidas de presión superficial se realizaron usando como tensiómetro una balanza de Wilhelmy (Figura 2) incorporada a un equipo NIMA. La temperatura de trabajo ha sido de 27°C. En primer lugar se introduce la placa de Wilhelmy en agua y se toma como cero; a continuación se reemplaza el agua por una disolución de BAK, sin variar ningún parámetro geométrico del sistema, y se toma lectura del valor de presión superficial π que mide la balanza. En este trabajo se ha tomado como criterio coger los valores iniciales de π , aunque éstos experimentan una cierta variación con el tiempo. Un estudio detallado de esta variación se deja para trabajos posteriores. El valor de γ se obtiene con la ecuación 1. A partir de los valores tabulados de la tensión superficial del agua y su dependencia con la temperatura se puede obtener γ_0 , que en nuestro caso, a 27°C, resulta ser:

$$\gamma_0(27^\circ\text{C}) = \gamma_0(20^\circ\text{C}) + d\gamma/dT * (T - 20) = 72,88 - 0,138 * (27 - 20) = 71,91 \approx 71,9 \text{ mN/m.}$$

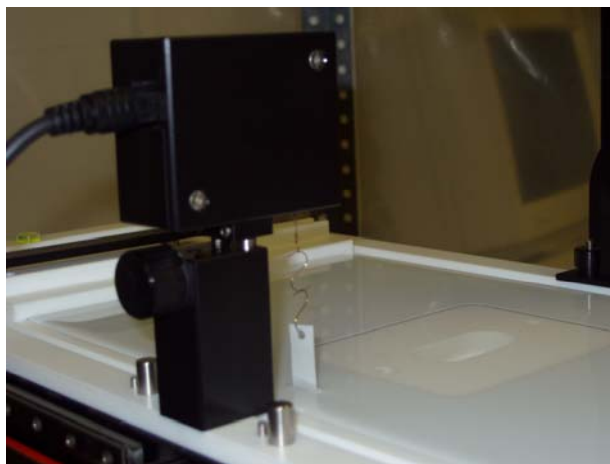


Figura 2. Balanza de Wilhelmy

Las medidas de ángulo de contacto se realizaron con un microscopio invertido acoplado a una cámara CCD para registrar las imágenes, las cuales fueron tratadas posteriormente para obtener los valores de θ . Se buscaron los objetivos y oculares y la iluminación adecuados para obtener las imágenes ópticas. La técnica utilizada para la medida de θ es la de la gota en aire [2]. La medida del ángulo de contacto se realizó justo después de formar la gota. La gota se obtuvo usando una micropipeta y depositando un volumen fijo de líquido sobre una superficie plana y limpia de PMMA.

Las disoluciones de BAK se han preparado a partir del reactivo químicamente puro, calidad QP de Panreac, y de agua ultrapura. El rango de concentraciones varía desde 0 a 0,1% en peso.

Resultados y discusión

Los valores de γ y de θ , medido sobre PMMA, obtenidos para las diferentes concentraciones de BAK se muestran en la Tabla 1. En la Figura 3 se recogen las imágenes de las gotas formadas. En la Figura 4 puede observarse como evolucionan estas magnitudes con la concentración; en ella puede observarse que a bajas concentraciones de BAK hay una fuerte influencia de la concentración sobre la tensión superficial y sobre el ángulo de contacto, y que a medida que la concentración aumenta esta dependencia es menor e incluso se hace muy pequeña o prácticamente nula. Este comportamiento es típico de tensioactivos, y ello se debe a que las moléculas de tensioactivo, las cuales presentan una cadena hidrofóbica importante, tienden a agregarse formando micelas (esquema 2) para minimizar la mala interacción de las cadenas hidrofóbicas con el agua y en cambio favorecer la buena interacción que existe entre ellas. El fenómeno de la micelación se produce de forma significativa a partir de una cierta concentración, que se conoce como concentración micelar crítica, cmc. Cuando se forman dichas micelas, la concentración de tensioactivo libre es

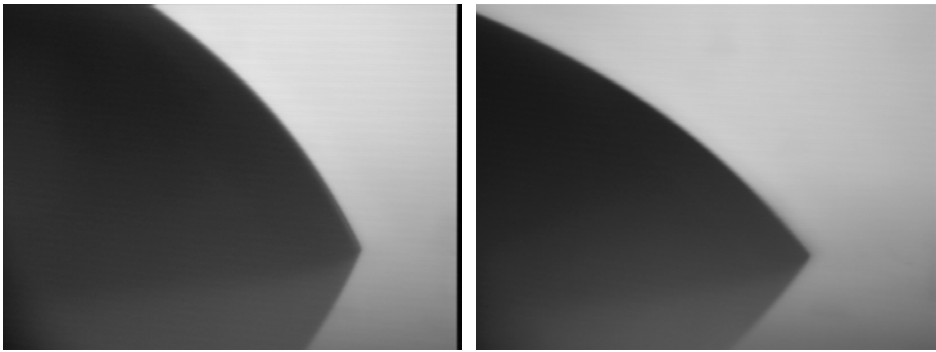
prácticamente constante y las propiedades superficiales de la disolución prácticamente no cambian.

Tabla 1. Valores de presión superficial, tensión superficial y ángulo de contacto, medido sobre PMMA, a 27°C para diferentes concentraciones de BAK.

C_{BAK} (% peso)	π (mN/m)	γ (mN/m)	θ (grados)
0	0	71,9	66
0,002	6,5	65,4	53
0,004	13,6	58,3	47
0,01	24,7	47,2	38
0,02	31,5	40,4	37
0,05	38,0	33,9	36
0,1	38,7	33,2	

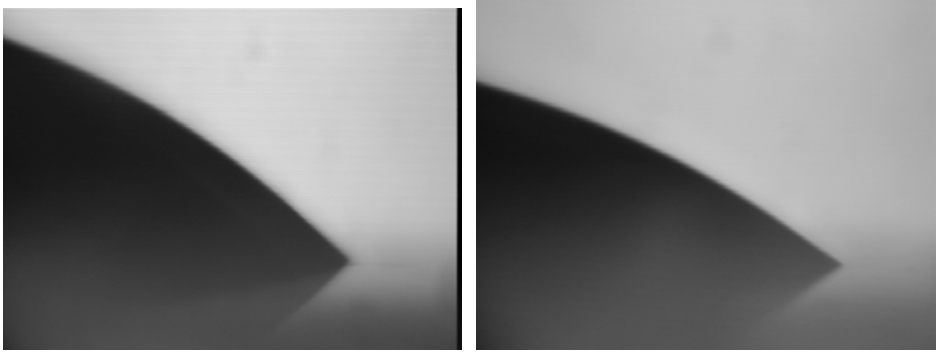
Para determinar dicha cmc se suele representar la tensión superficial frente al logaritmo de la concentración. En esta representación (Figura 5) se suele observar dos tramos bastante lineales, uno a más bajas concentraciones, por debajo de la cmc, y otro a más altas concentraciones, por encima de la cmc. La intersección de las rectas de ambos tramos da un valor para la cmc. A partir de la gráfica de la Figura 5 se obtiene que para el BAK, a 27°C, la cmc es de 0,035% en peso. Este valor no puede pasarse correctamente a concentración molar ya que en la fórmula del BAK (esquema 1) la cadena R no está bien definida. Ahora bien, tomando un valor promedio para la masa molecular del BAK, la cmc en concentración molar es aproximadamente $1,0 \cdot 10^{-3}$ M. Este valor es del orden del obtenido para otros tensioactivos similares al BAK [3, 4]. Por otro lado, podemos constatar que la concentración normalmente usada en las disoluciones comerciales es bastante inferior a la cmc, por lo que podemos asegurar que en éstas no se produce micelación.

En la figura 4 puede también observarse que la variación que experimenta la tensión superficial con la concentración es bastante similar a la que experimenta el ángulo de contacto, lo cual se debe a la estrecha relación entre ambas magnitudes (ver ecuación 2). Además, esto nos indica que en la ecuación 2 el parámetro de tensión que más influye en el ángulo de contacto, para nuestro caso, es la tensión superficial de las disoluciones de BAK (γ_L), especialmente para las concentraciones más bajas.



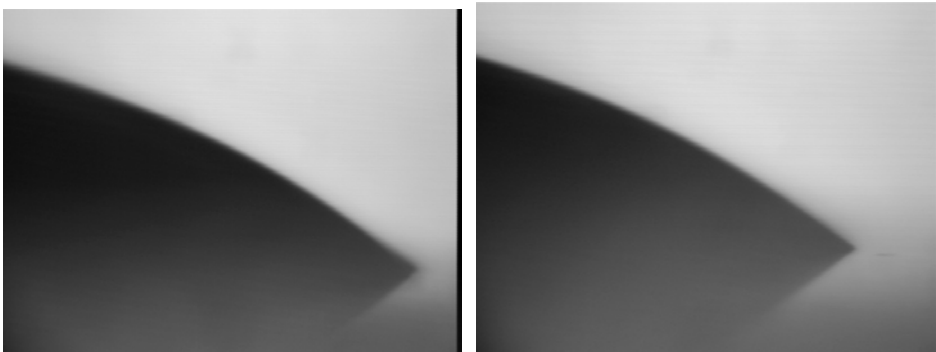
a

b



c

d



e

f

Figura 3. Imágenes de las gotas formadas por disoluciones acuosas de BAK a las concentraciones de: a) 0%, b) 0,002%, c) 0,004%, d) 0,01%, e) 0,02%, f) 0,05%.

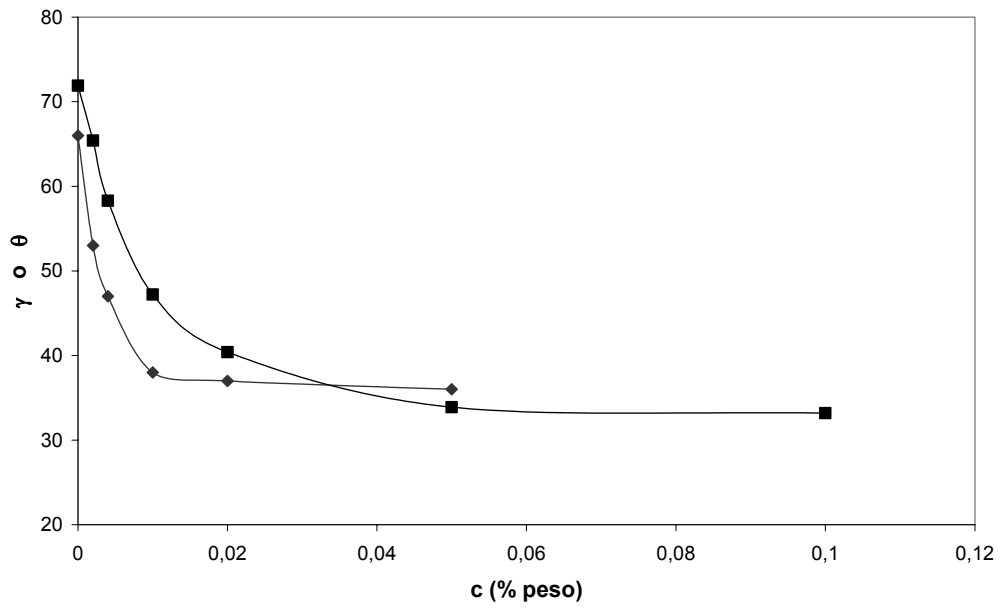
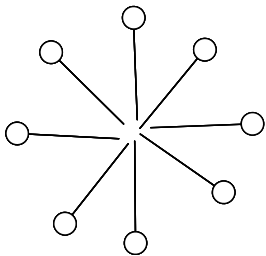


Figura 4. Variación de la tensión superficial, γ en mN/m (■), y del ángulo de contacto, θ en grados (◆), con la concentración de disoluciones acuosas de BAK.



Esquema 2. Micela

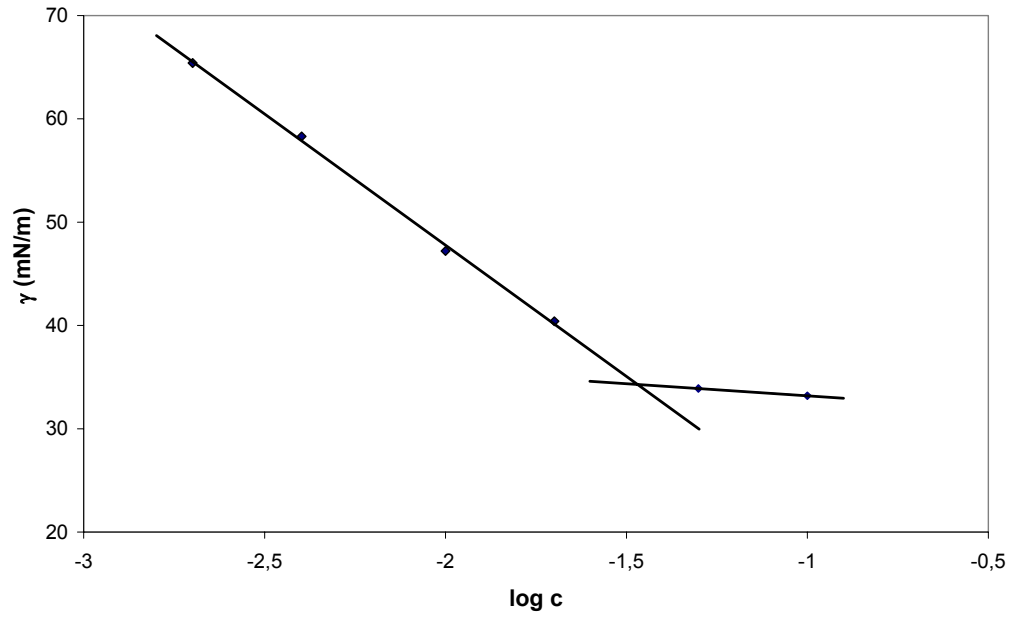


Figura 5. Tensión superficial frente al logaritmo decimal de la concentración.

Bibliografía

- [1] J. Torrent, Películas y ultrapelículas en sistemas ópticos, Ver y Oír, septiembre 2003, pg 478
- [2] J. Torrent, J. Antó, Medida del ángulo de contacto en materiales ópticos. Ver y Oír, en prensa
- [3] M.V. Dmitrovskaya, N.N. Kochurova, G. Petzold, Colloid J. 66 (2004) 531
- [4] R.M. Pashley, M.E. Karaman, Applied Colloid and Surface Chemistry, John Wiley & Sons, 2004.