



## XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

### EFFECTO DE LA PRESENCIA DE AGUA EN LA ADSORCIÓN DE NaF SOBRE TiO<sub>2</sub>(101) ANATASA

Meier Lorena A.<sup>1</sup>, Morgade Cecilia I. N.<sup>1,2</sup>

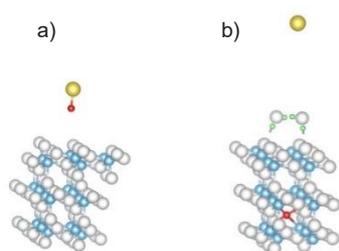
<sup>1</sup>Instituto de Física del Sur (IFISUR-CONICET), Universidad Nacional del Sur (UNS), Av. Alem 1253, Bahía Blanca, B8000CP, Argentina

<sup>2</sup>Universidad Tecnológica Nacional, 11 de Abril 461, Bahía Blanca, B8000CP, Argentina

lmeier@uns.edu.ar

**Introducción:** El flúor (F) en concentraciones superiores a 1.7 mg/L<sup>1</sup> puede provocar problemas de salud como fluorosis dental y ósea, daño neurológico entre otros<sup>2</sup>. Siendo el consumo de agua esencial para la vida humana, la ingesta de éste elemento se vuelve mayor en zonas endémicas de alta concentración. El propósito del presente trabajo es analizar el efecto de TiO<sub>2</sub> estructura anatasa pura en la remediación de fluoruro en medio acuoso.

**Resultados:** Los resultados basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) fueron obtenidos empleando el código VASP utilizando una base de ondas planas y condiciones periódicas. Se estudió la adsorción de NaF sobre la superficie de anatasa con y sin presencia de agua.



**Fig. 1:** Adsorción de NaF sobre TiO<sub>2</sub> anatasa: a) sin presencia de agua, b) con agua. Ti: celestes, O: blanco, F: rojo y Na: amarillo.

**Conclusiones:** En presencia de agua se produce la disociación de NaF facilitando la incorporación de F en la estructura de TiO<sub>2</sub> anatasa ocupando un sitio intersticial subsuperficial. La carga Bader de la primera capa de TiO<sub>2</sub> es negativa siendo mayor con la presencia de agua, desfavoreciendo la adsorción de aniones sobre la anatasa.

#### Referencias

- 1) Tor A., Danaoglu N., Arslan G., Cengeloglu Y. *J. Hazard. Mater.*, **2009**, 164, 271–278.
- 2) Tang Y., Guan X., Wang J., Gao N., McPhail M., Chusuei C. *J. Hazard. Mater.*, **2009**, 171, 774–779.