

Estudio teórico comparativo de NaF acuoso sobre TiO₂(101) anatasa y TiO₂(110) rutilo

- Lorena Meier,¹ Ana Belén Schvval,^{1,2} Cecilia Ines Nora Morgade^{1,3}

¹*Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.*

²*Departamento de Química - Universidad Nacional del Sur*

³*Universidad Tecnológica Nacional*

El flúor (F) en concentraciones superiores a 1.7 mg/L[1] puede provocar fluorosis dental y ósea, así como daño neurológico entre otros importantes problemas de salud[2]. La ingesta de éste elemento se vuelve problemática en zonas endémicas de alta concentración en el agua de bebida. El propósito del presente trabajo es estudiar superficies estables de TiO₂ en sus estructuras anatasa y rutilo como posibles materiales adsorbentes para la remoción de dicho ion. 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. Al adicionar NaF y dos moléculas de agua para simular disolución acuosa se observa que el átomo de F se adsorbe sobre un átomo de Ti insaturado pentacoordinado en la superficie de TiO₂(110) de rutilo, mientras que ocupa un sitio intersticial en la superficie de TiO₂(101) correspondiente a la anatasa. Es interesante destacar que en el caso de fluoruro de sodio en anatasa sin la presencia de agua (NaF/A) la hibridación entre el átomo de F y el Ti se produce en la banda de conducción (BC) asociado a un valor de orden de enlace (BO) despreciable, indicando que la unión no es enlazante. Diferente es la situación para el polimorfo rutilo (NaF/R) que presenta para el átomo de flúor y el Ti más próximo una hibridación interesante en la banda de valencia (BV) acompañada de un valor de BO importante. La presencia de H₂O en ambos sistemas permite observar que para el caso de anatasa (NaF-2H₂O/A) la hibridación se produce en la BV pero entre el átomo de flúor intersticial y los átomos de oxígenos cercanos, mientras que para rutilo (NaF-2H₂O/R) la interacción enlazante se produce en la misma banda pero entre el F y los Ti aledaños de la superficie.

Referencias:

[1] Tor A., Danaoglu N., Arslan G., and Cengeloglu Y., J. Hazard. Mater. **164**, 271 (2009).

[2] Tang Y., Guan X., Wang J., Gao N., McPhail M., and Chusuei C., J. Hazard. Mater. **171**, 774 (2009).