

## Estudio teórico comparativo de la adsorción de fluoruros en diferentes óxidos

- Lorena Meier,<sup>1</sup> Cecilia Ines Nora Morgade,<sup>1,2</sup> Ana Belén Schvval,<sup>1,3</sup> Ana Cecilia Rossi Fernández,<sup>4</sup> Silvia Andrea Fuente<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina

<sup>2</sup>Universidad Tecnológica Nacional

<sup>3</sup>Departamento de Química - Universidad Nacional del Sur

<sup>4</sup>Instituto de Química del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca

El anión fluoruro es uno de los contaminantes presentes en aguas de diferentes orígenes en muchas partes del mundo. Entre las diversas tecnologías utilizadas para la defluoruración se han probado algunas basadas en coagulación, precipitación, procesos de membrana, tratamientos electrolíticos e intercambio iónico. También han sido estudiados experimentalmente procesos de adsorción en diferentes materiales, entre los que se encuentran Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO y TiO<sub>2</sub> [1]. Por esta razón, y con la finalidad de buscar la optimización de estos, por su menor costo comparativo se decidió estudiar, en forma teórica y con la metodología DFT [2], la adsorción de fluoruros (NaF en este caso) en dichos óxidos para explicar las interacciones de los mismos a nivel molecular. En todos los casos se modelaron las superficies más estables ((0001) para Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, (100) para MgO, (101) para TiO<sub>2</sub> anatasa y (110) para TiO<sub>2</sub> rutilo). Las energías de adsorción obtenidas fueron -3.73 eV para Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, -2.62 eV para MgO, -2.98 eV para TiO<sub>2</sub> anatasa y -3.42 eV para TiO<sub>2</sub> rutilo, todas ellas indicativas de afinidad adsorptiva. En todos los casos, se observa elongación del enlace Na-F respecto a la molécula libre, siendo más notorio en el caso del Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Además, se obtienen valores elevados de bond order entre el átomo de flúor y el metal de la superficie del óxido correspondiente (0.53 para Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 0.25 para MgO, 0.35 TiO<sub>2</sub> anatasa y 0.29 para TiO<sub>2</sub> rutilo). La transferencia de carga electrónica en todos los casos, se produce desde el F al metal a excepción del sistema MgO.

### Referencias:

- [1] Mirna Habuda-Stanić, Maja Ergović Ravančić and Andrew Flanagan, *Materials* **7**, 6317 (2014).  
[2] Kresse G., and Hafner J., *Phys. Rev. B* **49**, 14251 (1994).