



6, 7 y 8 de septiembre de 2017.
Bahía Blanca. Argentina.

LA TITANIA COMO REMEDIADOR MEDIOAMBIENTAL DE ÓXIDOS DE NITRÓGENO

García, Griselda¹; Morgade, Cecilia I. N.²; Cabeza, Gabriela F.³

1: Centro de Investigación en Nanotecnología y Materiales Avanzados CIEN-UC
Instituto de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile
Casilla 306, Santiago, Chile
email: ggarcia@fis.puc.cl

2: Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET
Departamento de Física – UNS. Av Alem 1253, Bahía Blanca
Facultad Regional Bahía Blanca, Universidad Tecnológica Nacional
11 de abril 461, Bahía Blanca
email: cmorgade@uns.edu.ar

3: Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET
Departamento de Física - UNS
Av Alem 1253, Bah
email: gcabeza@uns.edu.ar

Resumen. *El dióxido de titanio o titania, TiO_2 , es un óxido metálico semiconductor con diferentes estructuras cristalinas que tiene buenas propiedades fotocatalíticas que se consideran adecuadas para pensar en la aplicación de este material en sistema que permitan bajar la contaminación medioambiental. Las moléculas NO_x que forman parte del aire contaminado pueden ser descompuestas en su interacción con titania. Así, la utilización de titania en las condiciones adecuadas podría ayudar a bajar los niveles de contaminación del aire pero existen problemas para estas aplicaciones ya que los productos de la desintegración de las moléculas, nitratos esencialmente, no se desorben espontáneamente de las superficies de titania y terminan por desactivar la fotocatalisis superficial.*

Los estudios computacionales de sistemas involucrados en reacciones químicas permitidos por la capacidad de cálculo actual brindan una herramienta complementaria a la investigación experimental. En nuestro caso utilizamos cálculos de densidad electrónica en sistemas con distintas configuraciones geométricas.

El objetivo de este trabajo es determinar las propiedades energéticas, estructurales y electrónicas de superficies de titania en fase anatasa $TiO_2(101)$ y rutilo $TiO_2(110)$ y moléculas de NO y de NO_2 como primer paso para analizar la reacción que lleve a la descomposición de las moléculas NO_x en moléculas de los gases elementales, N_2 y O_2 .

Los resultados obtenidos de los diferentes sitios de adsorción estudiados, indican que el NO se adsorbe a ambas superficies de manera inclinada, eliminándolo del aire, con el átomo de N ubicado en posiciones coordinadas con átomos de Ti . En el caso de la superficie (101), la

distancia interatómica de NO no sufre mayores variaciones respecto de cuando está libre, a diferencia del caso de la superficie (110), donde esa distancia se ve incrementada favoreciendo la disociación de la molécula. Para el caso de la adsorción de NO₂ sobre las superficies de titania, los resultados obtenidos hasta el momento no son concluyentes.

Palabras clave: contaminación, adsorción, titania, NO_x, DFT.

Oral