



Adsorción de 4-clorofenol sobre la superficie de TiO₂ (101)

Luis Antonio Cipriano Marcos¹, Julio César González Torres¹, Víctor Daniel Domínguez Soria², y Óscar Olvera Neria¹.

¹ Área de Física Atómica Molecular Aplicada (FAMA), División de Ciencias Básicas e Ingeniería (CBI), Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, México, D. F. 02200, México.

² Área de Química Aplicada, División de Ciencias Básicas e Ingeniería (CBI), Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, México, D. F. 02200, México.

lantonio_cm@protonmail.com

Para que la degradación del 4-clorofenol ocurra de manera que los subproductos no sean nocivos para la salud, es necesario el uso de catalizadores sólidos como el ZnO o el TiO₂ [1-3]. Estos tienen diversas funciones: generar radicales libres a través de los portadores de carga y facilitar la degradación del compuesto a través de la adsorción. En este estudio se propone adsorber la molécula de 4-clorofenol sobre la superficie (101) del TiO₂, con el fin de elucidar el proceso de degradación.

Se tiene reportado [4] que la superficie (101) del TiO₂ en su fase anatasa presenta estados electrónicos localizados inducidos por vacancias de átomos de oxígeno. Para estudiar el efecto de los defectos en la red, se estudió la adsorción del 4-clorofenol, sobre la superficie (101) del TiO₂, con y sin vacancias de oxígenos.

Para el estudio del 4-clorofenol se utilizó el programa ORCA, en el que se implementa la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT), utilizando el funcional de intercambio y correlación propuesto por Perdew Burke y Ernzerhoff (PBE). Además, debido a que los compuestos tipo fenol se encuentran en fase acuosa, se emplearon las bases; def2-TZVP y el método de solvatación COSMO para tomar en cuenta el efecto del solvente.

Para el estudio de la adsorción del 4-clorofenol sobre la superficie (101) del TiO₂, se utilizó el programa VASP con el mismo funcional. Se empleó una energía de corte de 450 eV y una supercelda de 2X2X1 que contiene 72 átomos para el catalizador. El criterio de convergencia en la energía es de 1×10^{-4} y 1×10^{-3} eV/Å para las fuerzas.

1. E. Grabowska, J. Reszczyńska, A. Zaleska, Mechanism of phenol photodegradation in the presence of pure and modified-TiO₂: A review, *Water Research*, 46 (2012) 5453-5471.
2. V.-M. Guérin, R. Zouzelka, H. Bibova-Lipsova, J. Jirkovsky, J. Rathousky, T. Pauporté, Experimental and DFT study of the degradation of 4-chlorophenol on hierarchical micro-/nanostructured oxide films, *Applied Catalysis B: Environmental*, 168-169 (2015) 132-140.
3. M.C. Cotto, A. Emiliano, S. Nieto, J. Duconge, R. Roque-Malherbe, Degradation of phenol by mechanical activation of a rutile catalyst, *Journal of Colloid and Interface Science*, 339 (2009) 133-139.
4. N.S. Portillo-Vélez, O. Olvera-Neria, I. Hernández-Pérez, A. Rubio-Ponce, Localized electronic states induced by oxygen vacancies on anatase TiO₂ (101) surface, *Surface Science* 616 (2013) 115-119.