



Adsorción de nitrato y bicarbonato sobre Fe-(hidr)óxido

Nancy Y. Acelas¹, Cacier Hadad², Albeiro Restrepo², César Ibarguen^{1,2}, Elizabeth Flórez¹

¹Grupo de Materiales y Biomodelación, MATBIOM. Departamento de Ciencias Básicas,
Universidad de Medellín, Medellín, Colombia

²Instituto de Química, Universidad de Antioquia UdeA, Medellín, Colombia
e-mail: nyacelas@udem.edu.co

En este trabajo, se utilizó Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT) para estudiar los complejos resultantes de la adsorción de bicarbonato y nitrato sobre Fe-(hidr)óxido como complejos de esfera interna y externa simulando condiciones ácidas, básicas y neutras de pH.

Se encontró que son más estables los estados de alto spin que siguen la regla $5N+1$ (N es el número de átomos de Fe, y cada uno contiene 5 electrones no apareados) y que los complejos superficiales mononuclear monodentado (MM_1) a condiciones neutras de pH son los más favorecidos por la termodinámica con una energía de adsorción de -63.9 kJ/mol y -28.2 kJ/mol, para el bicarbonato y el nitrato respectivamente.

Nuestros resultados sugieren que cuatro tipos de enlaces de hidrógeno asistidos por la carga y regulares están involucrados en el proceso de adsorción, y que todos pueden ser clasificados como capa cerrada (de largo alcance o iónico). Las cargas formales inducen enlaces de hidrógeno inusualmente cortos y fuertes. La capacidad de los estados de alta multiplicidad de clusters de Fe para adsorber oxianiones en entornos solvatados resulta de la siguiente interacción de orbitales: los orbitales virtuales $4s$ en el Fe tienen una gran afinidad por pares de electrones tipo $2p$ mientras que los orbitales d no experimentan cambios significativos.

N. Y. Acelas, S. M. Mejia, F. Mondragón and E. Flórez. Density functional theory characterization of phosphate and sulfate adsorption on Fe-(hydr)oxide: Reactivity, pH effect, estimation of Gibbs free energies, and topological analysis of hydrogen bonds. *Comp. Theor. Chem.* 2013, 1005, 16-24.

H. Wijnja and P. Schulthess. Carbonate Adsorption Mechanism on Goethite Studied with ATR-FTIR, DRIFT, and Proton Coadsorption Measurements. *Soil Sci Soc Am J.* 2001, 65, 324-330.