



EFFECTO DE LA ADICIÓN DE NANOCUSTERES DE Ag SOBRE TiO₂ EN LA ADSORCIÓN DE NO

A. B. Schvval¹, M. J. Jiménez¹, C. I. N. Morgade^{1,2*} G. F Cabeza¹.

¹ Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Bahía Blanca

² Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Bahía Blanca.

*julia.jimenez@uns.edu.ar

Debido a los efectos nocivos ya conocidos de los óxidos de nitrógeno, el control y la eliminación de las emisiones de NO_x se han convertido en un tema crítico. Estas moléculas forman parte del aire contaminado y pueden descomponerse en su interacción con la titania. Los estudios computacionales de sistemas involucrados en reacciones químicas proporcionan una herramienta complementaria a la investigación experimental. En este trabajo usamos un método de cálculo ab initio en el marco de la teoría funcional de la densidad (DFT+U), para estudiar el efecto de la deposición de clústeres de plata sobre las superficies de anatasa TiO₂(101) y rutilo TiO₂(110), en la adsorción y posible transformación de NO. Se evaluaron las propiedades electrónicas, estructurales y los efectos de transferencia de carga para la adsorción de NO en los sistemas Ag₄/TiO₂.

El depósito de plata en ambas fases polimórficas estudiadas, mejora efectivamente la capacidad catalítica² de la titania cuando se coloca a este metal en la superficie. Para TiO₂(110) la deposición de Ag₄ sobre la misma favorecería la transformación de NO a NO₂, aunque disminuye su afinidad por el NO. Por su parte, para la superficie TiO₂(101) el clúster de Ag favorecería la transformación de NO a N₂² y la adsorción de este gas sobre la superficie.

REFERENCIAS

1. Xu M., Wang Y, Geng J., Jing D. Chem.l Engineering Journal. Vol. 307, 181–188, 2017.
2. Lasek J., Yu Y. H., Wu J.C.S. *J. Photochem. Photobiol. C Rev.* Vol. 14, 29–52, 2013.