



## ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN DE ARSENIATO SOBRE GIBBSITA POR CÁLCULOS DFT

C. Luengo<sup>(1)\*</sup>, R. Ferullo<sup>(1)</sup>, N. Castellani<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> INQUISUR, Universidad Nacional del Sur, ARGENTINA

<sup>(2)</sup> Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, IFISUR, Universidad Nacional Del sur, ARGENTINA

\*[cluengo@uns.edu.ar](mailto:cluengo@uns.edu.ar)

### RESUMEN

Uno de los elementos químicos de gran interés en procesos relacionados con la contaminación ambiental es el arsénico. Dicho elemento es eminentemente tóxico y se encuentra en concentraciones bastante elevadas en el agua subterránea de las provincias de Buenos Aires, Córdoba, la Pampa y Santiago del Estero, agua que en muchos casos es utilizada para el consumo humano [1]. La concentración de arseniato en aguas naturales es determinada principalmente por procesos de adsorción-desorción sobre la superficie de minerales, entre los cuales los más importantes son los óxidos. La gibbsita ( $Al_2O_3 \cdot 3H_2O$ ) es un óxido de aluminio con gran área superficial y un importante adsorbente en sistemas de aguas subterráneas y superficiales.

El objetivo de este trabajo es estudiar la adsorción de arseniato sobre gibbsita utilizando el método del funcional de la densidad (DFT, Density Functional Theory) a través del funcional híbrido B3LYP y el empleo de las bases gaussianas 6-31G\*\* (para los átomos involucrados en la adsorción) y 3-21G (para el resto de los átomos). Se optimizaron las geometrías de los aniones arseniato, del cluster de gibbsita [ $Al_6(OH)_{18}(H_2O)_6$ ] y de los sistemas arseniato-gibbsita. Se optimizaron dos tipos de complejos superficiales a pH ácido y básico: monodentado mononuclear y bidentado binuclear. Se calcularon las energías para cada sistema incluyendo el efecto del solvente.

Los resultados indican que los complejos monodentados tienen mayor tendencia a formarse sobre la superficie de la gibbsita en comparación con los complejos bidentados. Las reacciones de adsorción tanto a pH bajo como alto son todas endotérmicas.

**Palabras clave:** química cuántica, óxido de aluminio, arsénico, adsorción.

### Referencias

[1] Smedley, P. L.; Kinniburgh, D. G. *A review of the source, behaviour and distribution of arsenic in natural waters*, Appl. Geochem., 2002, 17, 517-568.