



# VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

## Estudio geométrico DFT de pirofilita delaminada con sustituciones isomórficas

C. Romina Luna<sup>1</sup>, Walter G. Reimers<sup>1</sup>, Marcelo J. Avena<sup>2</sup>, Alfredo Juan<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Dpto. Física-Universidad Nacional del Sur-IFISUR, <sup>2</sup> Dpto. Química -Universidad Nacional del Sur-INQUISUR, cluna@uns.edu.ar

La estructura y composición de los materiales arcillosos hacen que éstos tengan varias aplicaciones, como por ejemplo remoción de contaminantes, refinación de petróleo y aislante térmico en el área de electrónica. Particularmente estudiamos pirofilita  $\text{Al}_2\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ , la cual es un silicato compuesto por dos capas tetraédricas y una octaédrica. Comúnmente en ésta se presentan sustituciones isomórficas de  $\text{Al}^{3+}$  por  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$  o  $\text{Fe}^{3+}$  [1]. Esto modifica las propiedades fisicoquímicas de la arcilla [2], con lo cual podrían inferirse nuevas aplicaciones.

En este trabajo se hizo un estudio DFT, implementado por el paquete VASP [3], sobre los cambios geométricos que inducen las tres sustituciones más comunes en pirofilita delaminada (P-D).

El grosor de capa en la pirofilita delaminada (P-D) es ligeramente menor en relación a la pirofilita apilada (P-A) (4 % aproximadamente) y en cuanto a las distancias de enlace no se observaron cambios significativos.

Los resultados obtenidos muestran que el incremento en el grosor de la capa está significativamente influenciado por el radio iónico del sustituyente; encontrando la siguiente relación de orden  $\text{Al}^{3+} < \text{Fe}^{3+} < \text{Mg}^{2+} < \text{Fe}^{2+}$  (ver Tabla 1).

Los ángulos del hexágono formados por los tetraedros de Si sufren una fuerte distorsión debido a la presencia de Mg o Fe, siendo más notorio para  $\text{Mg}^{2+}$  y  $\text{Fe}^{2+}$ .

**Tabla 1.** Grosor de capa (dL), distancias de enlace y ángulos del hexágono formado por los tetraedros para: Pirofilita apilada (P-A) y delaminada (P-D), y ésta última con diferentes sustituciones isomórficas en la capa octaédrica

Sistema	dL (Å)	Si-O (Å)	Al-O (Å)	Ángulo hexágono (°)
P-A	6.38	1.63	1.95	109
P-D	6.12	1.64	1.94	104-133
P-D ( $\text{Al}^{3+}/\text{Mg}^{2+}$ )	6.23	1.63	1.91	111-127
P-D ( $\text{Al}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ )	6.26	1.64	1.95	114-126
P-D ( $\text{Al}^{3+}/\text{Fe}^{3+}$ )	6.21	1.65	1.95	108-132

De acuerdo a los resultados se puede observar leves cambios en la geometría de la P-D debido a las sustituciones, produciendo una distorsión en red.

Se podría inferir que estos cambios geométricos inducen modificaciones en las propiedades fisicoquímicas de la pirofilita. Al tener mayor superficie expuesta se podrían esperar nuevas aplicaciones frente a las arcillas apiladas, como por ejemplo adsorción de contaminantes como herbicidas (Paraquat), antibióticos (Tetraciclina) y material de aislamiento térmico.

### Referencias

- 1) Siguín, D., *J. Mater. Sci.*, **1993**, 10, 6163-6166
- 2) Zielke, R. C. *Clay. Clay. Miner.*, **1988**, 36, 403-408
- 3) <https://www.vasp.at/>