Humanidades, Tecnología y Ciencia, del Instituto Politécnico Nacional
Certificado de Reserva de Derechos al Uso Exclusivo del Título: 04-2010-0326124-14000-203 ISSN: 2007-1957

INTERACCIONES MOLECULARES Y MECANISMOS DE ADSORCIÓN DE AGUA EN NANOESTRUCTURAS DE TiO_2

Alejandro N. Ocampo Crisóstomo
Instituto Politécnico Nacional - ESCOM
ocampocalejandro@gmail.com

Margarita Clarisaila Crisóstomo Reyes
Instituto Politécnico Nacional – CECyT No. 8
mcrisostomo@ipn.mx

María Isabel Iturríos Santos
Instituto Politécnico Nacional – CECyT No. 8
miturrios@ipn.mx

Resumen

La adsorción de agua sobre nanoestructuras de dióxido de titanio (TiO_2) constituye un fenómeno físico-químico esencial para el avance de la nanotecnología ambiental y la fotocatálisis. A escala nanométrica, la interacción entre las moléculas de agua y la superficie del semiconductor ocurre mediante dos mecanismos críticos: la quimisorción disociativa, que genera grupos hidroxilo activos, y la fisisorción molecular, que estructura capas de hidratación. Este proceso está intrínsecamente ligado a la morfología del material y a la presencia de vacancias de oxígeno, las cuales actúan como sitios de alta reactividad. Comprender estas interacciones es fundamental para optimizar la producción de hidrógeno verde y mejorar la eficiencia en la degradación de contaminantes. El estudio de estas interfaces no solo revela la complejidad de los estados superficiales, sino que define el potencial del TiO_2 en la transición hacia energías limpias.

Palabras clave: Adsorción, agua, nanoestructuras, dióxido de titanio, energías limpias.

En la búsqueda de alternativas sostenibles frente a los retos energéticos y ambientales del siglo XXI, el dióxido de titanio (TiO_2) se ha posicionado como uno de los semiconductores

más estudiados y aprovechados en la ciencia de materiales. Su capacidad para convertir la luz en reacciones químicas lo ha vuelto especialmente atractivo para aplicaciones como la descontaminación de agua y aire, así como para el desarrollo de rutas hacia combustibles renovables.

Aun así, gran parte de su desempeño no depende únicamente de lo que ocurre "dentro" del material, sino de lo que pasa en su superficie, justo donde entra en contacto con el entorno: la interfaz sólido-líquido. En esa zona, a escala nanométrica, la manera en que el agua se adsorbe sobre el TiO_2 puede impulsar o limitar la fotocatálisis. Por eso, entender cómo las moléculas de agua se fijan, se separan en especies reactivas y se acomodan sobre distintas caras cristalinas del TiO_2 no es solo una curiosidad académica; es un paso necesario para diseñar catalizadores de nueva generación, más eficientes y capaces de reproducir, bajo condiciones controladas, parte de la efectividad de los procesos naturales (Çetin, 2025).

Mecanismos de adsorción

La interacción inicial del agua con el TiO_2 puede ocurrir de dos formas principales (Diebold, 2017), dependiendo de la energía de la superficie y los sitios activos:

- Adsorción Disociativa (Quimisorción): Las moléculas de agua se rompen al tocar la superficie, formando grupos hidroxilo (–OH) anclados a los átomos de Titanio (Ti^{4+}). Estos grupos son los responsables de la formación de radicales libres bajo luz UV.
- Adsorción Molecular (Fisisorción): Las moléculas de agua se mantienen íntegras, uniéndose mediante puentes de hidrógeno a los grupos hidroxilo previamente formados. Esto crea multicapas de agua "tipo líquido" sobre la nanoestructura.

Ventajas de la estructura cristalina

El dióxido de titanio presenta varios polimorfos a partir de una misma unidad básica, ver Figura 1. Cada estructura presenta diferentes conectividades espaciales entre sus átomos y la red cristalina define sus propiedades y comportamiento de adsorción.

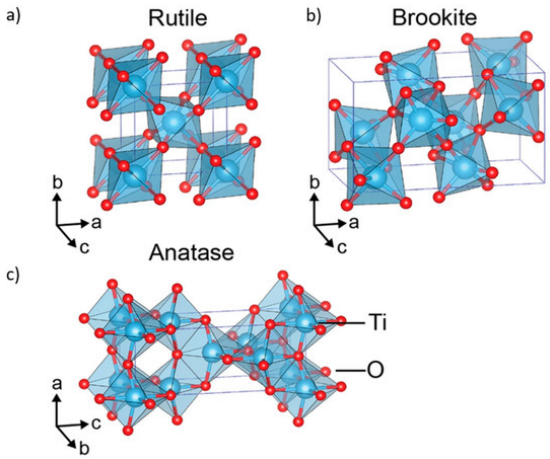

Figura 1. Estructuras cristalinas del TiO_2: (a) rutilo; (b) anatasa; (c) brookita. (Haggerty et al., 2017)

El polimorfo Anatasa, presenta una estructura tetragonal (Hanaor, 2010). En términos generales se asocia con alta reactividad superficial y buen desempeño fotoactivo (Stetsovych et al., 2015). La cara (101) es la más estable (Yang et al., 2008) y favorece la adsorción molecular, mientras que la cara (001) tiende a la disociación bajo ciertas condiciones (Li et al., 2022).

La estructura Rutilo, tiene una forma tetragonal (Smith et al, 2018). La superficie

(110) es el modelo más estudiado (Diebold, 2017); muestra una mezcla de adsorción molecular y disociativa. La adsorción disociativa se asocia fuertemente a vacancias de oxígeno (Schaub et al, 2001), mientras que en condiciones ideales predomina la adsorción molecular, lo que explica la "mezcla" en función del grado de defectos (Henderson, 1996).

Por último, la estructura Brookita, tiene una forma ortorrómbica y es menos común en investigaciones, pero presenta propiedades únicas debido a su compleja disposición de sitios activos (Di Paola et al, 2013).

Análisis de los Factores Críticos en la Nanoescala

La eficiencia del TiO_2 depende de su arquitectura superficial, donde la topografía atómica y las vacancias de oxígeno dictan la transición de una adsorción molecular a una disociativa (Méndez-Lozano et al., 2025). Esta reactividad se potencia mediante el uso de nanoestructuras auto-organizadas que exponen facetas de alta energía, como la (001). Este efecto de confinamiento y orientación cristalográfica, optimizan el área de contacto efectiva y la transferencia de carga (Malannata et al., 2025).

A este diseño estructural se suma el efecto de la irradiación UV, la cual induce una hidrofilia fotoinducida al generar centros Ti^{3+} y nuevos sitios de quimisorción. Este fenómeno dinámico elimina la resistencia interfacial y garantiza una cobertura total de agua, facilitando reacciones de óxido-reducción más eficientes para la producción de hidrógeno y la purificación ambiental (Méndez-Lozano et al., 2024).

Aplicaciones Tecnológicas

El control de la adsorción de agua en el TiO_2 permite aplicaciones críticas en sostenibilidad y tecnología. Destaca la producción de hidrógeno verde mediante la división fotocatalítica del agua y la remediación ambiental para eliminar contaminantes orgánicos (Malannata et al., 2025). Asimismo, la hidrofilia inducida por luz permite crear superficies autolimpiantes que repelen la suciedad, mientras que la sensibilidad de su conductividad superficial facilita el desarrollo de sensores de humedad de alta precisión.

Conclusiones

La eficiencia de nanoestructuras de TiO_2 está supeditada a una sinergia dinámica entre su arquitectura nanométrica y la activación lumínica. El control de los defectos superficiales y la morfología dicta los mecanismos de adsorción. En este contexto, la hidrofilia superfotoinducida por radiación UV actúa como mecanismo clave que transforma la interfaz, permitiendo una cobertura total de la superficie y potenciando la reactividad química necesaria para procesos oxidativos.

Finalmente el dominio de la interfaz sólido-líquido es el pilar fundamental para aplicar estas estructuras en el diseño de dispositivos de próxima generación, desde sensores de humedad ultrasensibles hasta sistemas eficientes de producción de hidrógeno verde y la remediación ambiental, consolidando al dióxido de titanio como un material estratégico en la transición hacia tecnologías globales sostenibles.

9. Referencias

Çetin, Y. A., Escorihuela, L., Martorell, B., & Serratosa, F. (2025). Revisiting Water Adsorption on TiO2 and ZnO Surfaces: An SCC-DFTB Molecular Dynamics Study. ACS Omega, 10(5), 4449-4457. https://doi.org/10.1021/acsomega.4c07557

Diebold, U. (2017). Perspective: A controversial benchmark system for water-oxide interfaces: H2O/TiO2(110). The Journal of Chemical Physics, *147*(4), 040901. https://doi.org/10.1063/1.4996116

Di Paola, A., Bellardita, M., & Palmisano, L. (2013). Brookite, the least known TiO_2 photocatalyst. Catalysts, 3(1), 36–73. https://doi.org/10.3390/catal3010036

Haggerty, J. E. S., Schelhas, L. T., Kitchaev, D. A., Mangum, J. S., Garten, L. M., Sun, W., Stone, K. H., Perkins, J. D., Toney, M. F., Ceder, G., Ginley, D. S., Gorman, B. P., & Tate, J. (2017). High-fraction brookite films from amorphous precursors. Scientific Reports, 7(1). https://doi.org/10.1038/s41598-017-15364-y

Hanaor, D. A. H., & Sorrell, C. C. (2010). Review of the anatase to rutile phase transformation. Journal Of Materials Science, 46(4), 855-874. https://doi.org/10.1007/s10853-010-5113-0

Henderson, M. A. (1996). An HREELS and TPD study of water on TiO_2(110): The extent of molecular versus dissociative adsorption. Surface Science, *355*(1–3), 151–166. https://doi.org/10.1016/0039-6028(95)01357-1

Li, J., Sun, Y., & Cheng, J. (2022). Theoretical investigation on water adsorption conformations at aqueous anatase TiO2/water interfaces. Journal Of Materials Chemistry A, 11(2), 943-952. https://doi.org/10.1039/d2ta07994a

Malannata, E. M., Auditore, A., Fiorenza, R., Armeli Iapichino, M. T., Lo Presti, F., Tuccitto, N., & Licciardello, A. (2025). Simultaneous H2 production and water purification with surface-modified nanostructured TiO2 photoelectrodes. *RSC Advances*, *15*(18), 14273-14285. https://doi.org/10.1039/D5RA00251F

Méndez-Lozano, N., Pérez-Ramírez, E. E., & de la Luz-Asunción, M. (2024). Microwave-assisted hydrothermal synthesis of hydroxyapatite flakes as substrates for titanium dioxide film deposition. *Ceramics*, *7*(2), 735-742. https://doi.org/10.3390/ceramics7020046

Schaub, R., Thostrup, P., Lopez, N., Lægsgaard, E., Stensgaard, I., Nørskov, J. K., & Besenbacher, F. (2001). Oxygen vacancies as active sites for water dissociation on rutile TiO_2(110). Physical Review Letters, 87(26), 266104. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.266104

Smith, K. A., Whittle, K. R., Lumpkin, G. R., & Marks, N. A. (2018). Effects of intermediate energy heavy-ion irradiation on the microstructure of rutile TiO_2 single crystal. Journal of the American Ceramic Society.

Stetsovych, O., Todorović, M., Shimizu, T. K., Moreno, C., Ryan, J. W., León, C. P., Sagisaka, K., Palomares, E., Matolín, V., Fujita, D., Perez, R., & Custance, O. (2015). Atomic species identification at the (101) anatase surface by simultaneous scanning tunnelling and atomic force microscopy. Nature Communications, 6(1), 7265. https://doi.org/10.1038/ncomms8265

Yang, H. G., Sun, C. H., Qiao, S. Z., Zou, J., Liu, G., Smith, S. C., Cheng, H. M., & Lu, G. Q. (2008). Anatase TiO2 single crystals with a large percentage of reactive facets. Nature,

453(7195), 638-641. https://doi.org/10.1038/nature06964