

Modelado teórico de fotocatalizadores basados en BiOX

- Silvia A. Fuente,^{1,2} Ana B. Schwval,^{2,3} Carlos Duran Álvarez,⁴ Gabriela F. Cabeza,^{2,5} Cecilia I. Morgade^{1,2}

¹Facultad Regional Bahía Blanca - Universidad Tecnológica Nacional

²Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur

³Departamento de Química - Universidad Nacional del Sur

⁴Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional Autónoma de México

⁵Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur

Los materiales fotocatalizadores prometen un amplio campo de aplicación en procesos de descontaminación de aguas residuales, purificación del aire y producción de energía limpia a través de la separación del agua en H_2 y O_2 entre otros. Los oxihaluros de bismuto (BiOX ($X = F, Cl, Br, I$)) son compuestos semiconductores ternarios, los cuales presentan una alta actividad fotocatalítica bajo radiación ultravioleta (UV) o visible. Son, a la fecha, los menos estudiados. Se consideran de importancia ya que presentan mayor actividad fotocatalítica que el TiO_2 , el cual es el referente comercial más utilizado en el campo ambiental. Poseen excelentes propiedades eléctricas y ópticas por lo cual se han convertido en una opción ideal como nuevos fotocatalizadores de luz visible [1]. Los BiOX cristalizan en una estructura tipo matlockita, con capas de Bi_2O_2 , intercaladas por una doble capa de átomos de halógeno. El objetivo principal de este trabajo es realizar un modelo teórico de los mismos que se correlacione con los estudios experimentales existentes, a través del cual se pueda analizar su comportamiento como fotocatalizadores. Para representarlos se realizó un modelo teórico-cuántico basado en la teoría del funcional de la densidad (DFT-D3) [2], considerando la corrección de Grimme que tiene en cuenta las fuerzas de Van der Waals. Se utilizó el paquete comercial VASP [3] y la aproximación de slabs para representar superficies extendidas. Se focalizó en el modelado del bulk y la superficie (001) (por ser la más estable), para los cuatro halógenos. Para los cálculos se utilizó el funcional de correlación e intercambio PBE y una energía de corte de 520 eV. Observando las energías totales de las diferentes terminaciones superficiales (X, O y Bi) para cada uno de los halógenos que conforman los diferentes BiOX, se llega a la conclusión de que las superficies terminadas en halógeno son las más estables. Los enlaces tipo puente hidrógeno que existen entre los halógenos son los más débiles y fáciles de romper para generar dichas superficies. Analizando las densidades de estado (DOS) se puede concluir que el borde superior de la banda de valencia en todos los casos es el mismo, el cual está relacionado con los potenciales de oxidación. El potencial de reducción está vinculado con el borde inferior de la banda de conducción, y se ve que en este caso el flúor es el más reductor.

Referencias:

[1] Wei Pingyu Y.Q., Guo Lin, Progress in Chemistry **21**, 1734 (2009).

[2] S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and S. Krieg, J. Chem. Phys. **132**, 154104 (2010).

[3] Kresse G., Hafner J., Phys. Rev. B **49**, 14251 (1994).