



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

ESTUDIO TEÓRICO DE FOTOCATALIZADORES BASADOS EN BiOX

Fuente Silvia¹, Schvval Ana Belén¹, Duran Álvarez J. Carlos², Cabeza Gabriela¹, C. I. Morgade Cecilia I.^{1,3}

¹ Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca.

² Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, México.

³ Departamento de Ciencias básicas-Universidad Tecnológica Nacional, Bahía Blanca. sfuente@uns.edu.ar

Introducción

Los materiales fotocatalizadores prometen un amplio campo de aplicación en procesos de descontaminación de aguas residuales, purificación del aire, y producción de energía limpia. 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. Se consideran de importancia ya que presentan mayor actividad fotocatalítica que el TiO₂, el cual es el referente comercial más utilizado en el campo ambiental. Cristalizan en una estructura tipo matlockita, con capas de Bi₂O₂, intercaladas por una doble capa de átomos de halógeno. En este trabajo se presenta el estudio teórico de los mismos basado en la teoría del funcional de la densidad (DFT), utilizando el paquete comercial VASP(1). Se focalizó en el modelado del bulk y la superficie (001) por ser la más estable.

Resultados y Conclusiones

En la Figura 1 se muestran las geometrías del bulk (a) y superficie (001) terminada en haluro (b). En la Figura 2 se ven las DOS totales de, bulk en la parte superior y superficie (001) en la inferior. Se puede observar 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.

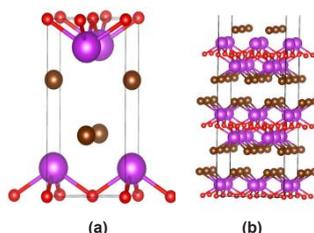


Figura 1

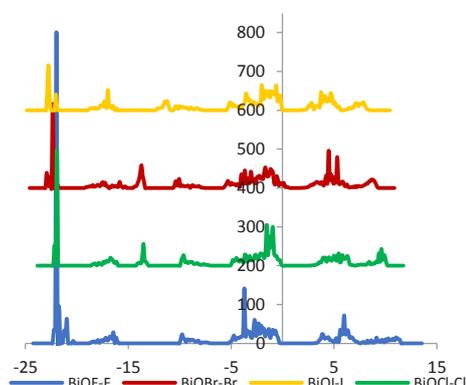
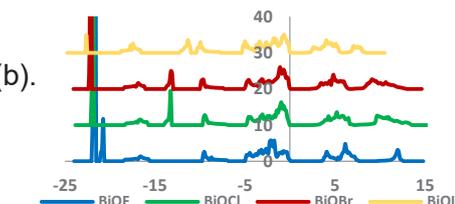


Figura 2

Referencias

1) Kresse G., Hafner J., Phys. Rev. B, **1994**, 49, 14251-14268.