

# ESTUDIO TEÓRICO DE FOTOCATALIZADORES BASADOS EN BIOX



Fuente Silvia A.<sup>1</sup>, Schvval Ana Belén<sup>1</sup>, Duran Álvarez J. Carlos<sup>2</sup>, Cabeza Gabriela<sup>1</sup>, C. I. Morgade Cecilia I.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca.

<sup>2</sup> Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, México.

<sup>3</sup> Departamento de Ciencias básicas-Universidad Tecnológica Nacional, Bahía Blanca.

E-mail contacto: [sfuente@uns.edu.ar](mailto: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 a través de la separación del agua en H<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> 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<sub>2</sub>, el cuál 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].

## Objetivo y Modelo Teórico

Los BiOX cristalizan en una estructura tipo matlockita, con capas de Bi<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 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.

Se utilizó un modelo teórico-cuántico basado en la teoría del funcional de la densidad (DFT-D3) [2], el cuál considera 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 4 halógenos. Para los cálculos se utilizó el funcional de correlación e intercambio PBE y una energía de corte de 520 eV.

## Resultados y Conclusiones

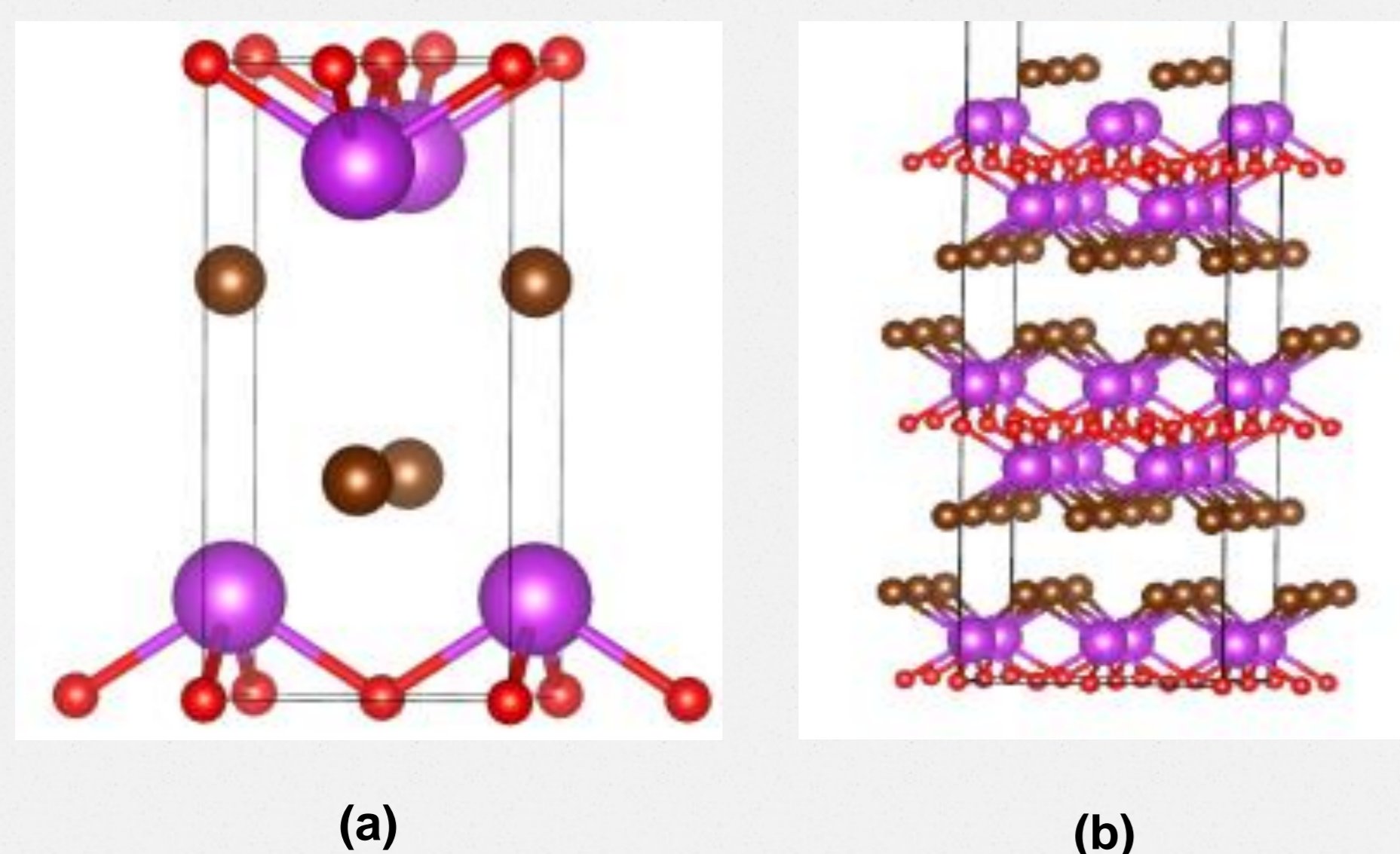


Figura 1: (a) se muestra la geometría optimizada del bulk de BiOX (X= Cl, Br, I o F). Las esferas rojas representan a los átomos de O, las moradas a los átomos de Bi y las marrones al haluro según corresponda. (b) se muestra la geometría optimizada de la superficie (001) terminada en haluro.

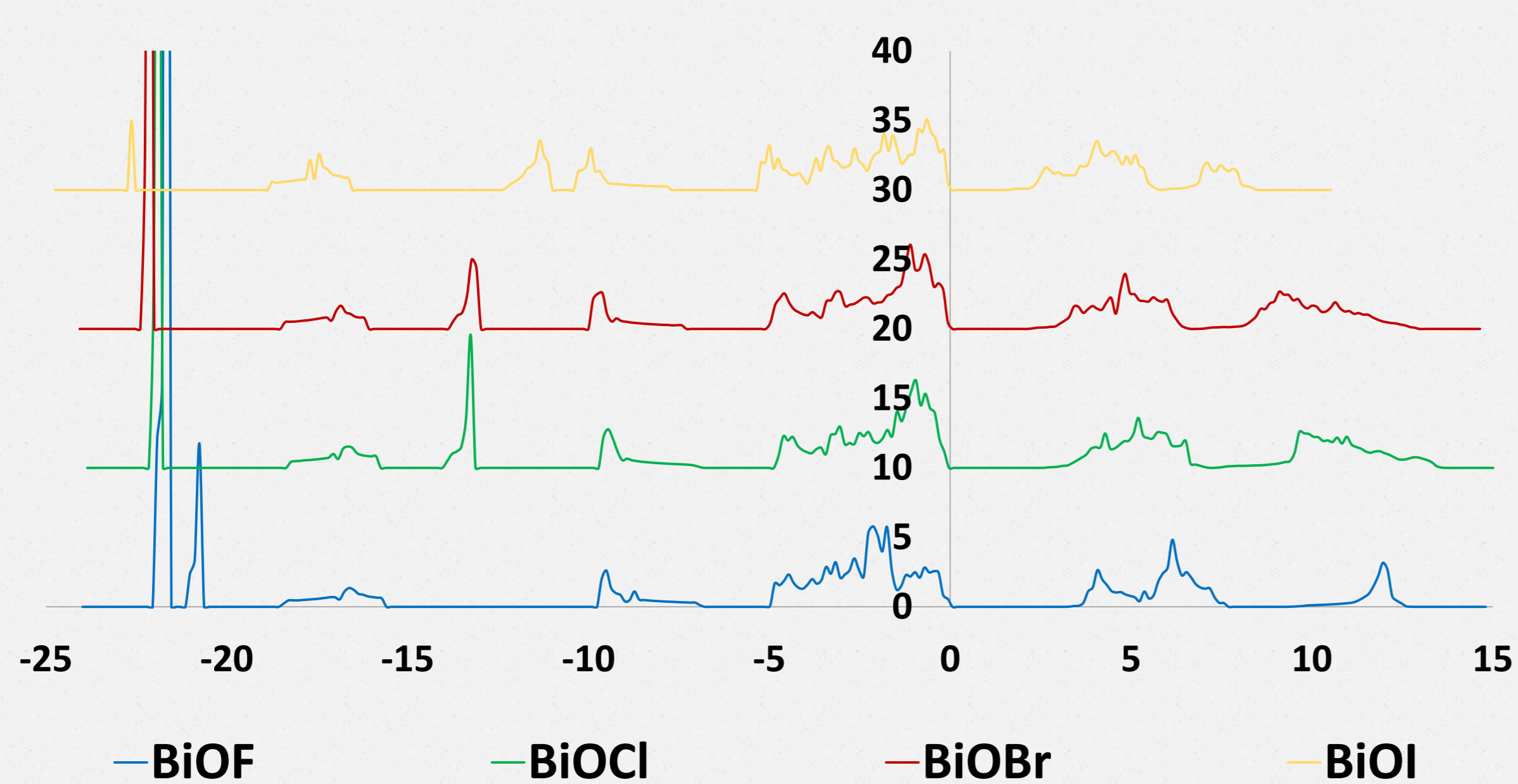


Figura 2a

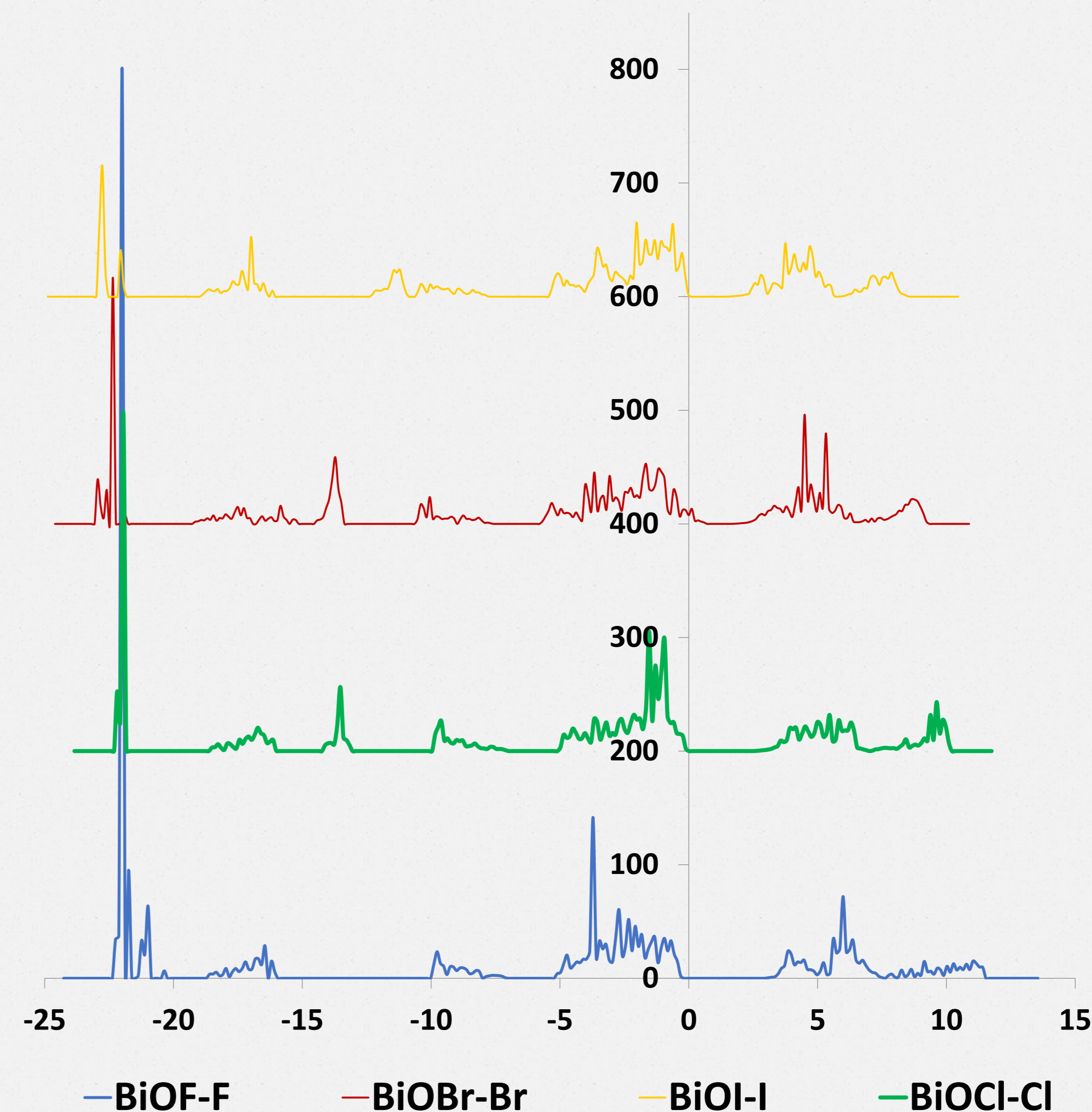


Figura 2a: se muestran las densidades de estado totales (DOS) para el bulk de BiOX (X= Cl, Br, I o F).

Figura 2b: se muestran las densidades de estado totales (DOS) para la superficie (001) terminada en haluro X (X= Cl, Br, I o F).

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 la superficie terminada 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.

En la figura 2 (a y b) se puede observar que el borde superior de la banda de valencia en todos los casos es el mismo, el cuál 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, 2009, 21 1734-1741.
- 2) S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and S. Krieg, J. Chem. Phys., 2010, 132, 154104.
- 3) Kresse G., Hafner J., Phys. Rev. B, 1994, 49, 14251-14268..