



FOTOCATALIZADORES ACTIVOS EN LA REGIÓN VISIBLE: TiO_2 (101) DOPADO CON METALES Y ELEMENTOS DEL GRUPO PRINCIPAL

Óscar Olvera Neria, Julio César González Torres

Área de Física Atómica Molecular Aplicada (FAMA), CBI, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Ciudad de México, 02200, México.
oon@correo.azc.uam.mx

El dióxido de titanio (TiO_2) en fase anatasa presenta una brecha de energía de 3.2 eV, lo cual impone el uso de fotones UV para generar los portadores de carga, electrones y huecos. En este trabajo presentamos el desarrollo de fotocatalizadores activos en la región visible ($\lambda > 387$ nm) a través de dopar la superficie de TiO_2 (101) con Pt, Pd y Fe, así como con C, N, S y F. La estructura electrónica de los fotocatalizadores propuestos se determinó mediante la teoría de funcionales de la densidad usando el programa VASP y la funcional de intercambio-correlación PBE. Las interacciones ion-electrón se describieron mediante pseudopotenciales usando el método del proyector de onda aumentada. Los electrones de valencia fueron considerados a través de un conjunto de base de ondas planas con una energía de corte de 400 eV. La superficie se modeló tomando en cuenta que el sistema presenta simetría traslacional en dos dimensiones. La supercelda usada está constituida por una superficie 3×3 en la dirección (101) con tres capas O-Ti-O (162 átomos) y 16 Å de vacío, lo cual asegura que dos superficies de superceldas vecinas no interactúan debido a la periodicidad del sistema. El fotocatalizador Fe- TiO_2 (101) es el más activo en la región visible (636 nm), aunque presenta estados en medio de la brecha de energía que favorecen los procesos de recombinación de los portadores de carga. El Pd- TiO_2 (101) también es activo pero en la región azul (498 nm). Los sistemas N- y C- TiO_2 (101) presentan energías de absorción de 402 y 525 nm (verde), respectivamente. Los sistemas co-dopados presentaron el siguiente orden de actividad en la región visible: N/Fe- < C/Fe- < C/Pd- < N/Pd- TiO_2 (101). La presencia de las impurificaciones en la superficie de TiO_2 genera estados localizados cerca de la banda de valencia y conducción, provocando una reducción de la brecha de energía y un incremento de la actividad fotocatalítica en la región visible. En particular, el N/Pd- TiO_2 (101) puede tener repercusiones significativas para la conversión de energía solar, la fotocatalisis y la fotosíntesis artificial.