



PROPIEDADES ÓPTICAS DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS SOPORTADAS EN SUPERFICIES DE TiO₂

José María Castillo Robles¹, Omar López-Estrada¹, Emilio Orgaz¹

¹Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, CP 04510, México, D.F. México. e-mail: chema2311@comunidad.unam.mx

En años recientes el diseño de nuevos materiales que presentan actividad fotocatalítica ha recibido un creciente interés debido a su potencial aplicación en la disminución de gases contaminantes como el CO₂¹. Particularmente el TiO₂ en sus fases de rutilo (110) y anatasa (101) y (001) emergen como un material de bajo costo y amigable con el ambiente², el cual puede presentar una modificación en el espectro de absorción óptica al ser dopado, de manera que se reduzca el ancho de la banda prohibida. En este trabajo estudiamos la respuesta óptica de superficies puras y dopadas de rutilo (110) y anatasa (101) y (001) mediante cálculos de primeros principios utilizando la implementación en el código VASP. Como conclusión reportamos el cambio de la constante dieléctrica al depositar cúmulos pequeños de metales de transición 3d, sobre las superficies mencionadas de anatasa y rutilo.

Referencias:

¹ Nolan, M.; Iwaszuk, A.; Lucid, A. K.; Carey, J. J.; Fronzi, M. *Adv. Mater.* **2016** 1–22.

² Lucid, A.; Iwaszuk, A.; Nolan, M. *Mater Sci Semicond Process.* **2014**, 25, 59–67.