



## MODELADO TEÓRICO DE FOTOCATALIZADORES BASADOS EN BiOI

**S. A. Fuente<sup>1\*</sup>, J. C. Duran Álvarez<sup>2</sup>, C. I. Morgade<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.

\* email: [sfuente@uns.edu.ar](mailto:sfuente@uns.edu.ar)

Los materiales fotocatalizadores prometen un amplio campo de aplicación en procesos de descontaminación de aguas residuales, en la purificación del aire, y en la 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 son a la fecha los menos estudiados. El presente trabajo se focalizó en el estudio del oxiyoduro de bismuto (BiOI), el cual es un compuesto ternario con una estructura de capas caracterizada por láminas [Bi<sub>2</sub>O<sub>2</sub>] intercaladas por láminas dobles de átomos de halógeno (I). Posee excelentes propiedades eléctricas y ópticas por lo cual se ha convertido en una opción ideal como un nuevo fotocatalizador de luz visible<sup>1</sup>.

El estudio basado en la teoría del funcional de la densidad (DFT), utilizando el paquete comercial VASP<sup>2</sup>, se efectuó sobre la superficie (001) de BiOI, terminada en O. Se estudió la adsorción de átomos de Au, Ag y Cu sobre la misma. El Au presentó una mayor afinidad por un sitio top con un O a diferencias de Ag y Cu que presentaron mayor afinidad sobre el Bi en puente con dos O. Los átomos metálicos depositados sobre la superficie en todos los casos presentaron oxidación siguiendo el orden Cu>Ag>Au. El Au es el metal con menor comportamiento metálico y es el único cuya superficie presentaría un pequeño band gap.

### REFERENCIAS

1. Wei Pingyu Y.Q., Guo Lin *Progress in Chemistry*, Vol. 21 1734-1741, 2009.
2. Kresse G., Hafner J., *Phys. Rev. B*, Vol.49 14251-14268, 1994.