



ESTUDIO DE NUEVOS FOTOCATALIZADORES DERIVADOS DE $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$

M. Gómez-Toledo, I. Collado, K. Boulahya y M.E. Arroyo-de Dompablo

Universidad Complutense, Departamento de Química Inorgánica, 28040 Madrid, España

INTRODUCCIÓN

La ruptura de la molécula de agua a través de fotocatalisis es uno de los métodos menos contaminantes y con menor coste para producir hidrógeno verde [1]. Por esta razón, un gran número de compuestos con actividad fotocatalítica han sido estudiados en los últimos años [2]. Entre ellos se encuentra el $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$, que posee una estructura laminar derivada de la perovskita [3]. Se ha visto que la sustitución de Sr por Ba puede conseguir una mejora en la actividad fotocatalítica [4], aunque sólo es posible sustituir alrededor del 10% del contenido total sin obtener separación de fases. Sin embargo, se desconoce qué cambios provoca dicha sustitución en la estructura electrónica del compuesto. Además, tampoco existen publicaciones sobre si la sustitución con Ca podría dar lugar a un efecto similar. Por todo ello, en este trabajo se combinan experimentos y cálculos para estudiar la sustitución de Sr por Ba y Ca en $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ (familia $\text{Sr}_{2-x}\text{A}_x\text{Ta}_2\text{O}_7$).

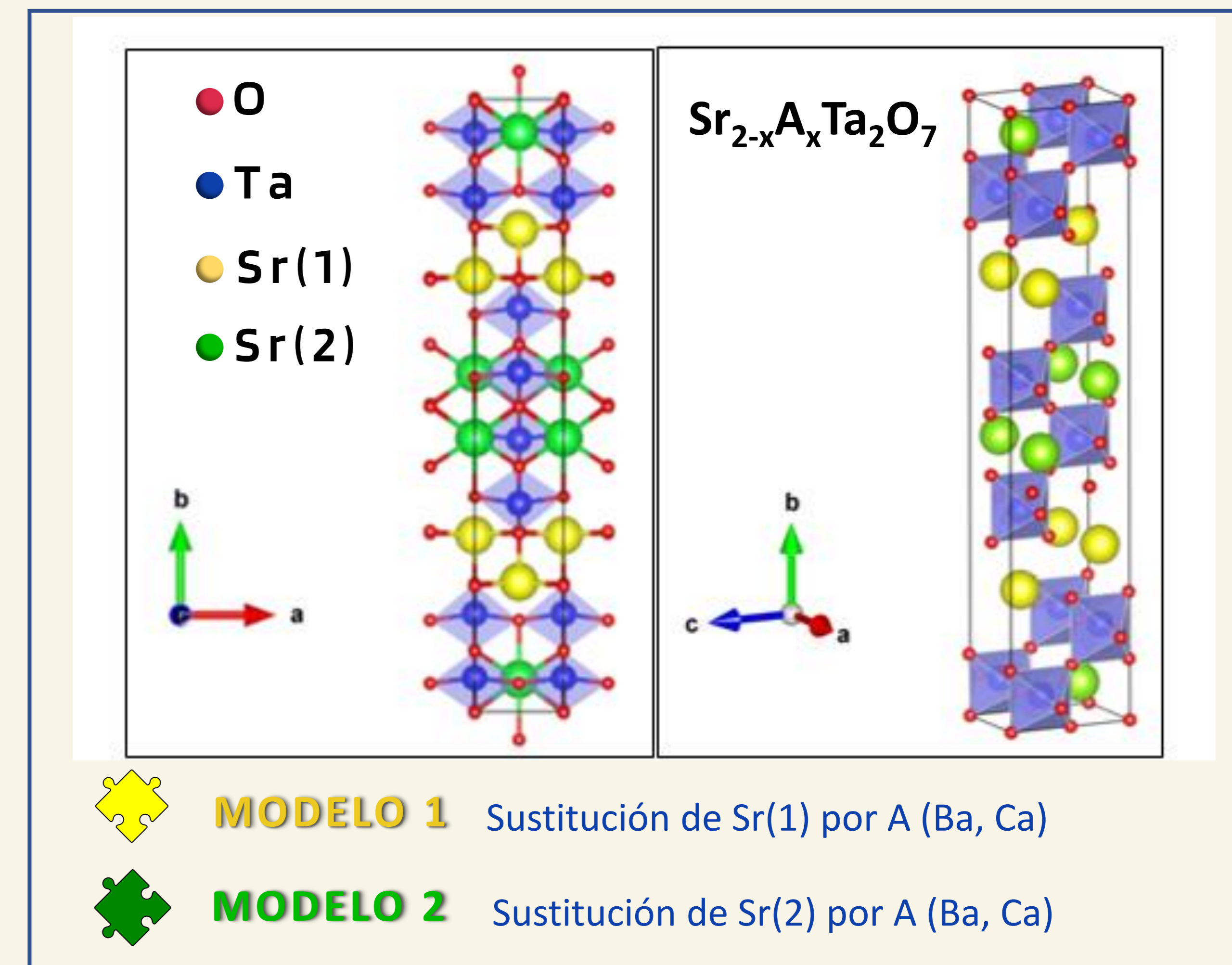
METODOLOGÍA

Experimental

- Síntesis a través del método cerámico utilizando precursores de las muestras $\text{Sr}_{2-x}\text{A}_x\text{Ta}_2\text{O}_7$ con A = Ca, Ba y x = 0.5 y 0.75.
- Caracterización mediante difracción de Rayos-X.

Computacional

- Teoría del funcional de densidad (DFT). VASP [5]
- Potenciales PAW – PBE. Funcional meta-GGA.
- Integración de la primera Zona de Brillouin con puntos-K 6x2x6.
- Energy cut-off de 600 eV.

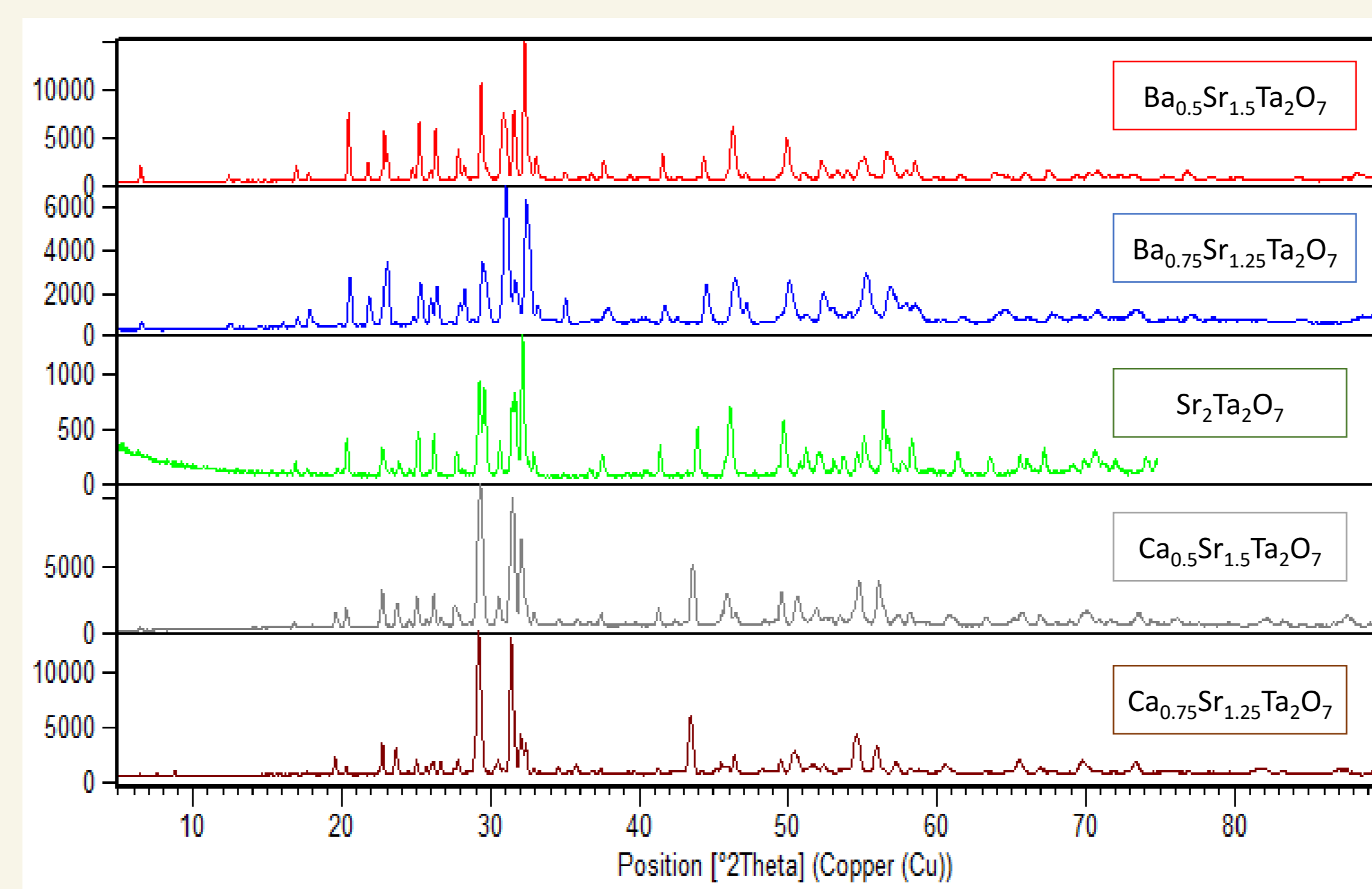


RESULTADOS

Estructura cristalina

$\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$	Experimental (Å)	Calculado (Å)
a	3,943	3,934
b	27,174	27,189
c	5,689	5,695

- La metodología DFT reproduce los datos experimentales.
- Se han sintetizado nuevas fases $\text{Sr}_{2-x}\text{A}_x\text{Ta}_2\text{O}_7$, (A = Ba; x = 0.5 y x = 0.75) con elevada pureza.
- Se han sintetizado nuevas fases $\text{Sr}_{2-x}\text{A}_x\text{Ta}_2\text{O}_7$, (A = Ca; x = 0.5 y x = 0.75) pero aparecen impurezas.



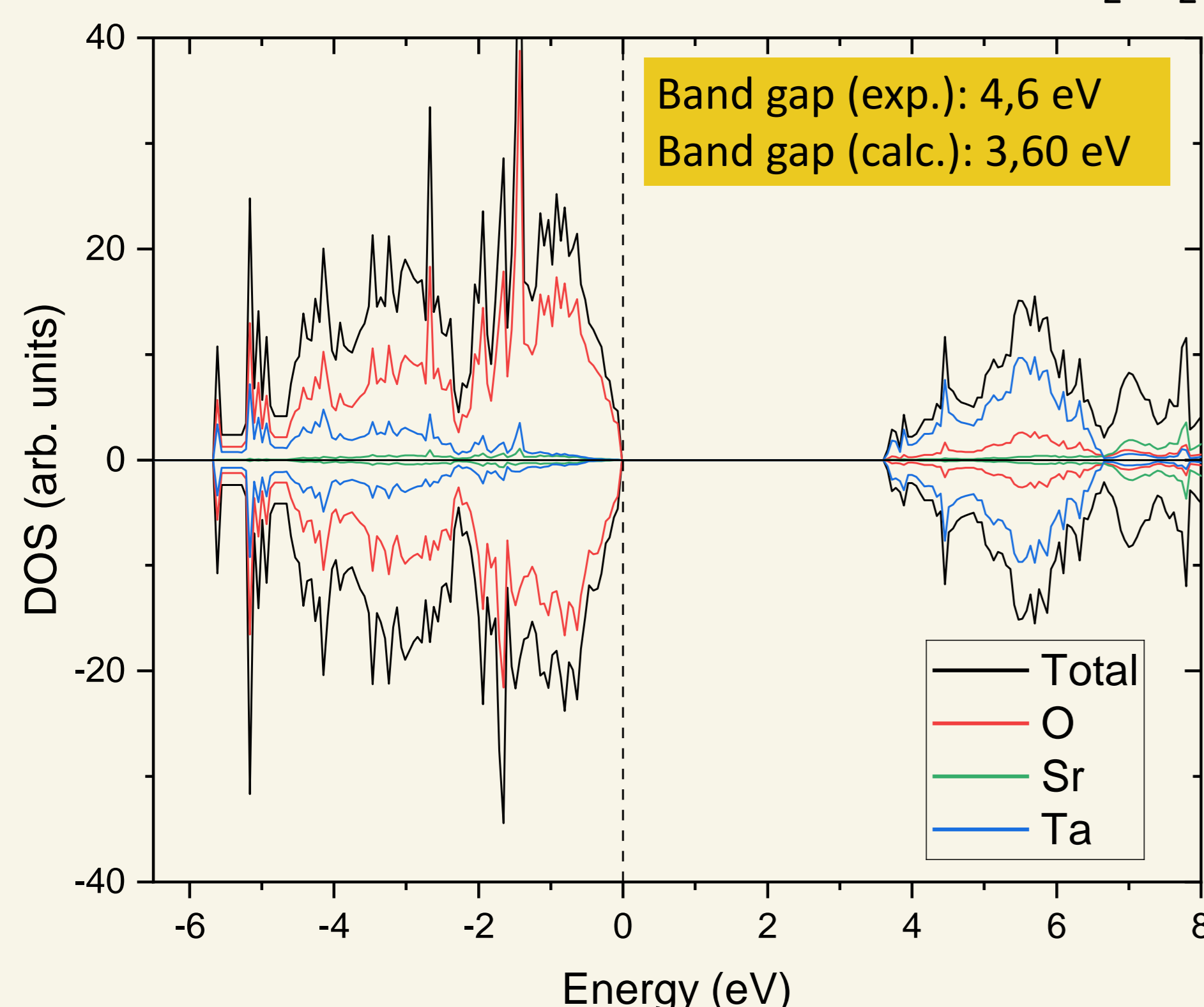
Ba DFT: es más estable el modelo 2

El catión de menor tamaño se coloca de manera preferente en el espacio interlaminar.

Ca DFT: es más estable el modelo 1.

Estructura electrónica

DENSIDAD DE ESTADOS CALCULADA: $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$



BAND GAPS
Fases SrATa_2O_7
A = Ba, Ca

Ba Band gap modelo 2: 3.52 eV

Ca Band gap modelo 1: 3.55 eV

La sustitución de Sr por Ba/Ca tiene sólo un leve impacto en la estructura electrónica

CONCLUSIONES

- Para el fotocatalizador $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ se ha conseguido sustituir parcialmente (25%) el Sr por Ba y Ca manteniendo la estructura de partida.
- Los datos computacionales indican que existe una preferencia del catión de menor tamaño por ocupar la posición interlaminar en la estructura de $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$.
- La sustitución de Sr por Ba o Ca provoca una leve disminución del band gap.
- El comportamiento fotocatalítico de los nuevos materiales está pendiente de estudio

[1] Z. Abdin, A. Zafaranloo, A. Rafiee, W. Mérida, W. Lipiński, and K. R. Khalilpour, *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 120, 2020.

[2] F. E. Osterloh, *Chem. Mater.*, vol. 20, pp. 35–54, 2008.

[3] M. Ishizawa, N. Marumo, F. Kawamura, T. Kimura, *Acta Crystallogr. Sect. B*, no. 14, pp. 2564–2566, 1976

[4] K. Y. Kim, T. H. Eun, S.-S. Lee, and U. Chon, *Resour. Process.*, vol. 56, no. 3, pp. 138–144, 2009.

[5] G. Kresse, J. Futhmüller, *Comput. Mater. Sci.* 6, 15, 1996