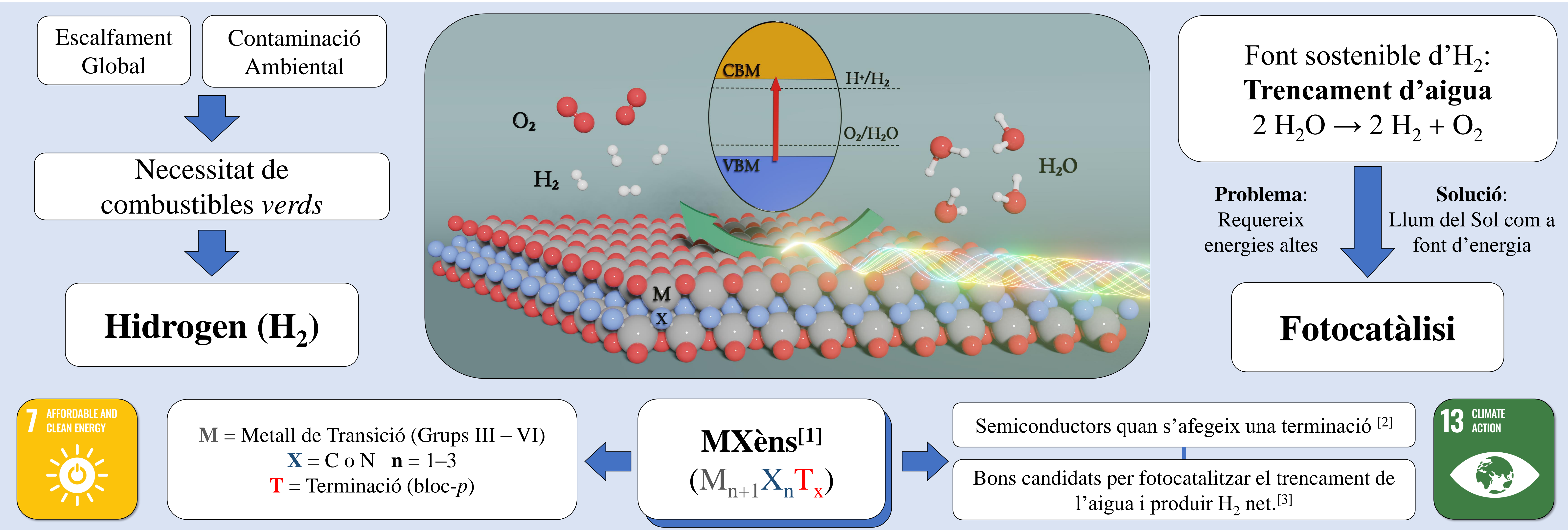


# MXèns com a Fotocatalitzadors del Trencament de l'Aigua

## INTRODUCCIÓ ⓘ



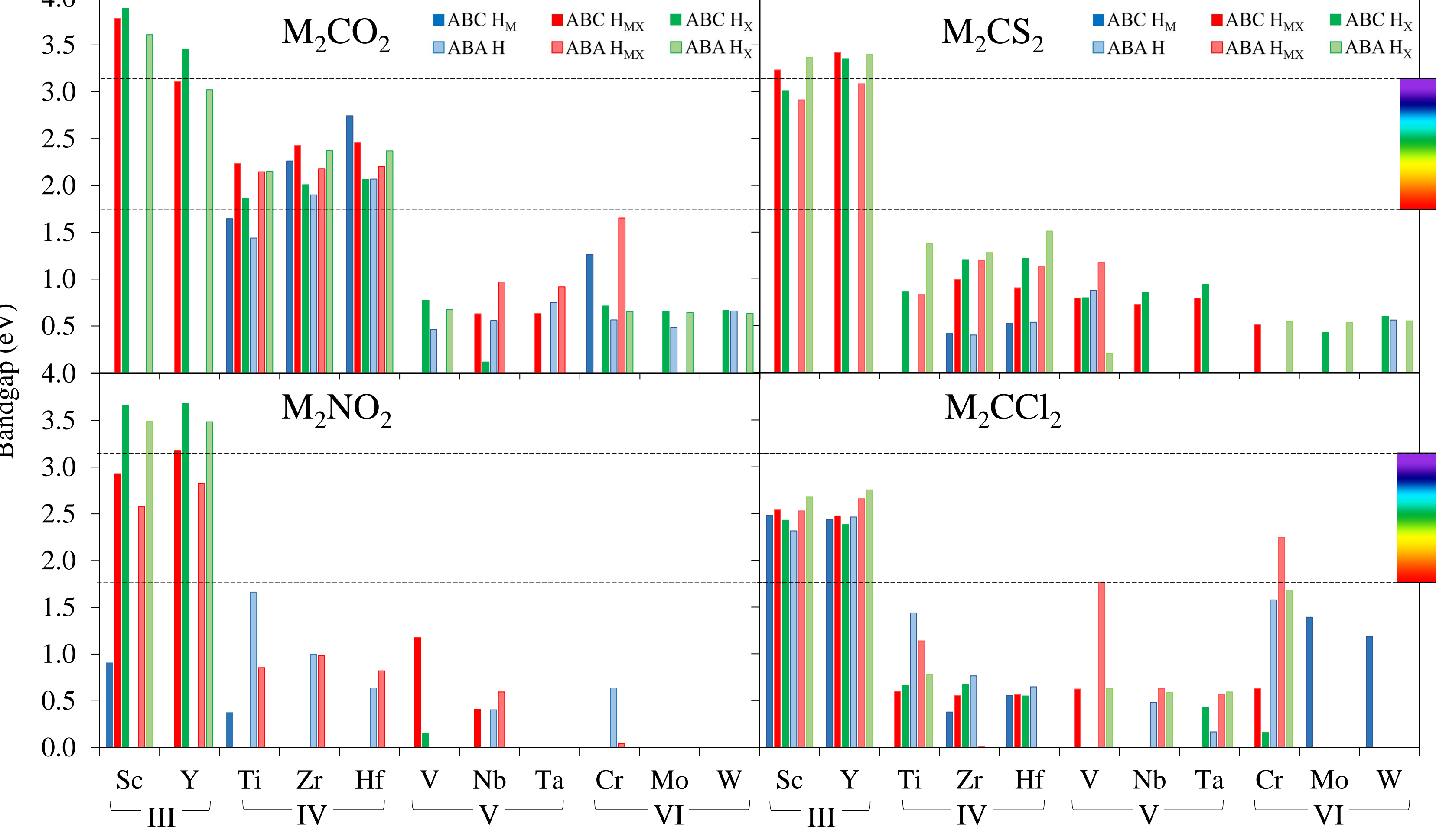
## OBJECTIUS 🔍

Modificar i dissenyar l'espai entre bandes (*bandgap*) dels MXèns variant la seva composició, amplada, apilament i posició de la terminació, per trobar possibles candidats fotoactius en el trencament de l'aigua amb la llum solar.

## ÈINES ⚙️

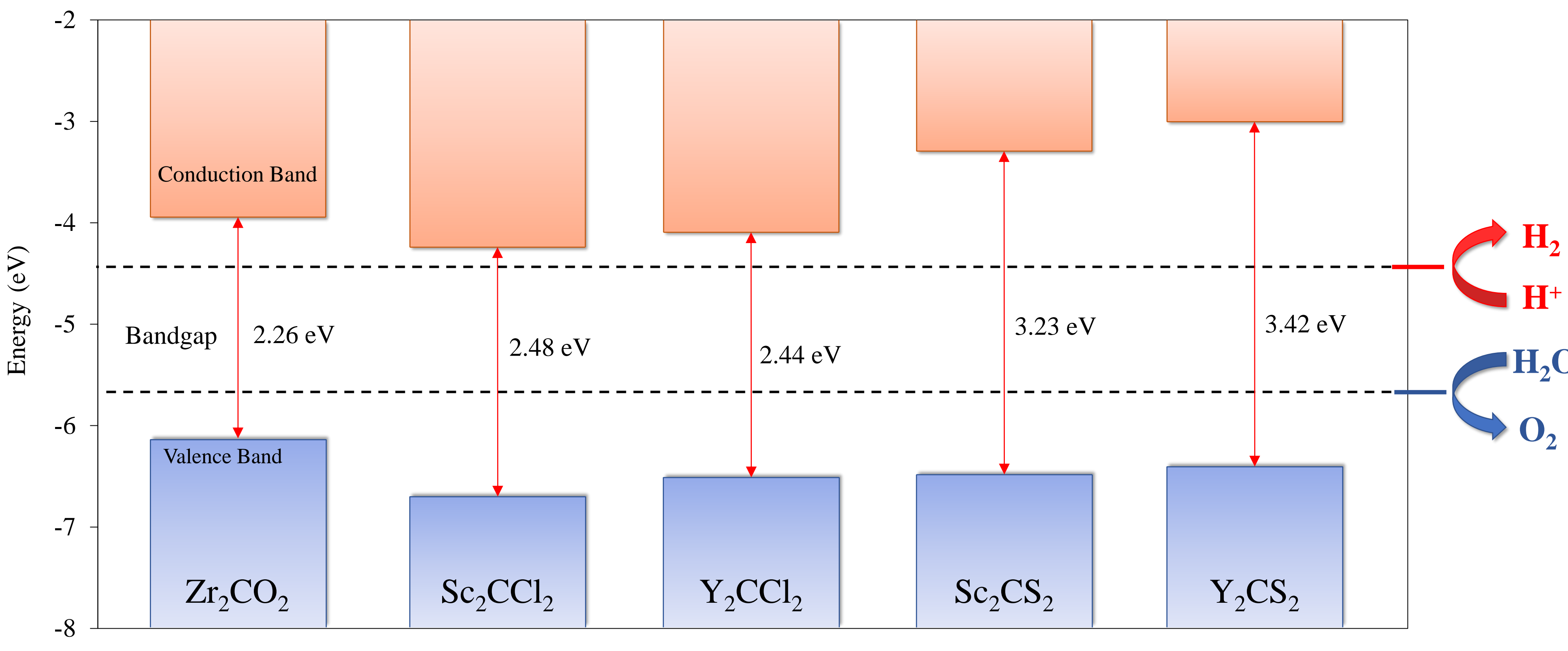
Mètode computacional: DFT    Funcional: PBE i PBE0  
Estructures: models de llesca periòdics, combinant 2 apilaments (ABC i ABA) i 3 posicions terminals per cada apilament (H<sub>M</sub>/H, H<sub>MX</sub> i H<sub>X</sub>)

## RESULTATS 📊



- Es consideren 6 estructures diferents per cada MXè terminat.
- MXèns dels Grups III i IV → bandgaps grans i a la regió del visible.
  - Els casos més prometedors per ser materials fotoactius amb la llum solar.
- C-MXèns → més casos semiconductors i amb major valors que N-MXèns.
- MXèns prístins → propietats metàl·liques (no fotoactius)

- S'ha estudiat l'alineació de bandes respecte als potencials de semireacció pels casos fotoactius més prometedors ( $E_g > 1.23 \text{ eV}$ ).
- Diverses estructures del Grup III i IV mostren alineacions correctes.
- Només els casos de Zr<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>, Sc<sub>2</sub>CCl<sub>2</sub>, Y<sub>2</sub>CCl<sub>2</sub>, Sc<sub>2</sub>CS<sub>2</sub> i Y<sub>2</sub>CS<sub>2</sub> són els que amés presenten l'estructura més estable de les sis.
  - Condicions adequades per la fotocatalisi del trencament de l'aigua.



## CONCLUSIONS ✓

Basat en càlculs DFT, els MXèns de Zr<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>, Sc<sub>2</sub>CCl<sub>2</sub>, Y<sub>2</sub>CCl<sub>2</sub>, Sc<sub>2</sub>CS<sub>2</sub> i Y<sub>2</sub>CS<sub>2</sub> mostren un bandgap en la regió del visible, òptim per la captació d'energia de la llum solar, i extrems de banda que excedeixen els potencials de semireacció del trencament de l'aigua, adient per fotocatalitzar el procés i generar H<sub>2</sub> verd.

## REFERÈNCIES 📖

[1] *Adv. Mater.* 2011, 23, 4248–4253.  
[2] *Adv. Funct. Mater.* 2013, 23, 2185–2192.  
[3] *J. Mater. Chem. A* 2016, 4, 11446–11452.