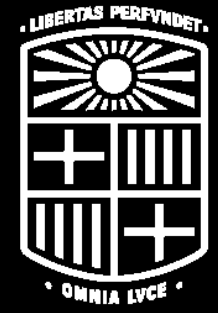


# MXens com a Fotocatalitzadors del Trencament de l'Aigua



UNIVERSITAT DE  
BARCELONA

Diego Ontiveros, Carme Sousa, Francesc Viñes

Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTCUB), Departament de Ciència de Materials i Química Física, Universitat de Barcelona.



Institut de Química Teòrica  
i Computacional  
UNIVERSITAT DE BARCELONA

Escalfament  
Global

Contaminació  
Ambiental

Necessitat de  
combustibles *verds*

Hidrogen (H<sub>2</sub>)



MXens<sup>[1]</sup>

(M<sub>n+1</sub>X<sub>n</sub>T<sub>x</sub>)

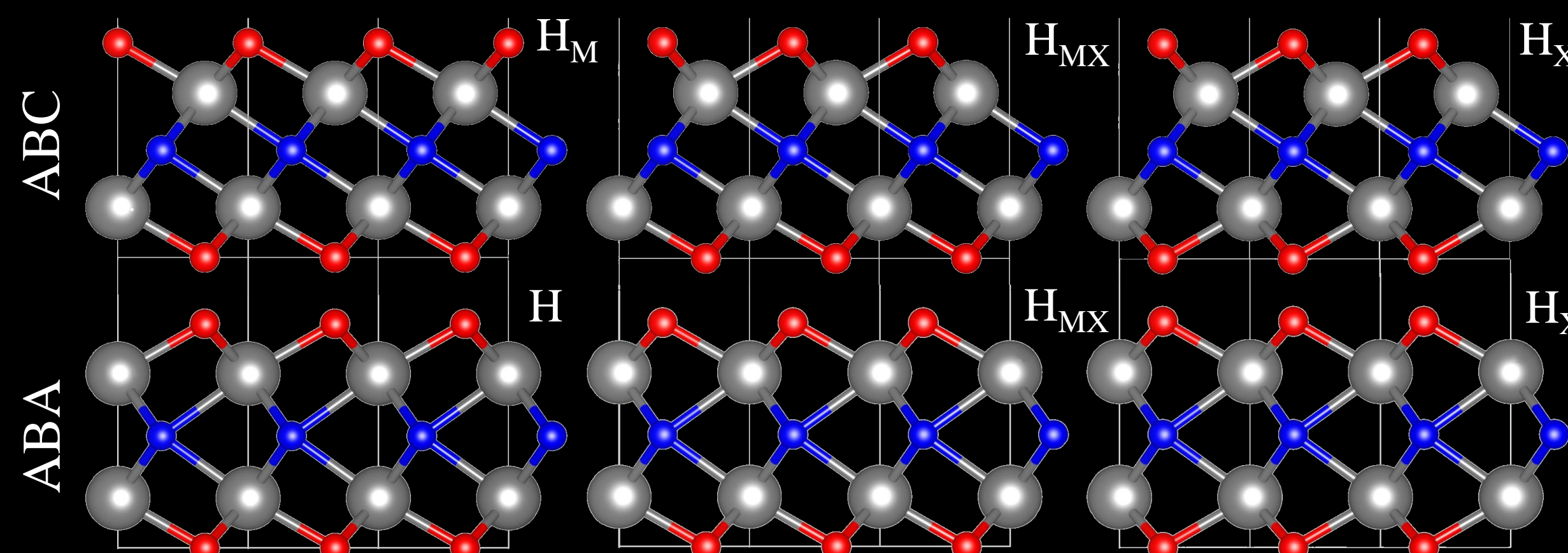
M = Metall de Transició (Grups III – VI)

X = C o N n = 1–3

T = Terminació (bloc-p: O, F, OH, H, S, Cl)

Semiconductors quan s'afegeix una terminació. <sup>[2]</sup>

Bons candidats per fotocatalitzar el trencament de l'aigua i produir H<sub>2</sub> net. <sup>[3]</sup>



Font sostenible d'H<sub>2</sub>:  
**Trencament d'aigua**  
2 H<sub>2</sub>O → 2 H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>

**Problema:**  
Requereix  
energies altes

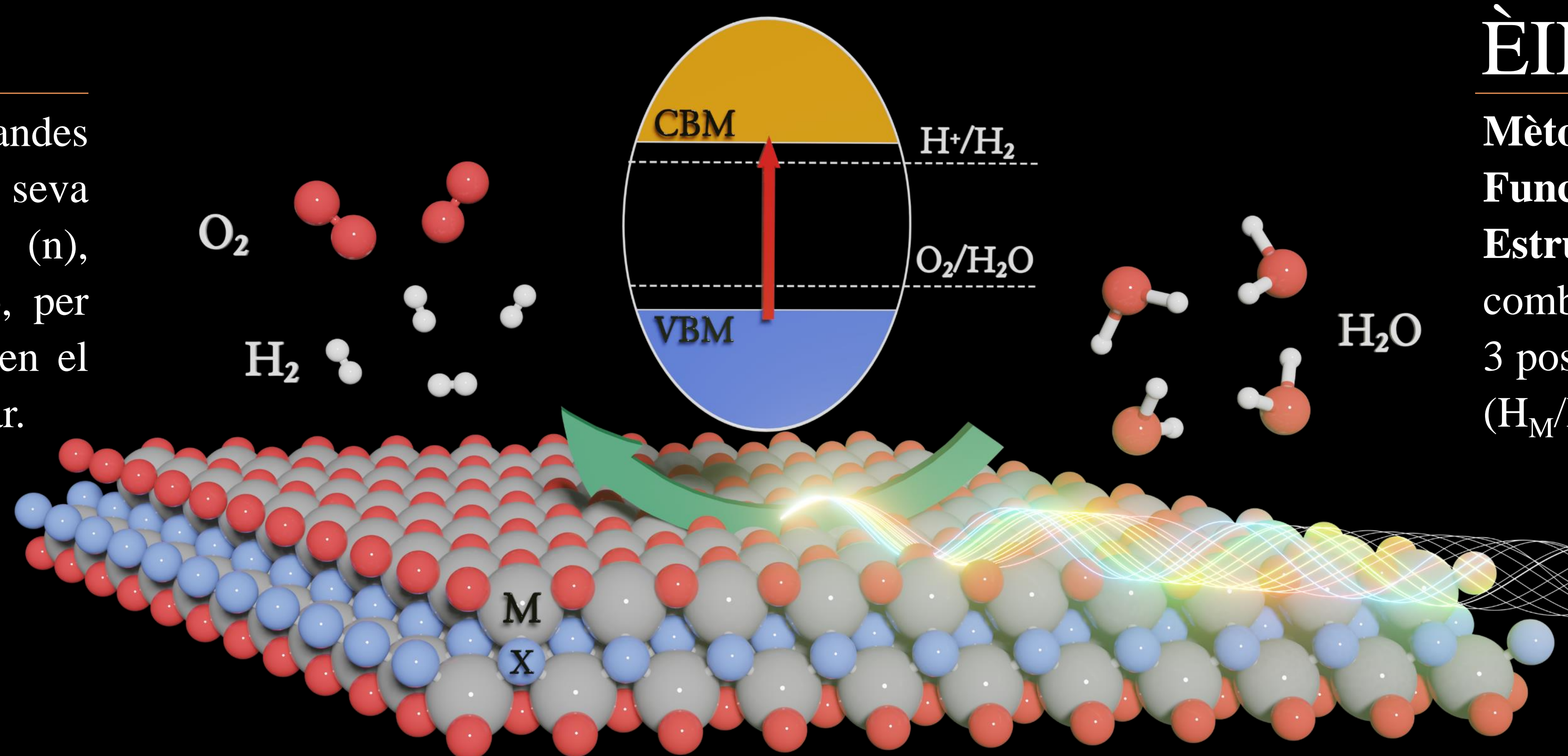
**Solució:**  
Llum del Sol com  
a font d'energia

**Fotocatàlisi**



## OBJECTIUS 🔍

Modificar i dissenyar l'espai entre bandes (*bandgap*) dels MXens variant la seva composició (M, X, T), amplada (n), apilament i posició de la terminació, per trobar possibles candidats fotoactius en el trencament de l'aigua amb la llum solar.



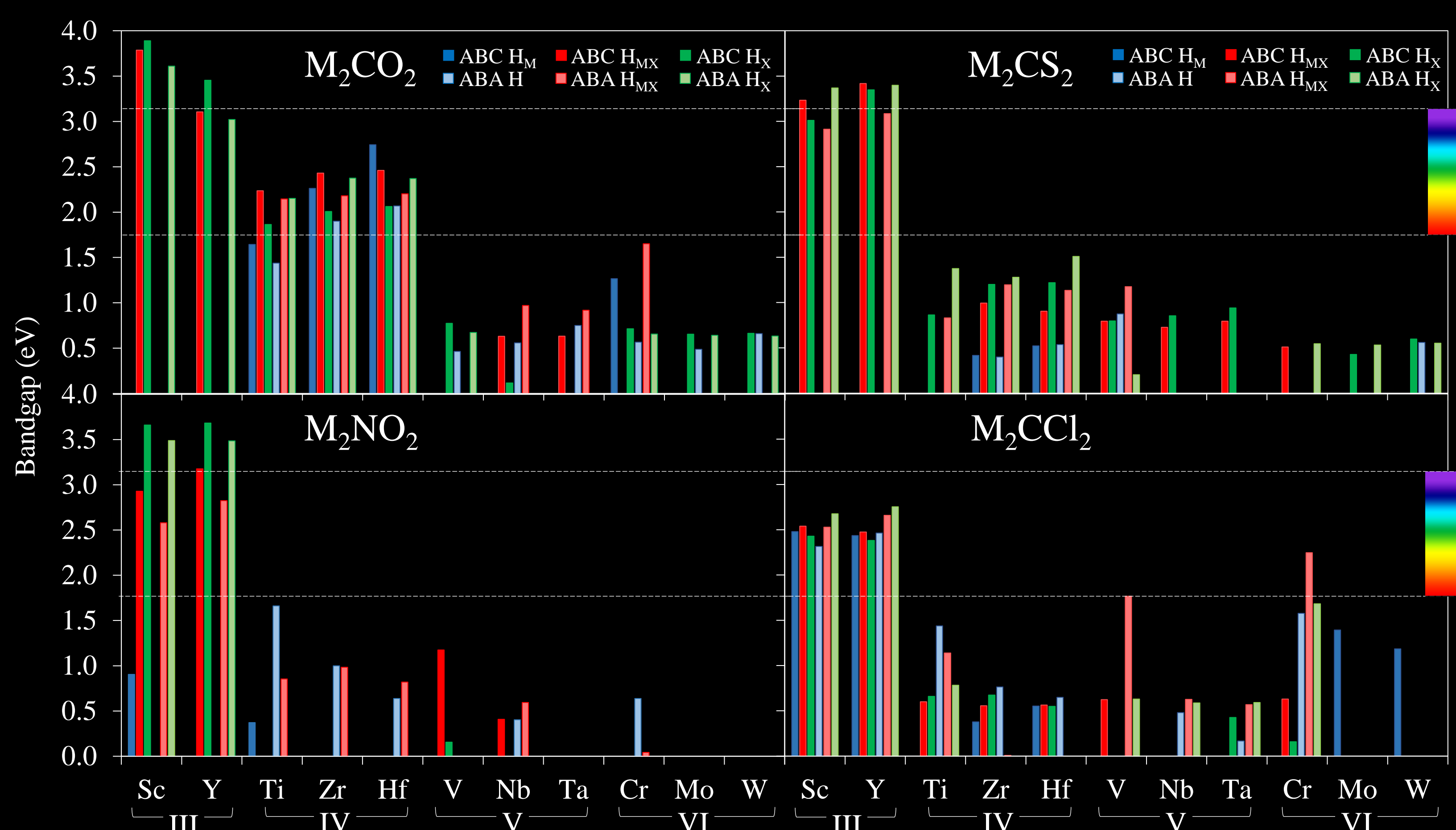
## ÈINES ⚙️

**Mètode computacional:** DFT

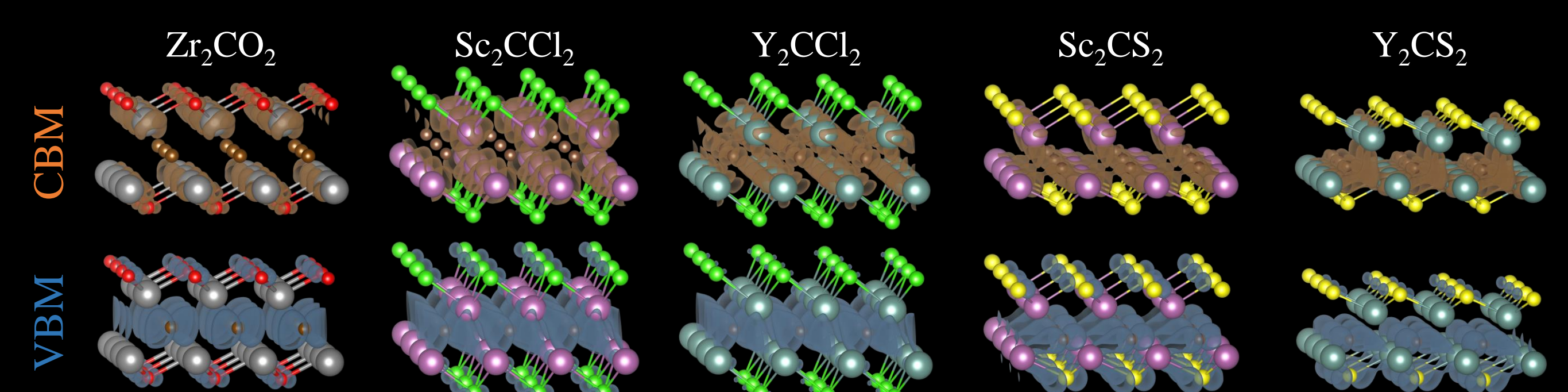
**Funcional:** PBE i PBE0

**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>)

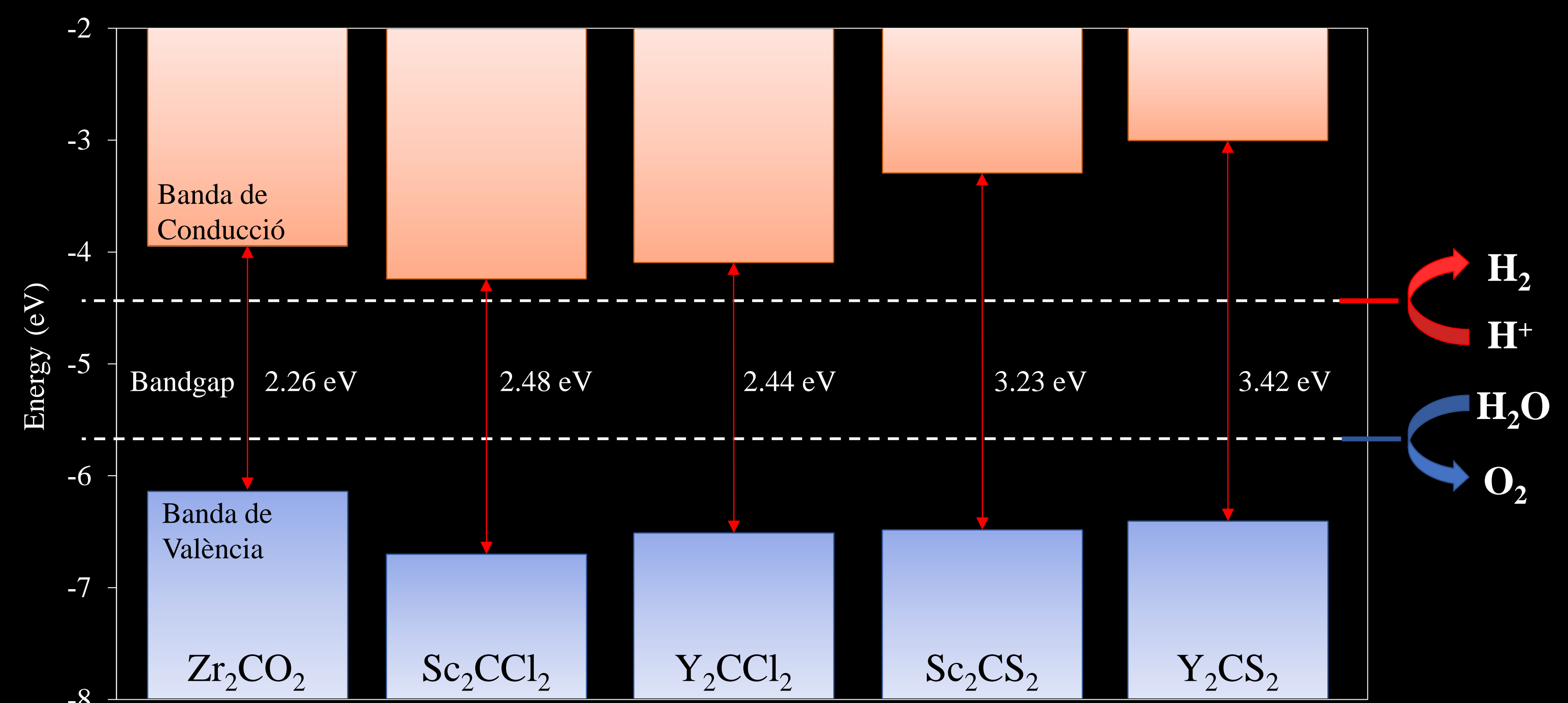
## Densitat d'Estats 📊



- Es consideren 6 estructures diferents per cada MXè terminat (2376 en total).
- MXens dels Grups III i IV i n = 1 → bandgaps grans i a la regió del visible.
  - Els casos més prometedors per ser materials fotoactius amb la llum solar.
- C-MXens → més casos semiconductors i amb major bandgap que N-MXens.
- MXens prístins → propietats metàl·liques (no fotoactius)
- MXens n ≥ 2 → Al augmentar la quantitat de “bulk”, solen ser metàl·lics.



## ⚡ Alineació de Bandes



## CONCLUSIONS ✓

Basat en càlculs DFT, els MXens 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.

