

MXens com a Fotocatalitzadors del Trencament de l'Aigua



UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química

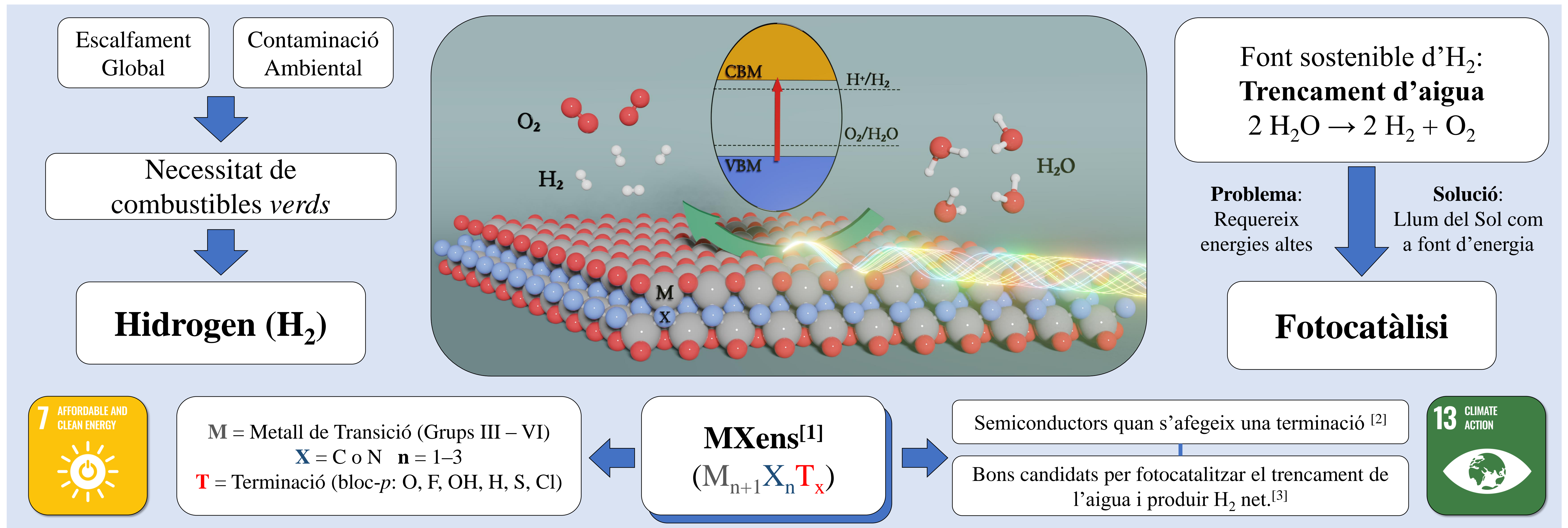
Diego Ontiveros, Carme Sousa, Francesc Viñes

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

INTRODUCCIÓ ⓘ



OBJECTIUS 🔍

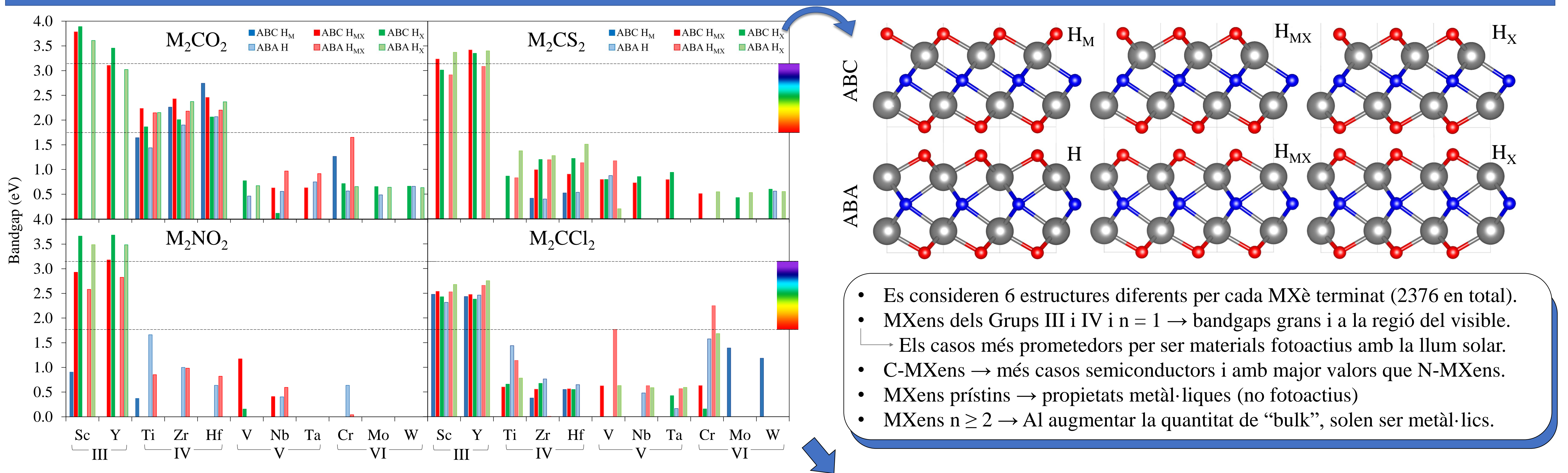
Modificar i dissenyar l'espai entre bandes (*bandgap*) dels MXens variant la seva composició, amplada, apilament i posició de la terminació, per trobar possibles candidats fotoactius en el trencament de l'aigua amb la llum solar.

ÈINES ⚙️

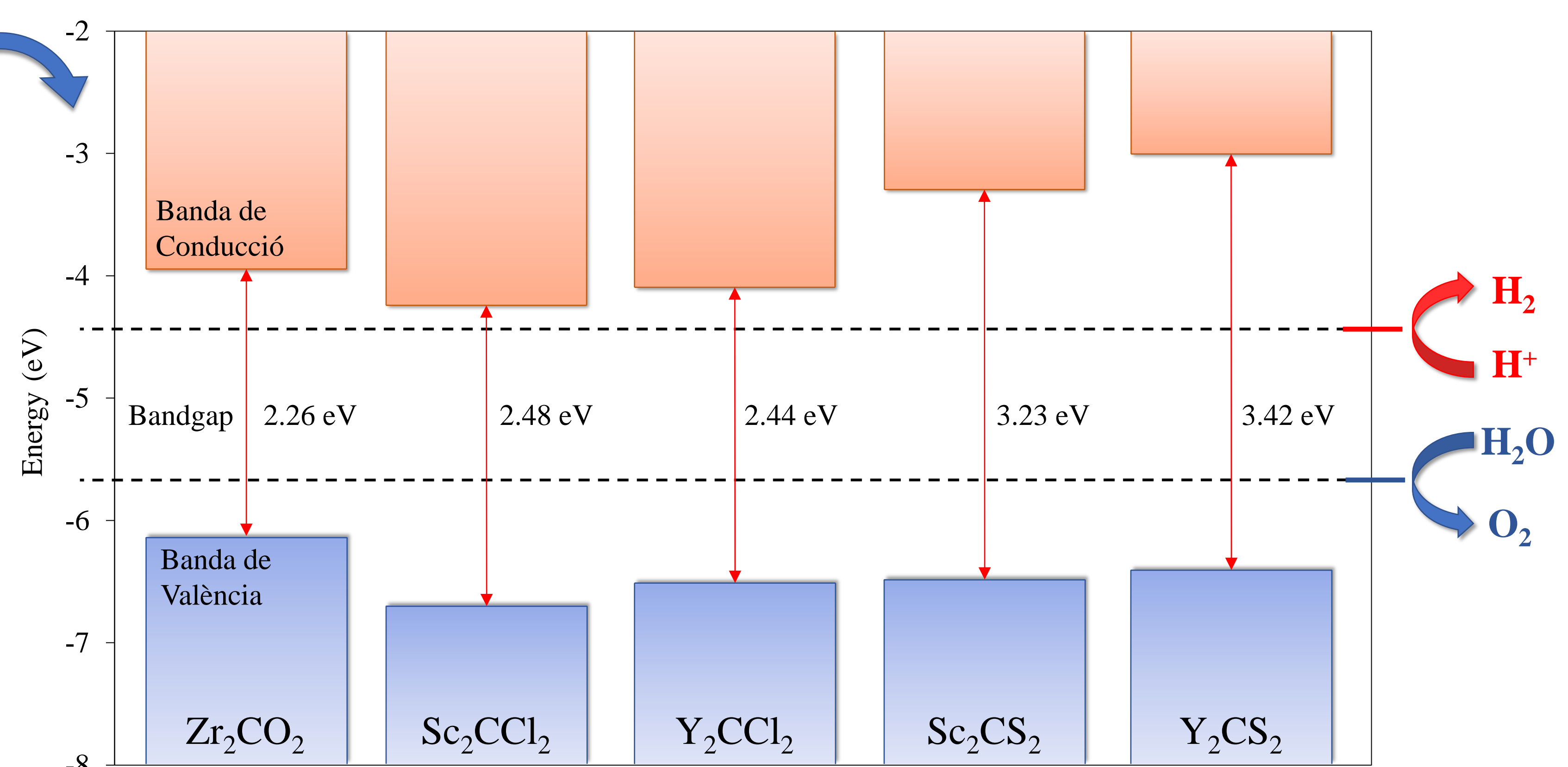
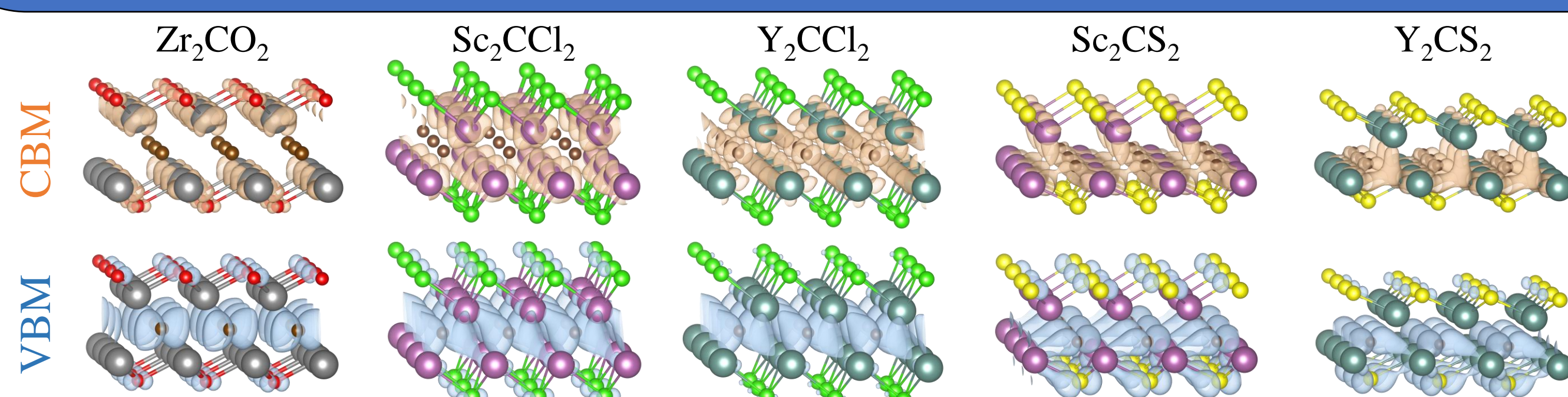
Mètode computacional: DFT Funcional: PBE i PBE0

Estructures: models de llesca periòdics, combinant 2 apilaments (ABC i ABA) i 3 posicions terminals per cada apilament (H_M/H, H_{MX} i H_X)

RESULTATS 📊



- S'ha estudiat l'alineació de bandes respecte als potencials de semireacció pels casos fotoactius més prometedors ($E_g > 1.23 \text{ eV}$).
- Els casos ideals són aquells que a més de tenir una alineació de bandes adequada, són l'estructura més estable de les sis considerades.
- Diverses estructures del Grup III i IV mostren alineacions correctes.
- Els casos de Zr₂CO₂, Sc₂CCl₂, Y₂CCl₂, Sc₂CS₂ i Y₂CS₂ compleixen aquestes condicions ideals, el que ens permet proposar-los com a possibles candidats pel trencament fotocatalític de l'aigua.
- A més, la majoria de casos presenten una bona separació de densitat de càrrega entre el màxim i el mínim de la banda de valència i conducció (VBM i CBM).

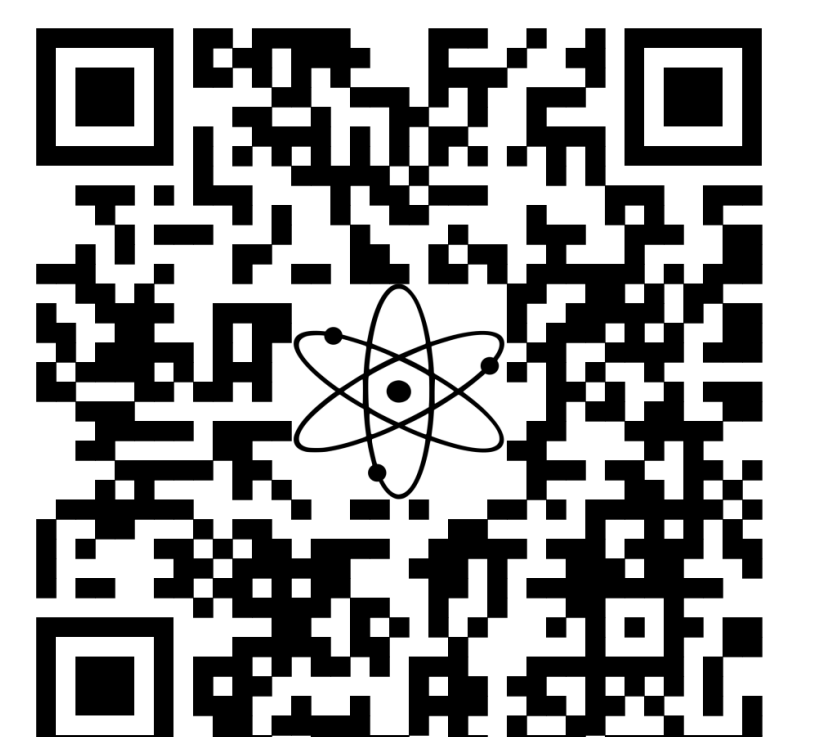


CONCLUSIONS ✓

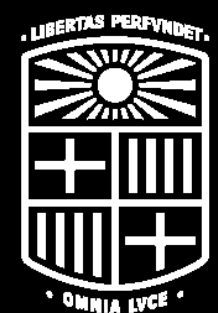
Basat en càlculs DFT, els MXens de Zr₂CO₂, Sc₂CCl₂, Y₂CCl₂, Sc₂CS₂ i Y₂CS₂ mostren un bandgap en la regió del visible, òptim per la captació d'energia de la llum solar, i extrems de banda que excedeixen els potencials de semireacció del trencament de l'aigua, adient per fotocatalitzar el procés i generar H₂ 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.



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

INTRODUCCIÓ ⓘ

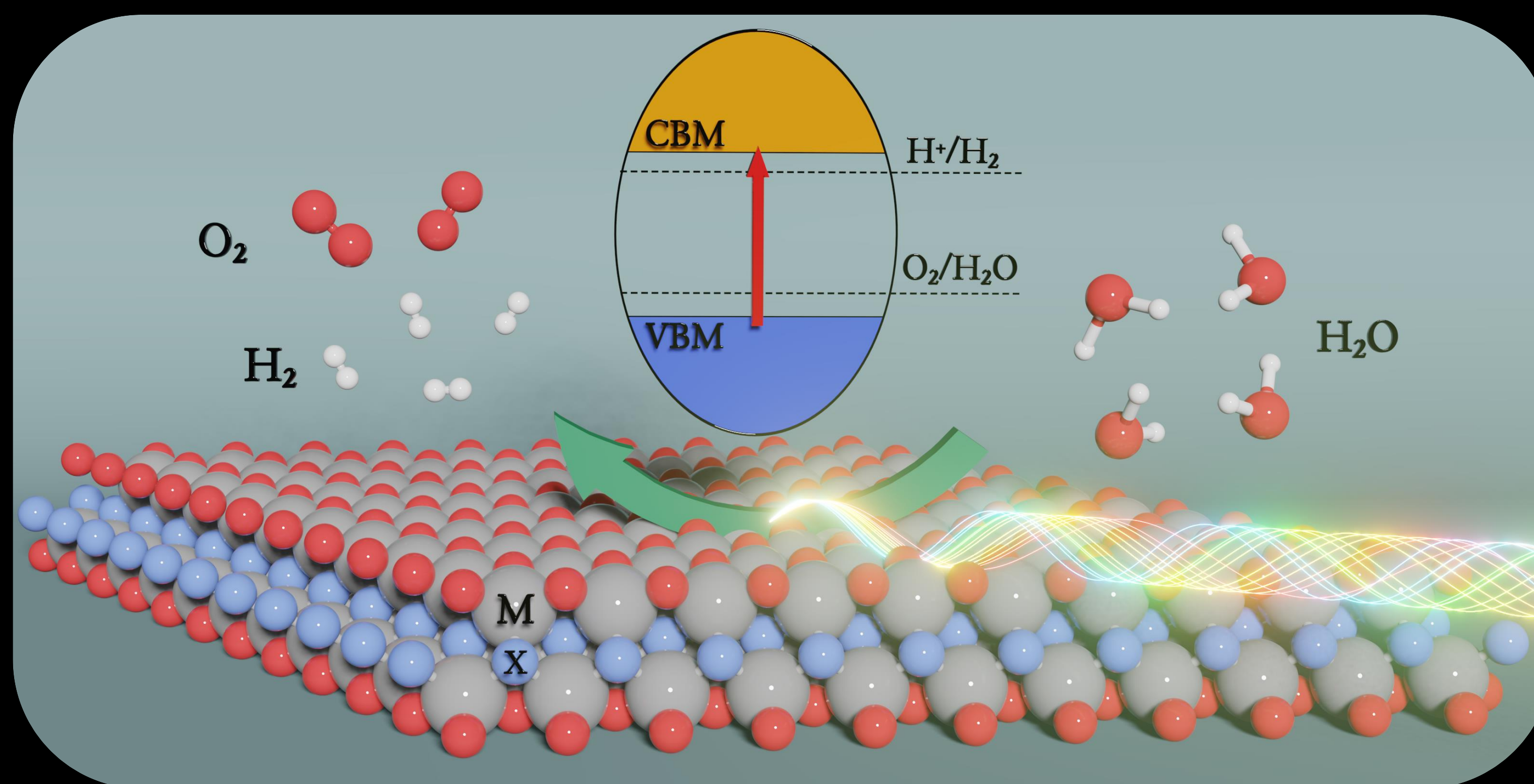
Escalfament Global
Contaminació Ambiental



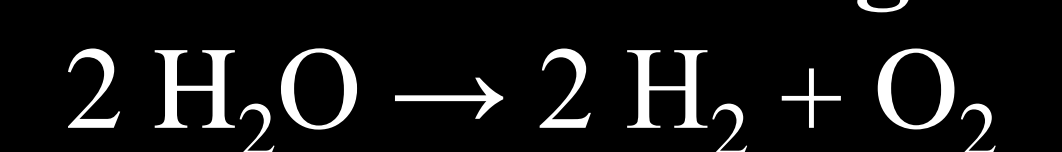
Necessitat de
combustibles *verds*



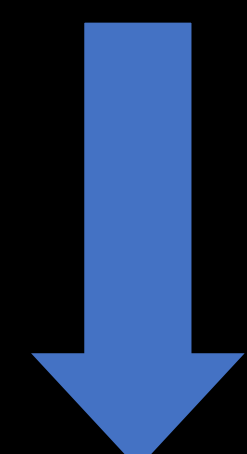
Hidrogen (H₂)



Font sostenible d'H₂:
Trencament d'aigua



Problema:
Requereix
energies altes



Solució:
Llum del Sol com
a font d'energia

Fotocatàlisi



M = Metall de Transició (Grups III – VI)
X = C o N **n** = 1–3
T = Terminació (bloc-*p*: O, F, OH, H, S, Cl)

MXens^[1]
(M_{n+1}X_nT_x)

Semiconductors quan s'afegeix una terminació ^[2]
Bons candidats per fotocatalitzar el trencament de
l'aigua i produir H₂ net.^[3]



OBJECTIUS 🔍

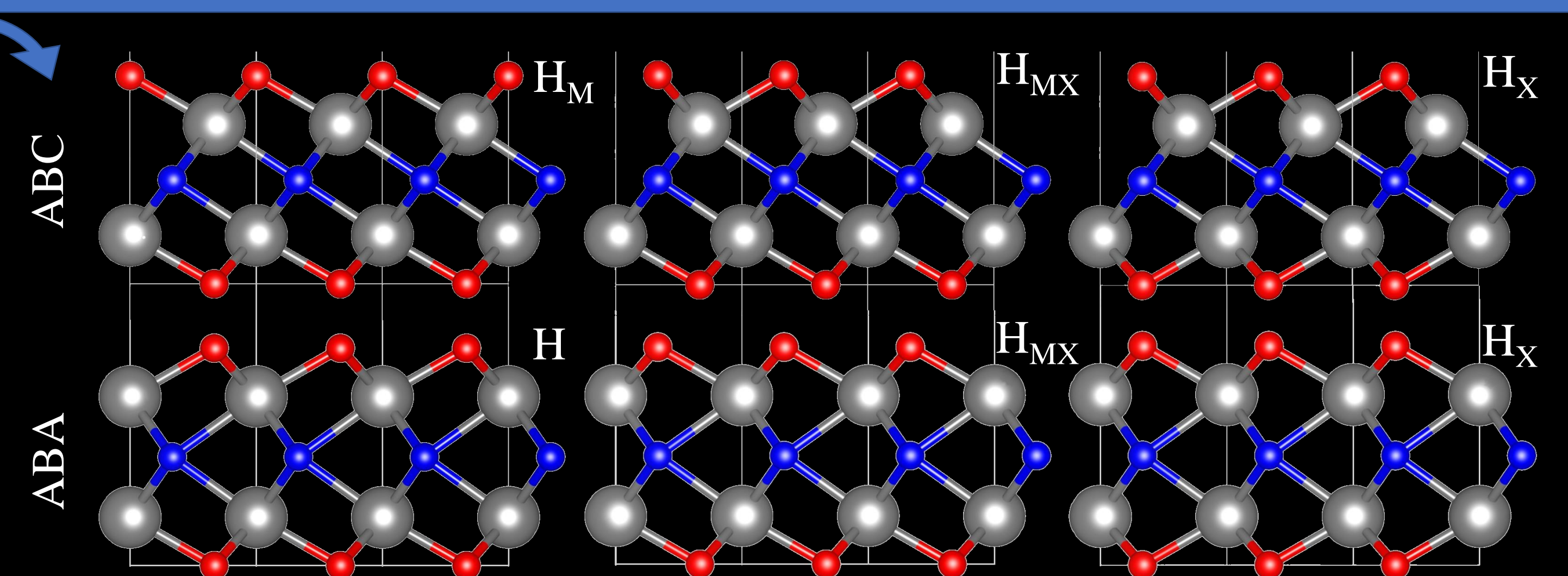
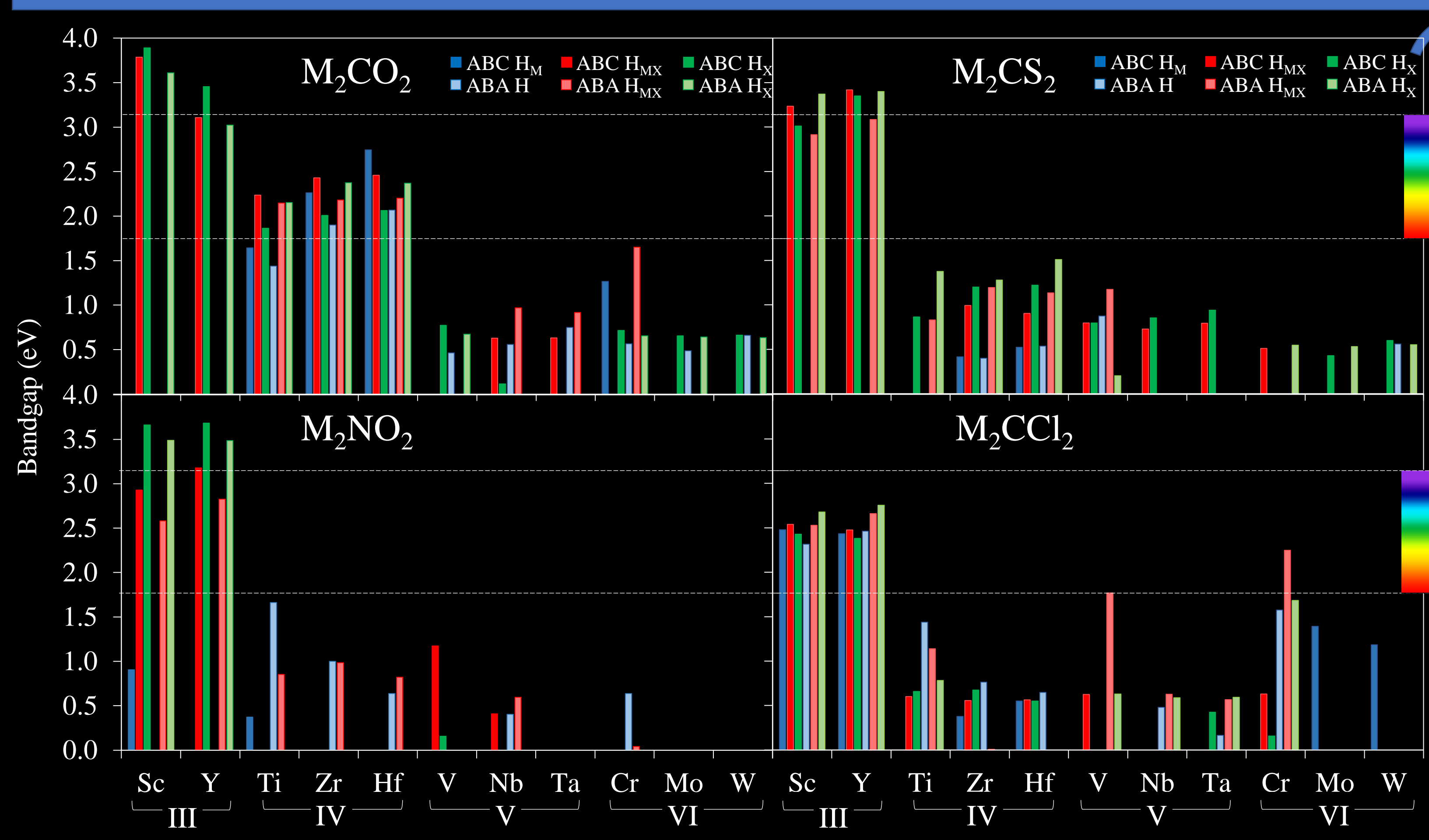
Modificar i dissenyar l'espai entre bandes (*bandgap*) dels MXens variant la seva composició, amplada, apilament i posició de la terminació, per trobar possibles candidats fotoactius en el trencament de l'aigua amb la llum solar.

ÈINES ⚙️

Mètode computacional: DFT Funcional: PBE i PBE0

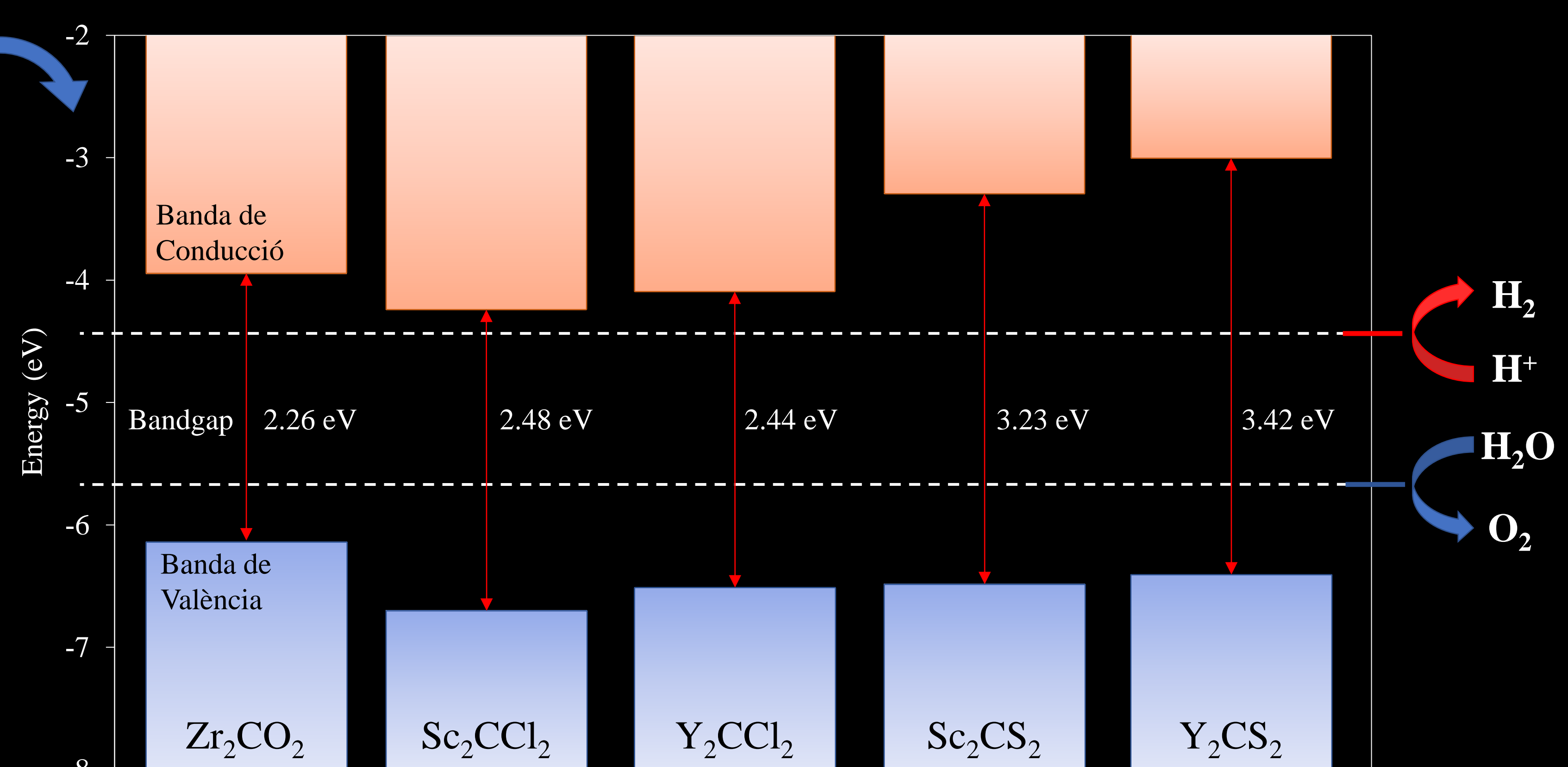
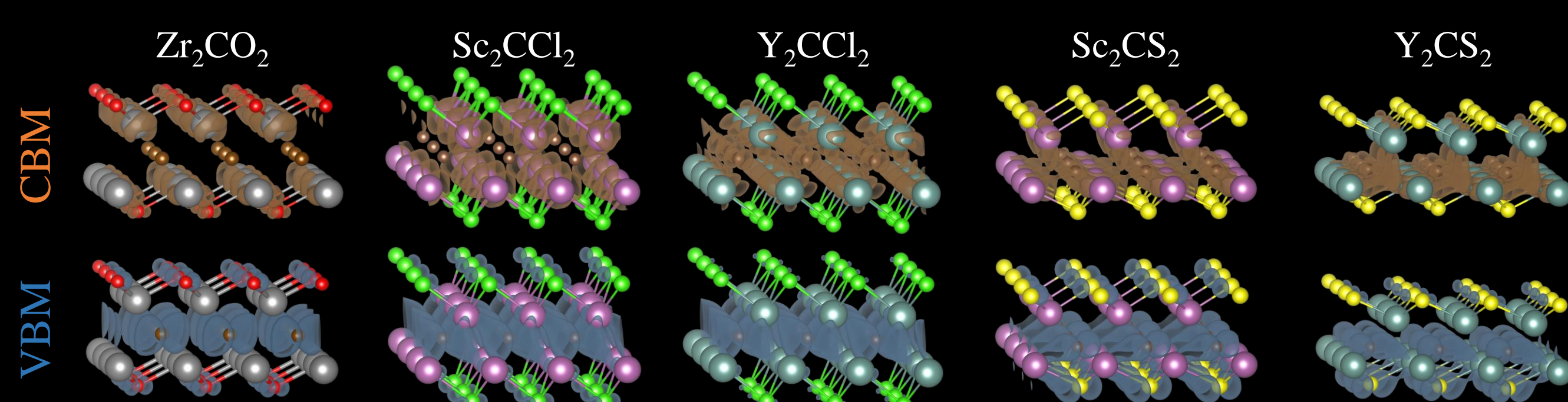
Estructures: models de llesca periòdics, combinant 2 apilaments (ABC i ABA) i 3 posicions terminals per cada apilament (H_M/H, H_{MX} i H_X)

RESULTATS 📊



- 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 valors que N-MXens.
- MXens prístins → propietats metàl·liques (no fotoactius)
- MXens n ≥ 2 → Al augmentar la quantitat de “bulk”, solen ser metàl·lics.

- S'ha estudiat l'alineació de bandes respecte als potencials de semireacció pels casos fotoactius més prometedors ($E_g > 1.23$ eV).
- Els casos ideals són aquells que a més de tenir una alineació de bandes adequada, són l'estructura més estable de les sis considerades.
- Diverses estructures del Grup III i IV mostren alineacions correctes.
- Els casos de Zr₂CO₂, Sc₂CCl₂, Y₂CCl₂, Sc₂CS₂ i Y₂CS₂ compleixen aquestes condicions ideals, el que ens permet proposar-los com a possibles candidats pel trencament fotocatalític de l'aigua.
- A més, la majoria de casos presenten una bona separació de densitat de càrrega entre el màxim i el mínim de la banda de valència i conducció (VBM i CBM).

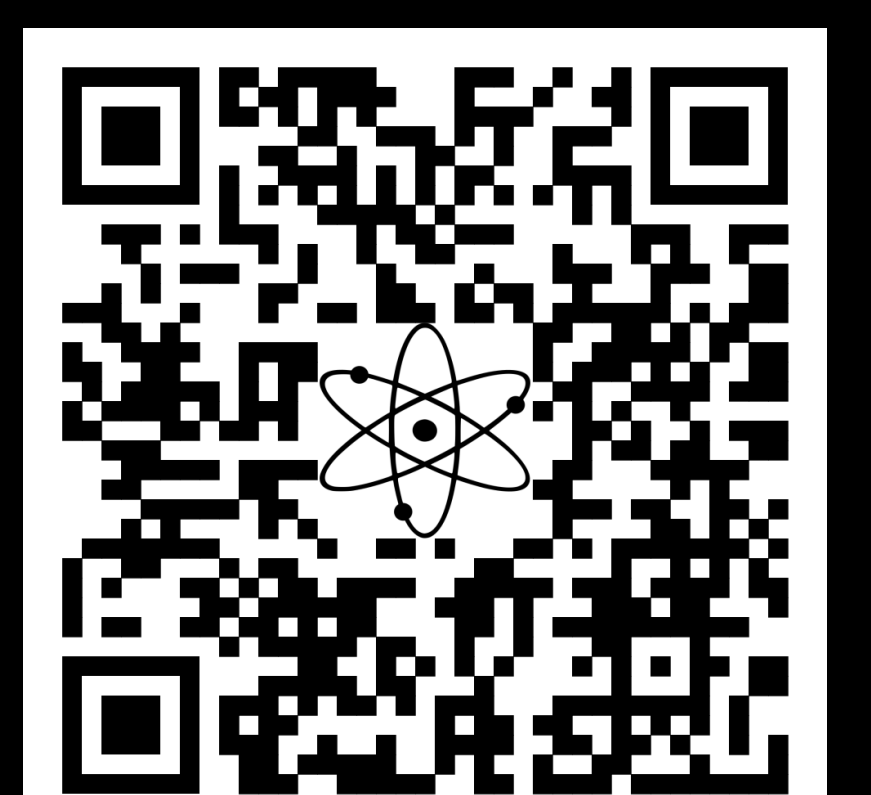


CONCLUSIONS ✓

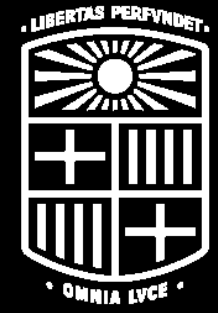
Basat en càlculs DFT, els MXens de Zr₂CO₂, Sc₂CCl₂, Y₂CCl₂, Sc₂CS₂ i Y₂CS₂ mostren un bandgap en la regió del visible, òptim per la captació d'energia de la llum solar, i extrems de banda que excedeixen els potencials de semireacció del trencament de l'aigua, adient per fotocatalitzar el procés i generar H₂ 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.



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 (H₂)



MXens^[1]

(M_{n+1}X_nT_x)

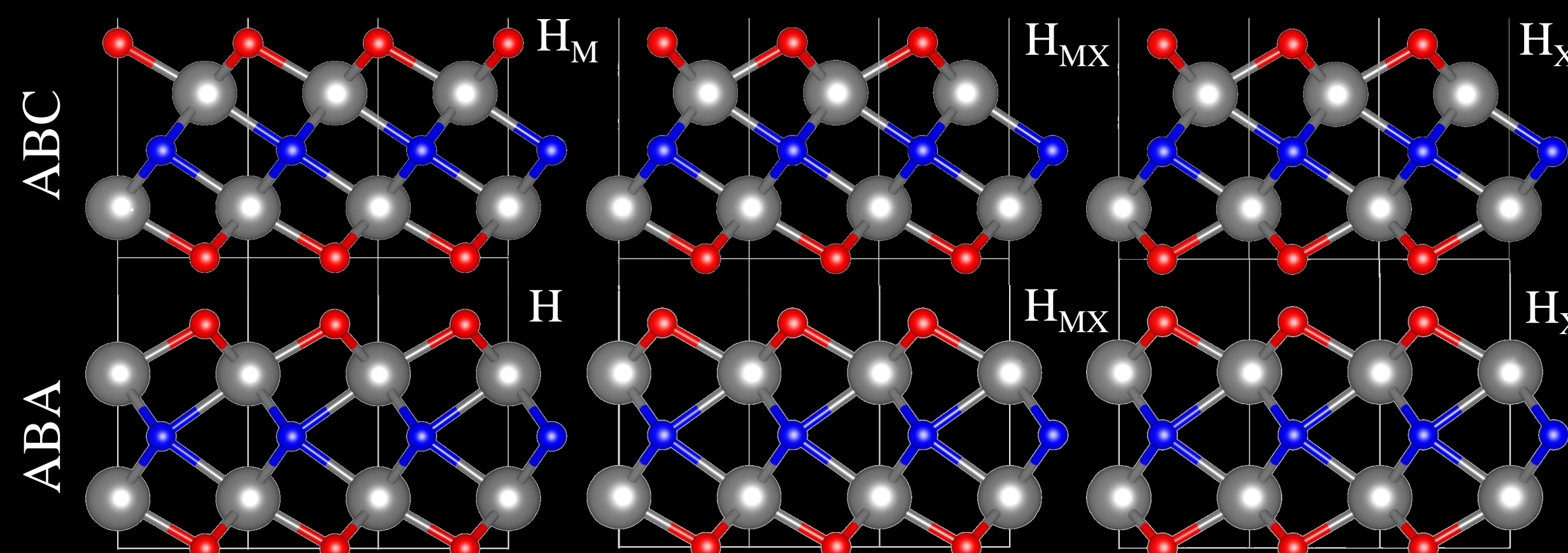
M = Metall de Transició (Grups III – VI)

X = C o N n = 1–3

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

Semiconductors quan s'afegeix una terminació. ^[2]

Bons candidats per fotocatalitzar el trencament de l'aigua i produir H₂ net. ^[3]



Font sostenible d'H₂:
Trencament d'aigua
2 H₂O → 2 H₂ + O₂

Problema:
Requereix
energies altes

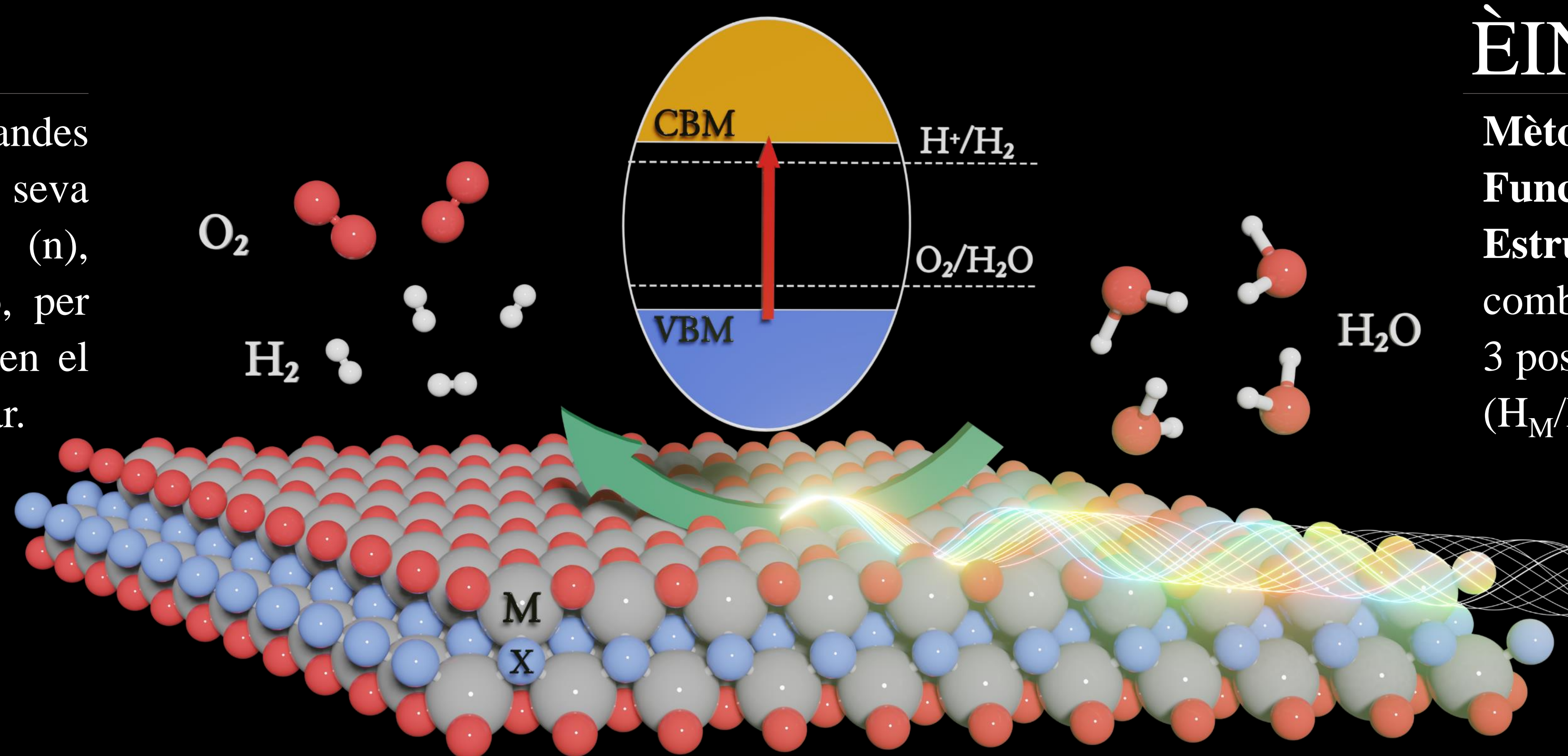
Solució:
Llum del Sol com
a font d'energia

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.



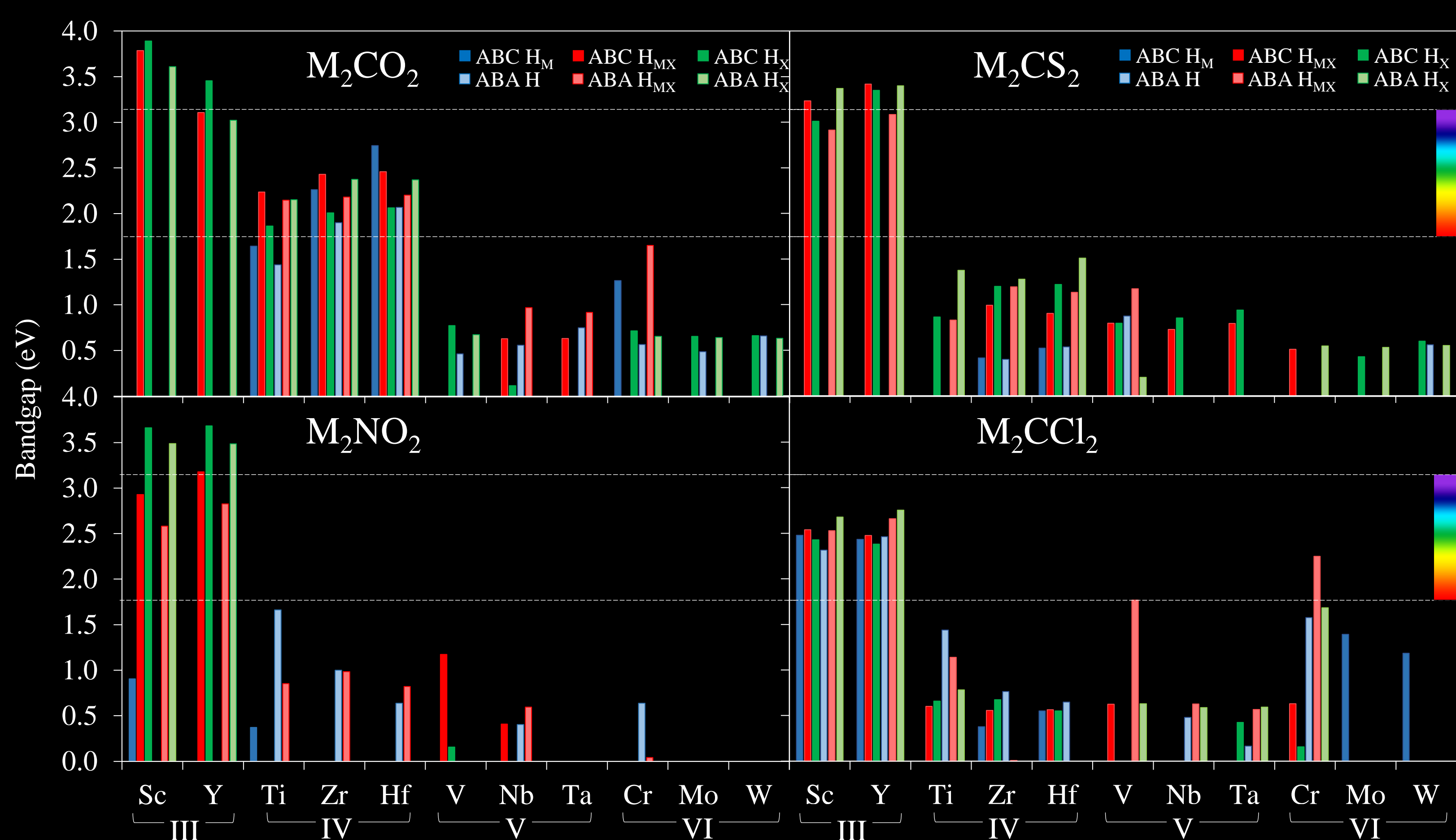
ÈINES ⚙️

Mètode computacional: DFT

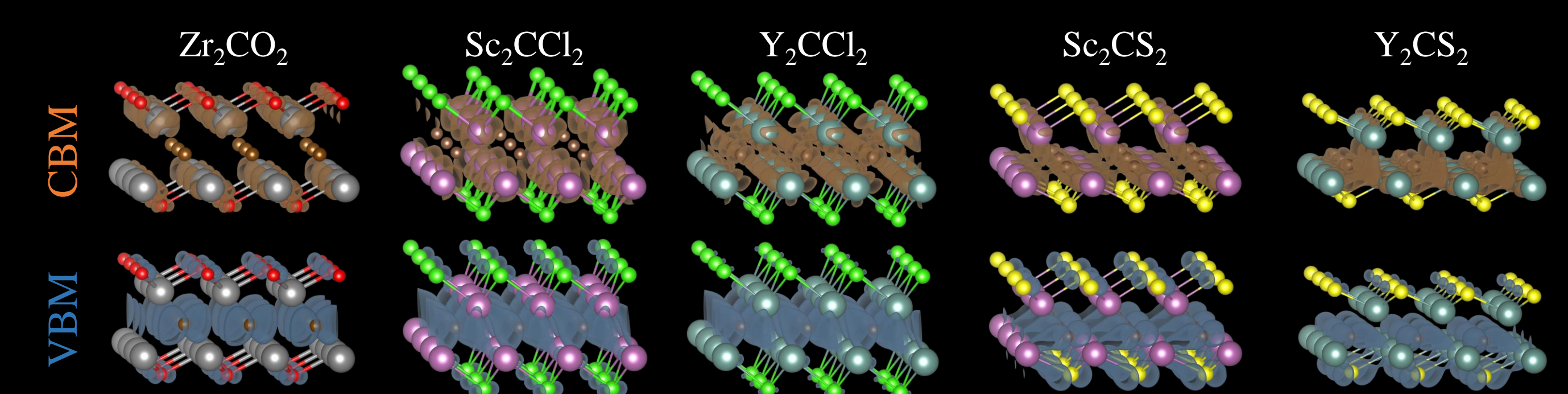
Funcional: PBE i PBE0

Estructures: models de llesca periòdics, combinant 2 apilaments (ABC i ABA) i 3 posicions terminals per cada apilament (H_M/H, H_{MX} i H_X)

Densitat d'Estats 📊

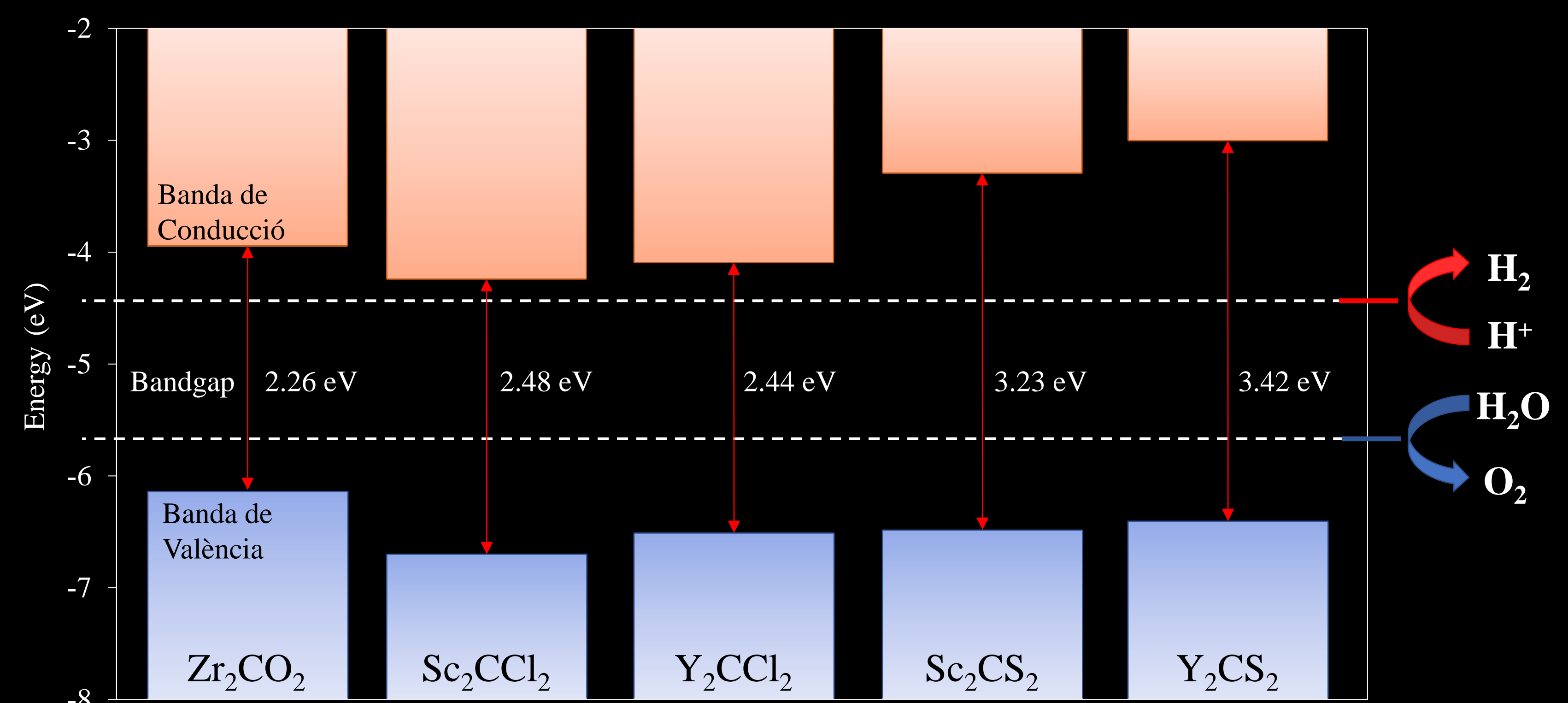


- Es consideren 6 estructures diferents per cada MXè terminat (2376 en total).
- MXens dels Grups III i IV i n = 1 → bandgaps grans i a la regió del visible.
 - Els casos més prometedors per ser materials fotoactius amb la llum solar.
- C-MXens → més casos semiconductors i amb major bandgap que N-MXens.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



⚡ Alineació de Bandes

- S'ha estudiat l'alineació de bandes respecte als potencials de semireacció pels casos fotoactius més prometedors ($E_g > 1.23$ eV).
- Els casos ideals seran aquells que amés de tenir una alineació de bandes adequada, son l'estructura més estable de les sis considerades.
- Diverses estructures del Grup III i IV mostren alineacions correctes.
- Els casos de Zr₂CO₂, Sc₂CCl₂, Y₂CCl₂, Sc₂CS₂ i Y₂CS₂ compleixen aquestes condicions ideals, el que ens permet proposar-los com a possibles candidats pel trencament fotocatalític de l'aigua.
- A més, la majoria de casos presenten una bona separació de densitat de càrrega entre el màxim i el mínim de la banda de valència i conducció (VBM i CBM).



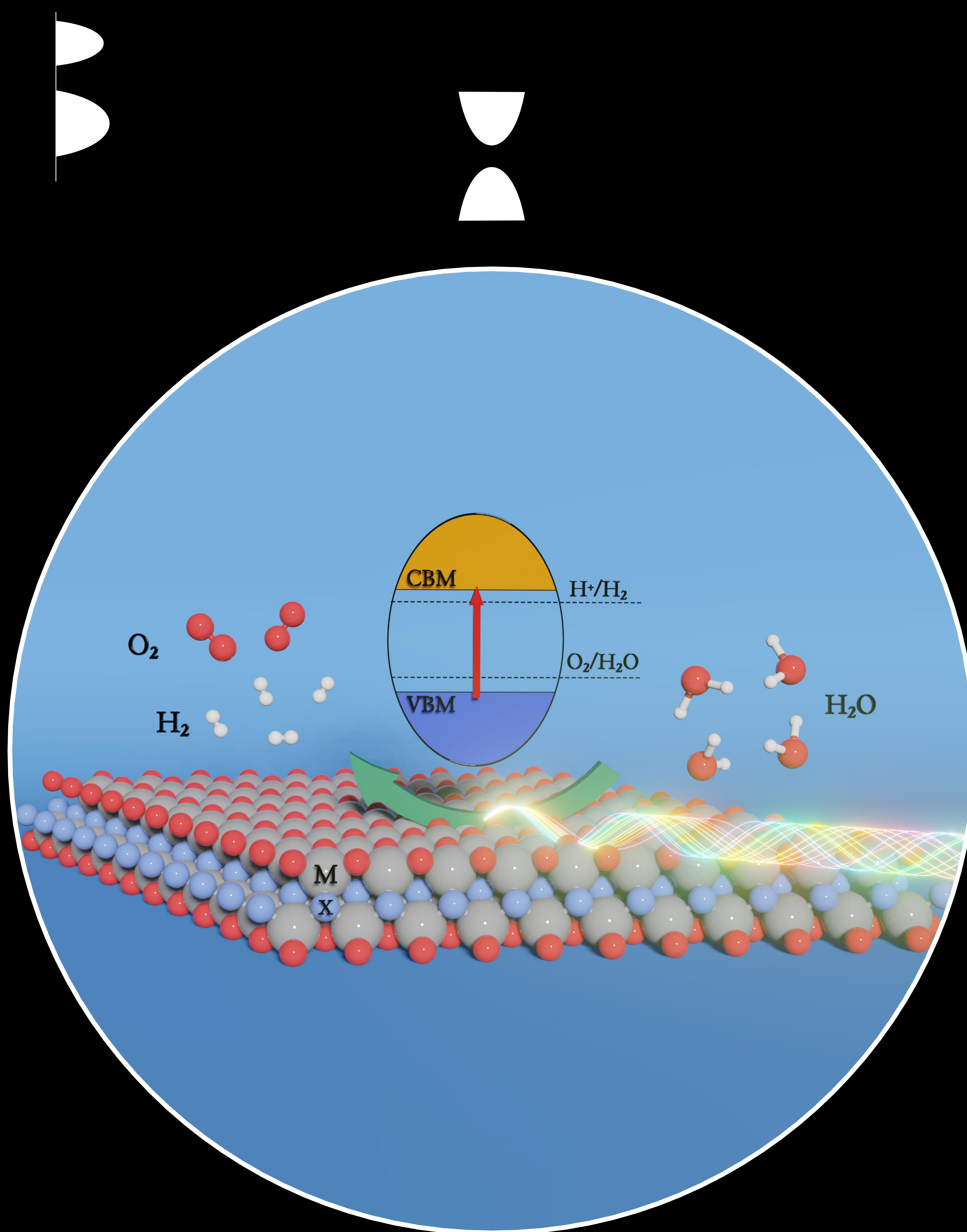
CONCLUSIONS ✓

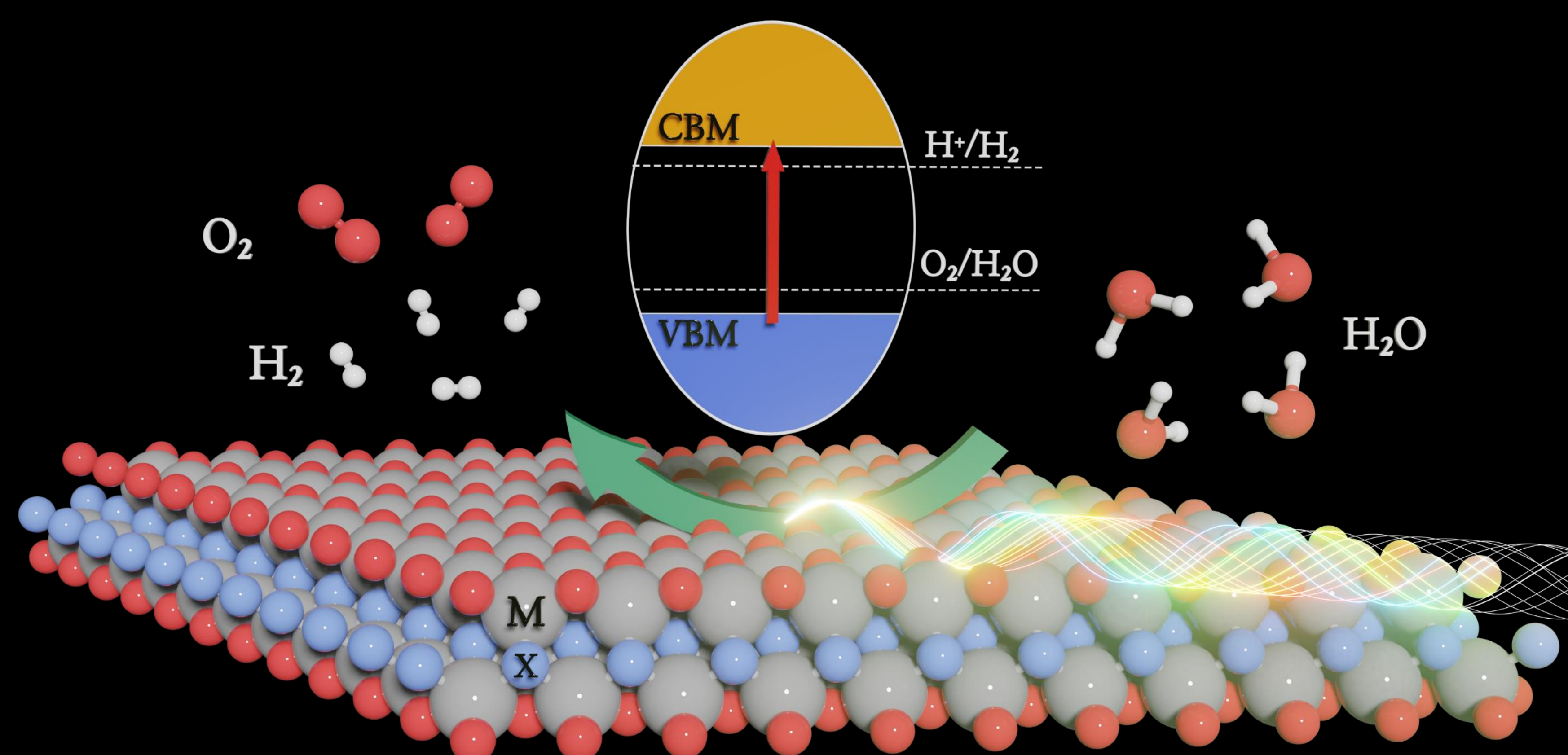
Basat en càlculs DFT, els MXens de Zr₂CO₂, Sc₂CCl₂, Y₂CCl₂, Sc₂CS₂ i Y₂CS₂ mostren un bandgap en la regió del visible, òptim per la captació d'energia de la llum solar, i extrems de banda que excedeixen els potencials de semireacció del trencament de l'aigua, adient per fotocatalitzar el procés i generar H₂ 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.







ABC H_M ABC H_{MX} ABC H_X
ABA H ABA H_{MX} ABA H_X

ABC H_M ABC H_{MX} ABC H_X
ABA H ABA H_{MX} ABA H_X
ABC H_M ABC H_{MX} ABC H_X
ABA H ABA H_{MX} ABA H_X

