



## Generando hidrógeno con agua y luz: Trisulfuros ternarios bidimensionales en celdas fotoelectroquímicas

*lunes, 17 de julio de 2017 18:45 (30)*

Desde 1972 cuando Fujishima y Honda[1] demostraron que la ruptura de la molécula de agua con luz y  $\text{TiO}_2$  como fotoánodo era posible, el interés por investigar compuestos capaces de generar de hidrógeno mediante la disociación de  $\text{H}_2\text{O}$  en celdas fotoelectroquímicas (PECs) ha ido aumentando notablemente y con una mayor intensidad en los últimos años[2,3]. Particularmente, destacan las investigaciones con materiales pertenecientes a la familia de los calcogenuros de metales en transición (TMCs por sus siglas en inglés), entre los cuales se encuentran el grupo de los trisulfuros metálicos binarios ( $\text{MS}_3$ ), investigados previamente como fotoánodos en procesos de generación de  $\text{H}_2$ [4,5], y el de trisulfuros metálicos ternarios ( $\text{MM}'\text{S}_3$ , M y M' = Ti, Zr, Hf, Nb, Ta, etc.), investigados en el presente trabajo. Estos materiales exhiben propiedades que cumplen los requerimientos necesarios para ser utilizados en procesos de fotogeneración de hidrógeno en PEC, i.e., morfología bidimensional que les confiere una alta superficie específica, idónea energía de la banda prohibida, propiedades de transporte óptimas, adecuada posición de sus bandas de energía[6], en la interfase semiconductor/electrolito, etc.

Los materiales investigados en este trabajo ( $\text{Ti}_x\text{Nb}_{1-x}\text{S}_3$  y  $\text{Ti}_x\text{Zr}_{1-x}\text{S}_3$ ) se han sintetizado a partir de bicapas metálicas de Ti-Nb y Ti-Zr mediante una reacción sólido-gas entre dichas bicapas y azufre en el interior de una ampolla sellada a vacío y calentada a  $550^\circ\text{C}$ . Las muestras obtenidas se han caracterizado estructuralmente por difracción de rayos X (XRD), composicionalmente por análisis de energía dispersiva de rayos X (EDX) y espectroscopia Raman y, finalmente, morfológicamente mediante microscopía electrónica de barrido (SEM, SEM-FEG) y microscopía electrónica de transmisión (TEM). La caracterización electroquímica para estudiar la interfase semiconductor/electrolito se realizó utilizando una celda fotoelectroquímica en configuración de 3 electrodos, siendo el platino (Pt) el contraelectrodo (CE), los materiales investigados los electrodos de trabajo (WE) y un electrodo de  $\text{Ag}/\text{AgCl}$  como referencia. Como electrolito se ha usado  $\text{NaSO}_3$  0.5M.

Figura 1. Morfología del trisulfuro ternario de Ti-Zr sintetizado a  $550^\circ\text{C}$  durante 20h.

Como resultado, se ha obtenido por primera vez la posición de los niveles de energía respecto al electrodo normal de hidrógeno (NHE) a partir de los potenciales de banda plana y la energía de banda prohibida, comprobando que dichos materiales son idóneos para la generación de hidrógeno asistida por luz. La fotogeneración de  $\text{H}_2$  en PEC se realizó con  $200\text{mW}/\text{cm}^2$  de iluminación (luz blanca) a dos potenciales de polarización 0.0V y 0.3V vs  $\text{Ag}/\text{AgCl}$ . Se han obtenido flujos de hidrógeno de hasta  $\sim 140\ \mu\text{molH}_2/\text{h}$ , cuantificados mediante un espectrómetro de masas. Estos valores se compararán con aquellos obtenidos con otros materiales bien establecidos y se discutirán nuevas aproximaciones para mejorar estos compuestos.

Los autores agradecen a F. Moreno el apoyo técnico prestado y al proyecto MINECO-FEDER (2015-65203R) la financiación económica. E. Flores agradece al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (CONACyT) la financiación para realizar este trabajo enmarcado dentro de su Tesis Doctoral.

[1] A. Fujishima, K. Honda, Nature 1972, 238, 37.

[2] Z. Li, W. Luo, M. Zhang, J. Feng, Z. Zou, Energy Env. Sci 2013, 6, 347.

[3] J. Li, N. Wu, Catal Sci Technol 2015, 5, 1360.

[4] M. Barawi, E. Flores, I. J. Ferrer, J. R. Ares, C. Sánchez, J Mater Chem A 2015, 3, 7959.

[5] E. Flores, J. R. Ares, I. J. Ferrer, C. Sánchez, Phys. Status Solidi RRL - Rapid Res. Lett. 2016, 10, 802.

[6] M. Barawi, J. M. Clamagirand, M. Ponthieu, S. Yoda, J. R. Ares, J. Bodega, J. F. Fernández, I. J. Ferrer, F. Leardini, C. Sánchez, Revista de la RSEF 2013, 27, 47.

**Primary author(s) :** Sr. FLORES, Eduardo (Dpto. de Física de Materiales M-04, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid)

**Co-author(s) :** Prof. SÁNCHEZ, C. (Dpto. de Física de Materiales M-04, Facultad de Ciencias, UAM); Prof. FERRER, I.J. (Dpto. de Física de Materiales M-04, Facultad de Ciencias, UAM); Dr. ARES, J.R. (Dpto. de Física de Materiales M-04, Facultad de Ciencias, UAM)

**Presenter(s) :** Sr. FLORES, Eduardo (Dpto. de Física de Materiales M-04, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid)

**Clasificación de la sesión :** Energy and Sustainability I

**Clasificación de temáticas :** Energy and Sustainability