



# Universidad **Mariana**

Propuesta de una ruta para la Producción de Biocombustibles mediante Fotosíntesis Artificial a partir de la Captura de Dióxido de Carbono presente en el Municipio de Pasto

Sara Camila Davila Paredes

Universidad Mariana  
Facultad de Ingeniería  
Programa de ingeniería Ambiental  
San Juan de Pasto  
2023

Propuesta de una ruta para la Producción de Biocombustibles mediante Fotosíntesis Artificial a partir de la Captura de Dióxido de Carbono presente en el Municipio de Pasto

Sara Camila Davila Paredes

Informe de investigación para optar al título de: ingeniería Ambiental

Mag. Luis Gabriel Lafaurie Ponce

Asesor

Universidad Mariana  
Facultad de Ingeniería  
Programa de Ingeniería Ambiental

San Juan de Pasto

2023

Artículo 71: los conceptos, afirmaciones y opiniones emitidos en el Trabajo de Grado son responsabilidad única y exclusiva del (los) Educando (s)

Reglamento de Investigaciones y Publicaciones, 2007  
Universidad Mariana

## **Agradecimientos**

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a mi director de tesis, Luis Gabriel Lafaurie Ponce, por su orientación, paciencia y dedicación a lo largo de este proceso. Sus conocimientos y consejos han sido fundamentales para el desarrollo de este trabajo.

Agradezco a mis profesores y mentores, por su invaluable guía académica y por compartir conmigo su sabiduría y experiencia. Sus enseñanzas han sido fundamentales en mi formación como profesional.

Agradezco a mis compañeros de estudio, por su colaboración, apoyo mutuo y por ser parte de este viaje académico. Sus aportes y amistad han enriquecido mi experiencia universitaria.

Agradezco a la Universidad Mariana por proporcionarme un entorno propicio para el aprendizaje y la investigación. Agradezco a los profesores y al personal administrativo por su labor incansable, por su interés en la investigación y por ser parte de este proyecto. Espero que esta propuesta pueda contribuir de manera positiva al desarrollo sostenible de la región y al cuidado del medio ambiente.

Finalmente, quiero expresar mi profundo agradecimiento a Dios, quien ha sido mi guía constante a lo largo de este viaje académico. Su amor inquebrantable, su sabiduría y su gracia han iluminado mi camino y me han dado la fortaleza para superar los desafíos. En cada paso, en cada descubrimiento y en cada logro, reconozco la mano divina que me ha sostenido. Agradezco a Dios por las oportunidades, por las lecciones aprendidas y por la inspiración que fluye desde lo alto.

### **Dedicatoria**

Dedico este trabajo a mis padres Blanca Paredes y John Davila, por su amor incondicional, apoyo constante y por ser mi fuente de inspiración en cada paso que doy. A mi hermano jhon Esteban Davila, por su comprensión, ánimo y motivación en los momentos más difíciles. A todos aquellos que creyeron en mí y me alentaron a perseguir mis sueños, este logro también es de ustedes.

Sara Camila Davila Paredes

## Contenido

Introducción .....	12
1. Resumen de la propuesta.....	15
1.1. Descripción de la situación actual.....	16
1.1.1. Formulación del problema .....	19
1.2. Justificación y marco legal .....	19
1.3. Objetivos .....	20
1.3.1. Objetivo general.....	20
1.3.2. Objetivos específicos .....	20
1.4. Marcos de referencia .....	21
1.4.1. Marco contextual.....	21
1.4.1. Marco teórico .....	23
1.5. Metodología .....	25
1.5.1. Campo, línea y área de la investigación .....	25
1.5.2. Tipo y enfoque de la investigación .....	25
1.5.3. Diseño metodológico de la investigación .....	25
1.6. Aspectos administrativos.....	28
1.6.1. Cronograma de actividades.....	28
1.6.2. Presupuesto general .....	30
2. Presentación, análisis y discusión de resultados .....	32
2.1 Basados en el objetivo uno.....	32
2.2. Basados en el objetivo dos .....	49
2.2.1 Caracterización de semiconductores y procedimientos .....	50
2.2.2 Proceso de fotoinducción dentro del semiconductor .....	53
2.2.3 Modelo para el salto de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción .....	57
2.2.4. Modelo de absorbancia .....	66
2.2.5. Reacciones químicas redox y de oxidación antes y después del salto del electrón a la banda de conducción.....	70

2.2.6. Captura de dióxido de carbono ( <b>CO<sub>2</sub></b> ) en la producción de biocombustible.....	73
2.2.7. Determinación del punto óptimo para el proceso seleccionado de fotosíntesis artificial .....	75
3. Conclusiones .....	79
4. Recomendaciones .....	81
Referencias bibliográficas .....	82
Anexos.....	91

## Índice de Tablas

Tabla 1 .....	26
<i>Metodología de la investigación</i> .....	26
Tabla 2 .....	28
<i>Cronograma</i> .....	28
Tabla 3 .....	30
<i>Presupuesto</i> .....	30
Tabla 4 .....	32
<i>Utilización del Software VOSviewer</i> .....	32
Tabla 5 .....	40
<i>Ecuación de búsqueda</i> .....	40
Tabla 6 .....	41
<i>Clústers y componentes o palabras clave</i> .....	41
Tabla 7 .....	51
<i>Semiconductores con su longitud de onda y eficiencia de producción</i> .....	51
Tabla 8 .....	67
<i>Valores de los parámetros utilizados en la absorbanca lineal y no lineal</i> .....	67

## Índice de Figuras

Figura 1 .....	21
<i>Mapa de ubicación Ciudad de Pasto (Nariño)</i> .....	21
Figura 2 .....	35
<i>Red de coocurrencia de palabras clave primera ecuación, VOSviewer</i> .....	35
Figura 3 .....	37
<i>Red de coocurrencia de palabras clave segunda ecuación, VOSviewer</i> .....	37
Figura 4 .....	38
<i>Red de coocurrencia de palabras clave tercera ecuación, VOSviewer</i> .....	38
Figura 5 .....	39
<i>Red de coocurrencia de palabras clave cuarta ecuación, VOSviewer</i> .....	39
Figura 6 .....	39
<i>Red de coocurrencia de palabras clave quinta ecuación, VOSviewer</i> .....	39
Figura 7 .....	42
<i>Componentes o palabras clave agrupados por la distancia</i> .....	42
Figura 8 .....	44
<i>Diagrama de bloques del proceso de fotocatalisis</i> .....	44
Figura 9 .....	47
<i>Proceso de reacciones químicas de CO<sub>2</sub> para la producción de biocombustible</i> .....	47
Figura 10 .....	48
<i>Actividad fotocatalítica en semiconductores en producción de biocombustible</i> .....	48
Figura 11 .....	54
<i>Banda de valencia, conducción y gap de energía</i> .....	54
Figura 12 .....	55
<i>Efecto fotoeléctrico</i> .....	55
Figura 13 .....	58
<i>Diagrama de bloques del modelo mecánico-cuántico</i> .....	58
Figura 14 .....	59
<i>Forma cristalina de Anastasa del TiO<sub>2</sub></i> .....	59

Figura 15 .....	60
<i>Potencial de confinamiento de la nube electrónica dentro del TiO<sub>2</sub></i> .....	60
Figura 16 .....	62
<i>Niveles de energía de la nube electrónica en el material TiO<sub>2</sub></i> .....	62
Figura 17 .....	64
<i>Niveles de energía de la nube electrónica en el material TiO<sub>2</sub> dopado con Nitrógeno</i> .....	64
Figura 18 .....	66
<i>Niveles de energía de la nube electrónica en el material TiO<sub>2</sub> dopado con Cromo</i> .....	66
Figura 19 .....	68
<i>Absorbancia de primer orden <math>\alpha_1</math> para TiO<sub>2</sub> y sus aleaciones con Nitrógeno y Cromo</i> .....	69
Figura 20 .....	69
<i>Absorbancia de primer orden <math>\alpha_3</math> para TiO<sub>2</sub> y sus aleaciones con Nitrógeno y Cromo</i> .....	69
Figura 21 .....	76
<i>Gap de energía para TiO<sub>2</sub> dopado con diferentes materiales de transición del periodo 4 y 5</i> ...	76
Figura 22 .....	77
<i>Absorbancia lineal <math>\alpha_1</math> para TiO<sub>2</sub> y sus aleaciones con diferentes metales de transición de los periodos 4 y 5 de la tabla periódica</i> .....	77

**Índice de Anexos**

Anexo A. Tabla de Clúster 4 con las respectivas clasificaciones de los artículos .....92

## **Introducción**

En un mundo donde la demanda de energía limpia y sostenible es cada vez más apremiante, la investigación en tecnologías que permitan la conversión de fuentes renovables en combustibles limpios se vuelve fundamental. La fotocátalisis, como proceso que utiliza materiales semiconductores para catalizar reacciones químicas mediante la absorción de luz, ha surgido como una herramienta prometedora en la búsqueda de soluciones sostenibles para la producción de energía y la mitigación de la contaminación ambiental.

El origen de esta investigación surge de la necesidad imperante de abordar los desafíos ambientales y energéticos actuales, donde la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero y la transición hacia una matriz energética más sostenible son imperativos para garantizar un futuro viable para las generaciones venideras. En este contexto, la fotocátalisis de dióxido de carbono para la producción de biocombustibles se presenta como una oportunidad para explorar nuevas vías de aprovechamiento de fuentes renovables y mitigación de impactos ambientales negativos asociados con el uso de combustibles fósiles.

Los objetivos de esta investigación se centran en proponer una ruta alternativa para la generación de biocombustibles utilizando el dióxido de carbono como materia prima y la aplicación de métodos basados en fotosíntesis artificial, para esto se analiza y comprende el comportamiento de los electrones en el material fotocatalítico de dióxido de titanio ( $TiO_2$ ) cuando se expone a luz visible, con el fin de entender cómo se produce la excitación de los electrones y su posterior movimiento a través del material. Este conocimiento es esencial para la comprensión de la fotocátalisis y la producción de hidrógeno a partir de fuentes renovables, un proceso clave en la transición hacia una economía más sostenible y respetuosa con el medio ambiente.

Los alcances de esta investigación abarcan en el primer objetivo, desde la revisión exhaustiva de la literatura científica relacionada con la fotosíntesis artificial y la fotocátalisis, hasta la aplicación de herramientas de análisis como el software VOSviewer para identificar tendencias y avances en el campo de estudio. Se pretende generar conocimiento que pueda ser aplicado en el

diseño y optimización de fotocatalizadores eficientes, capaces de impulsar reacciones clave para la producción de biocombustibles a partir de fuentes renovables; En el segundo objetivo, abarca la síntesis y caracterización de los materiales fotocatalíticos y la descripción de la producción de biocombustibles mediante fotocátalisis. Se pretende identificar los factores clave que influyen en la eficiencia de los procesos de fotocátalisis y proponer estrategias para optimizar la generación de hidrógeno a partir de fuentes renovables.

En cuanto a la metodología empleada, se ha realizado una revisión sistemática de la literatura científica, utilizando plataformas de búsqueda como Scencedirect y ACS catalysis para recopilar artículos relevantes sobre la fotosíntesis artificial y la fotocátalisis. Posteriormente, se ha aplicado el software VOSviewer para analizar y visualizar las relaciones entre los términos clave de los documentos obtenidos, permitiendo identificar patrones y tendencias en el campo de estudio. Para abordar este objetivo, se ha realizado una revisión exhaustiva de la literatura científica relacionada con la fotosíntesis artificial, centrándose en los factores ambientales, los materiales y los dispositivos utilizados para imitar el proceso natural de transformación de la energía solar en biocombustibles. A través de la selección de palabras clave relevantes y la utilización de herramientas como VOSviewer, se ha llevado a cabo un análisis sistemático de los artículos recopilados de plataformas de búsqueda, permitiendo identificar tendencias, avances y desafíos en este campo de investigación.

De igual manera en la segunda parte de la metodología se optó por un enfoque multidisciplinario que combina la revisión de técnicas de síntesis de materiales, caracterización estructural y análisis de propiedades fotocatalíticas. Se han utilizado herramientas avanzadas de modelado computacional, como el software COMSOL Multiphysics, para simular y comprender el comportamiento de los electrones en los materiales fotocatalíticos dopados, lo que ha permitido obtener información detallada sobre los procesos de excitación y transporte de cargas en la superficie de los catalizadores.

Es importante señalar que esta investigación presenta ciertas limitaciones, como la dependencia de la disponibilidad y calidad de la información recopilada en la literatura científica, así como la complejidad inherente a la comprensión de los procesos fotocatalíticos y sus

implicaciones en la producción de biocombustibles. Sin embargo, se espera que los resultados obtenidos aporten nuevas perspectivas y posibles líneas de investigación futuras en el campo de la fotocatalisis y la energía sostenible.

La importancia de esta investigación radica en su contribución al desarrollo de tecnologías innovadoras que puedan impulsar la transición hacia una matriz energética más limpia y sostenible. La síntesis y caracterización de materiales con propiedades fotocatalíticas óptimas son fundamentales para avanzar en la producción de biocombustibles a partir de fuentes renovables, reduciendo así la dependencia de combustibles fósiles y mitigando los impactos negativos asociados con su uso.

## **1. Resumen de la propuesta**

La fotosíntesis artificial es un proceso que imita la conversión de la luz solar en energía química por parte de las plantas y otros organismos fotosintéticos. Una de las aplicaciones más prometedoras de la fotosíntesis artificial es la producción de biocombustibles a partir de la captura de dióxido de carbono ( $CO_2$ ) del aire o de fuentes industriales. Los biocombustibles son combustibles líquidos o gaseosos que se pueden utilizar como alternativa a los combustibles fósiles, que son una de las principales causas del cambio climático. La fotosíntesis artificial podría ofrecer una solución sostenible y eficiente para reducir las emisiones de  $CO_2$  y generar energía renovable al mismo tiempo. Sin embargo, la fotosíntesis artificial todavía enfrenta muchos desafíos técnicos y económicos que requieren investigación e innovación. Algunos de estos desafíos son el diseño de materiales y dispositivos que puedan capturar y convertir la luz solar de forma eficaz, el desarrollo de catalizadores que puedan reducir el  $CO_2$  a productos útiles, y la integración de los diferentes componentes en sistemas funcionales y escalables.

La selección de los artículos relevantes para el análisis se realizó mediante la técnica de minería de datos, que consiste en extraer información útil de grandes volúmenes de datos. Se utilizaron las plataformas de búsqueda más reconocidas en el ámbito académico, como Web of Science y ACS catalysis y se obtuvieron 31636 artículos relacionados con el tema de interés. Para reducir este número y filtrar los artículos más pertinentes, se aplicó el programa VOSviewer, que permite visualizar y clasificar los documentos según criterios bibliométricos. Así, se logró identificar 64 artículos que cumplían con los requisitos de calidad y relevancia para el estudio.

Los artículos se agruparon mediante agrupamiento jerárquico en cada clúster con su respectiva denominación acerca de las condiciones de la ciudad de Pasto. Estas condiciones convergieron en un único parámetro relevante: la intensidad solar o irradiancia. Aplicar un algoritmo de minería de datos para determinar el método idóneo de fotosíntesis artificial para la producción de biocombustibles a partir de la captura de dióxido de carbono consiste en analizar los datos de cada cluster y compararlos con los resultados obtenidos por diferentes técnicas de fotosíntesis artificial, como el uso de microalgas, cianobacterias, plantas modificadas genéticamente o

nanomateriales. El objetivo fue identificar el método que ofrezca el uso de materiales semiconductores bajo la influencia de luz visible.

De igual manera, se analizó el comportamiento de materiales fotocatalíticos dopados con materiales como cromo, con el fin de mejorar su eficiencia en la conversión de energía solar en biocombustible. Se emplea una metodología multidisciplinaria para analizar diferentes técnicas de síntesis de materiales, caracterización estructural y modelado computacional para comprender los procesos de excitación y transporte de cargas en la superficie de los catalizadores. Los resultados obtenidos no solo amplían el conocimiento científico en esta área, sino que también tienen el potencial de aplicarse en la generación de energía limpia y la mitigación de impactos ambientales.

### **1.1. Descripción de la situación actual**

El calentamiento global es una de las mayores preocupaciones para el ser humano actualmente dado que, con el transcurso del tiempo se han venido aumentando los niveles de gases de efecto invernadero en el mundo, los cuales son, en la actualidad un problema por la fuerte variación de las condiciones climáticas que se presentan. Una de las causas de este fenómeno es la combustión de combustibles fósiles y las diferentes emisiones de contaminantes, ya sea por procesos industriales, transporte y cambios en las coberturas o usos del suelo. Entre estos gases de efecto invernadero se encuentra el  $CO_2$  que, según el (IDEAM, 2023) es uno de los principales gases que se emite en grandes cantidades a raíz de las actividades antrópicas.

En Colombia el consumo de energía primaria de combustibles fósiles representa un 75%, del suministro total de energía (IEA, 2021) lo que, de acuerdo con (Muñoz Fernández et al., 2022) demuestra la dependencia que tiene Colombia de los combustibles fósiles. Esta dependencia está directamente correlacionada con las grandes emisiones de gases de efecto invernadero que se producen anualmente y con las altas cantidades de  $CO_2$  liberado a la atmósfera. Inclusive, las emisiones en Colombia muestran un comportamiento similar al reportado por la agencia internacional de energía (IEA, 2021), quienes afirman que, las cantidades de  $CO_2$  en la atmósfera han ido aumentando con un promedio de 75,4 millones de toneladas de  $CO_2$  (Mt  $CO_2$ eq) a 2020.

En el departamento de Nariño según el (IDEAM, 2016) en el inventario nacional de gases de efecto invernadero, existen emisiones de este tipo de gases, cuyas principales fuentes de emisión están asociadas a: el crecimiento y resiembra permanente de cultivos, el consumo de leña en zonas rurales (debido a que en el departamento de Nariño el 52% de la población se encuentra en estas áreas), el transporte (donde los camiones y servicios pesado y autobuses generan el 4% de las emisiones del departamento); y, la deforestación de pastizales y otras coberturas de suelo. (IDEAM, 2016).

Adicionalmente en Nariño, de acuerdo con el perfil de emisiones de CO<sub>2</sub> dicho en el (IDEAM, 2016), el sector agrícola emite 3,685 Kton CO<sub>2</sub>eq debido a la resiembra de cultivos; el sector forestal emite 2,812 Kton CO<sub>2</sub>eq asociado a la deforestación; y, el sector de transporte reporta 845 Kton CO<sub>2</sub>eq (SECRETARÍA DE AMBIENTE Y DESARROLLO SOSTENIBLE & GOBERNACIÓN DE NARIÑO, 2019).

El análisis del comportamiento de las emisiones dentro del departamento revela que tres municipios se destacan con los niveles más altos. Dos de ellos, Tumaco y Mosquera, se encuentran ubicados en la región costera del Pacífico, mientras que la capital, Pasto, también figura entre los mayores emisores, con promedios que oscilan entre 390 y 641 kilotoneladas de CO<sub>2</sub> equivalente. Por otro lado, un grupo de 51 municipios presenta emisiones intermedias, con cifras que van desde las 389 hasta las 38 kilotoneladas de CO<sub>2</sub> equivalente. Únicamente 10 municipios, entre los que se encuentran Francisco Pizarro, El Charco, Los Andes, San Lorenzo, Belén, San Pedro, Santa Cruz, Ospina, Iles y Sandoná, registran niveles bajos de emisiones, inferiores a 37 kilotoneladas de CO<sub>2</sub> equivalente (GOBERNACION DE NARIÑO, 2020).

En el municipio de Pasto las concentraciones de CO<sub>2</sub> se deben principalmente a las actividades agrícolas, ganaderas; y, las emisiones generadas por el sector transporte (SECRETARÍA DE AMBIENTE Y DESARROLLO SOSTENIBLE & GOBERNACIÓN DE NARIÑO, 2019). Para mitigar la presencia de CO<sub>2</sub>, actualmente se pueden aplicar distintos métodos y/o tecnologías que pueden agruparse en tres grupos diferenciados: almacenamiento, utilización y fijación (Berberoglu et al., 2009). El almacenamiento consiste en disponer el CO<sub>2</sub> en

el subsuelo, ya que, generalmente este proviene de la quema de combustibles fósiles, que en principio yacían en el subsuelo; este proceso, abarca la captura mediante la separación de otros gases, el transporte y disposición final mediante procesos similares a los de extracción de combustibles fósiles (Pomar-Castromonte et al., 2021).

Actualmente los tratamientos para mitigar la presencia de CO<sub>2</sub> en el municipio abarcan aplicaciones que aprovechan el uso de suelos de la región, ya que, lo que se busca, es el almacenamiento del carbono por parte de las diferentes vegetaciones en el suelo, esta se logra según (MALES CASTRO & ORTÍZ ARTEAGA, 2017) con la implantación de sistemas agroforestales, los cuales capturan el CO<sub>2</sub> de la atmósfera, lo almacenan en el suelo, y lo mantienen por largos periodos de tiempo.

La fotosíntesis artificial es una de las nuevas alternativas de generación de energías limpias que se ha venido estudiando y poniendo en práctica en los últimos años, en la cual se intenta replicar el proceso de la fotosíntesis natural. La fotosíntesis artificial representa una opción sustentable para la producción de combustibles alternativos o vectores energéticos, como lo es el H<sub>2</sub> a partir de la reducción del CO<sub>2</sub> y la oxidación de H<sub>2</sub>O (Barrios et al., 2015).

En la fotosíntesis artificial se emplean materiales semiconductores con el fin de imitar el proceso de fotosíntesis natural, liberando electrones de su banda de conducción hacia un medio circundante como H<sub>2</sub>O o CO<sub>2</sub>, permitiendo la realización de reacciones como: la ruptura (oxidación) de la molécula de H<sub>2</sub>O para generar O<sub>2</sub> y H<sup>+</sup> (y, más adelante, H<sub>2</sub>); o la reducción de CO<sub>2</sub> a metano o metanol. La utilización de materiales semiconductores y la luz para provocar reacciones simultáneas de oxidación y reducción se enmarca en el ámbito conocido como fotocatalisis heterogénea. Este enfoque cumple con los requisitos esenciales para lograr el proceso de fotosíntesis artificial (Barrios et al., 2015).

La aplicación de la fotosíntesis artificial abre una posibilidad no explorada, para utilizar el CO<sub>2</sub> disponible en la atmósfera del municipio de Pasto, como una fuente de energía alternativa, específicamente en la producción de biocombustibles.

### **1.1.1. Formulación del problema**

¿Cuál es el proceso basado en fotosíntesis artificial más apropiado para la producción de biocombustible a partir de dióxido de carbono para las condiciones ambientales de la ciudad de Pasto?

## **1.2. Justificación y marco legal**

La normativa que regula a nivel nacional el uso de energías renovables no convencionales es la Ley 1715 de 2014. Dicha ley fomenta el desarrollo y la utilización de fuentes de energía no convencionales, sistemas de almacenamiento de estas fuentes y el uso eficiente de la energía, especialmente aquellas de carácter renovable, dentro del sistema energético nacional. Esto se logra mediante su integración al mercado eléctrico, su participación en zonas no interconectadas, en la prestación de servicios públicos domiciliarios, en el servicio de alumbrado público y en otros usos energéticos. Todo ello con el fin de promover un desarrollo económico sostenible, reducir las emisiones de gases de efecto invernadero y garantizar la seguridad en el abastecimiento energético (Ley 1715 de, 2014).

En el departamento de Nariño, especialmente en el municipio de Pasto, según la Secretaría de Ambiente y Desarrollo Sostenible (GOBERNACION DE NARIÑO, 2020) posee una concentración de CO<sub>2</sub> con promedios que van de 390 a 641 Kton CO<sub>2</sub> eq, producto de actividades antrópicas como las agrícolas, ganaderas; y, de emisiones generadas por el sector transporte (SECRETARÍA DE AMBIENTE Y DESARROLLO SOSTENIBLE & GOBERNACIÓN DE NARIÑO, 2019).

El CO<sub>2</sub> producido genera contaminación atmosférica cuando se encuentra en grandes cantidades dado que, es un gas de efecto invernadero, esto produce la dispersión de calor acumulado por la radiación solar en la superficie del planeta hacia el espacio y provoca un mayor calentamiento de la Tierra. (Twenergy, 2019). Un estudio realizado en Costa Rica dice que la exposición al CO<sub>2</sub> tienen propiedades que afectan la salud respiratoria de quienes se exponen a

estos gases, el ser humano tiene riesgos de poder presentar tos, molestias de garganta, molestias de nariz y sibilancia en presencia de una gripa (Yglesias González et al., 2013).

El CO<sub>2</sub> puede ser disminuido mediante diferentes técnicas que, como seres humanos se pueden emplear, para amortiguar los efectos de estos gases de efecto invernadero, como lo son: reducir el uso de transporte de cualquier tipo practicando la movilidad sostenible, seguir dietas con baja huella de carbono, ser consumidor sostenible, plantar árboles o zonas verdes para que sean sumideros de carbono y consumir energías renovables.

Sin embargo, también puede ser mitigado aprovechando económicamente subproductos generados a través de procesos basados en economía circular y energías renovables, como la aplicación de fotosíntesis artificial, en la obtención de biocombustibles o suplementos alimenticios.

Este trabajo tiene el potencial de establecer una nueva ruta para la disminución de CO<sub>2</sub> en la atmósfera del municipio de Pasto, que converja en la obtención de productos ambientalmente amigables y con potencial de ser explotados comercialmente. Adicionalmente, abre la puerta a futuros proyectos donde se desarrollen dichos métodos de forma experimental.

### **1.3. Objetivos**

#### ***1.3.1. Objetivo general***

Proponer una ruta alternativa para la generación de biocombustibles utilizando el dióxido de carbono como materia prima y la aplicación de métodos basados en fotosíntesis artificial.

#### ***1.3.2. Objetivos específicos***

- Seleccionar un método basado en fotosíntesis artificial para la producción de biocombustible a partir de dióxido de carbono, utilizando un algoritmo de minería de datos.

- Determinar el punto óptimo de operación del proceso de fotosíntesis artificial seleccionado para producción de biocombustible a partir de dióxido de carbono.

## **1.4. Marcos de referencia**

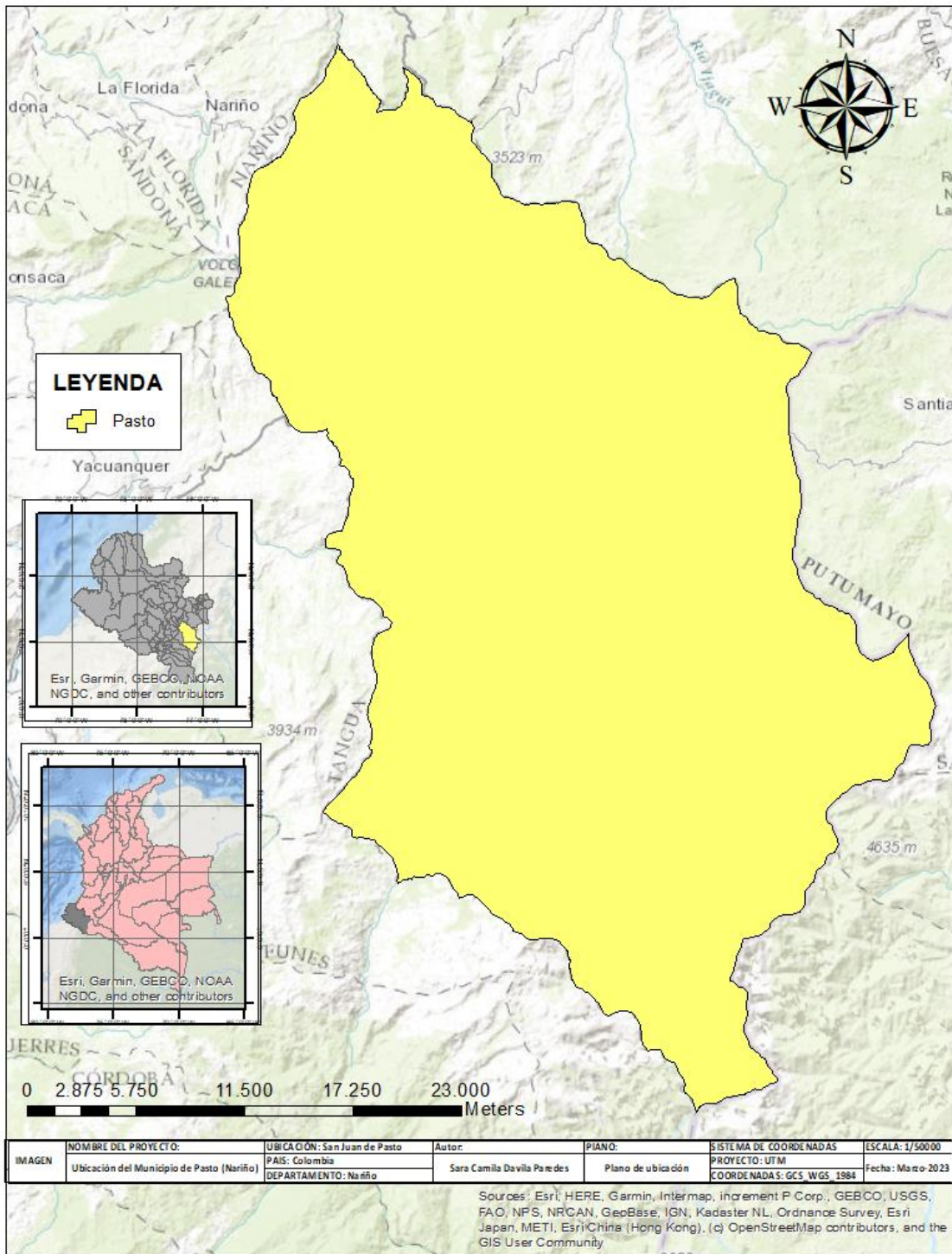
### ***1.4.1. Marco contextual***

Los referentes para la base de datos en Google scholar, Scopus, Sciencedirect, ACS Catalysis, Bibliotecas de la Universidad Mariana, universidades del municipio de Pasto. El Espacio en el que se trabajo fue en la Ciudad de Pasto (Nariño), con un tiempo estimado de 8 meses (2 semestres).

Pasto, capital administrativa del departamento de Nariño, se sitúa en la zona centro-oriental de la región, al suroeste de Colombia. Desde el punto de vista político-administrativo, este municipio se divide en doce comunas y diecisiete corregimientos. Abarca una extensión territorial de 6.181 kilómetros cuadrados, y su cabecera municipal se encuentra a una altitud de 2.527 metros sobre el nivel del mar, con coordenadas geográficas de 1°12'52.48" de latitud norte y 77°16'41.22" de longitud oeste. La temperatura media en esta localidad es de 12°C (Alcaldía Municipal de Pasto, 2020).

### **Figura 1**

*Mapa de ubicación Ciudad de Pasto (Nariño)*



### **1.4.1. Marco teórico**

La producción de biocombustibles mediante fotosíntesis artificial es una alternativa atractiva para reducir la dependencia de los combustibles fósiles y mitigar los efectos del cambio climático. La fotosíntesis artificial implica la captura de  $CO_2$  y el uso de energía solar para producir compuestos orgánicos que pueden usarse como biocombustibles.

Esto se lo hace con el fin de reducir los gases de efecto invernadero que son gases que retienen parte de la radiación infrarroja que emite la Tierra tras ser calentada por el Sol, es decir, gases que retienen energía en la atmósfera. Aunque no son contaminantes, la actividad humana ha incrementado en los dos últimos siglos su concentración y, por ende, ha variado el clima repercutiendo en la sostenibilidad del planeta (BBVA, 2023).

Como se mencionaba anteriormente, entre estos gases se encuentra el  $CO_2$ , este es un gas incoloro, inodoro que está compuesto por dos átomos de oxígeno y uno de carbono, el cual se encuentra de manera natural en la atmósfera como parte del ciclo del carbono, también se lo puede encontrar en la combustión que se genera por incendios forestales naturales (EPA, 2023), si bien el  $CO_2$  se encuentra naturalmente en la atmósfera, este tiene mayor aumento por las actividades humanas.

Para entender el concepto de fotosíntesis artificial se parte del proceso de la fotosíntesis natural que es un proceso natural que se produce en las plantas en el cual se almacena la energía solar para producir energía química que puede ser utilizada por los seres vivos, esto se logra mediante un intercambio físico activo entre las partes aéreas de las plantas y la atmósfera, puesto que el papel más notable de las estomas de la planta es la regulación de la pérdida de agua y la absorción de  $CO_2$  (Azcón Bieto & Talón, 2008).

Ahora bien, si se habla de fotosíntesis artificial, esta se define como, el uso de nanotecnología, para capturar luz, transportar electrones, romper la molécula de  $H_2O$  y capturar el  $CO_2$  con el fin de generar combustibles (Sovacool & Gross, 2015).

La producción de biocombustibles mediante fotosíntesis artificial a partir de la captura de dióxido de carbono implica varios conceptos termodinámicos importantes, como la energía libre de Gibbs, la entalpía y la exergía.

En la fotosíntesis artificial, la captura de dióxido de carbono y la producción de biocombustibles requieren energía que se puede obtener a partir de la luz del sol. El proceso se puede analizar utilizando conceptos termodinámicos como la energía libre de Gibbs, que es una medida de la cantidad de energía disponible para realizar trabajo en un sistema (Khan Academy, 2023). En la fotosíntesis artificial, la energía libre de Gibbs se puede utilizar para determinar la cantidad de energía necesaria para la captura de dióxido de carbono y la producción de biocombustibles.

Otro concepto importante es la entalpía, que representa la cantidad total de energía en un sistema. En la fotosíntesis artificial, la entalpía según (Míguez Gómez, 2013) se puede utilizar para analizar la cantidad de energía liberada o absorbida durante el proceso de captura de dióxido de carbono y la producción de biocombustibles.

La exergía es una medida de la energía disponible en un sistema para realizar trabajo, y se puede utilizar para analizar la eficiencia de la producción de biocombustibles mediante fotosíntesis artificial. La exergía se puede optimizar mediante el uso de catalizadores y tecnología de almacenamiento de dióxido de carbono (Míguez Gómez, 2013).

Para este proceso se necesita realizar la división fotocatalítica del  $H_2O$  para la producción de  $H_2$ , utilizando el método de deposición-precipitación, impregnación convencional y fotodeposición para mejorar la producción fotocatalítica de  $H_2$  a partir de la división de  $H_2O$  (Lin & Chang, 2010), de igual manera (Thimsen et al., 2011) lograron la división de  $H_2O$  mediante las nanopartículas de Au en la fotoactividad de  $Fe_2O_3$ .

Un proceso en el que se puede capturar el  $CO_2$  es mediante el cultivo de microalgas (Rave, 2013). Las microalgas son organismos fotosintéticos unicelulares que pueden crecer rápidamente y fijar grandes cantidades de  $CO_2$  atmosférico. Algunas especies de microalgas tienen la

capacidad de producir lípidos, proteínas y carbohidratos que pueden usarse para producir biocombustibles.

Además, se dice que las microalgas poseen la capacidad para mitigar las emisiones de CO<sub>2</sub> y producir lípidos, por lo que se consideran con potencial para la obtención de biocombustibles de tercera generación (Arias Peñaranda et al., 2013).

Otro proceso es la fabricación del etanol mediante la fermentación de los azúcares de plantas como el maíz o la caña de azúcar, el etanol contiene oxígeno que ayuda al motor del coche a quemar el combustible de forma más eficiente, reduciendo la contaminación del aire (NATIONAL GEOGRAPHIC, 2022).

## **1.5. Metodología**

### ***1.5.1. Campo, línea y área de la investigación***

La investigación se basa en el área de energías renovables teniendo en cuenta que se busca a partir de una buena metodología el aprovechamiento de manera sostenible de un contaminante atmosférico, de igual manera esta se tiene que fundamentar en la ley de energías renovables de Colombia.

### ***1.5.2. Tipo y enfoque de la investigación***

La presente investigación es de tipo descriptivo dado que, en ella se busca información a profundidad que es relevante para obtener el conocimiento acerca de cómo se puede utilizar la energía limpia como lo es la fotosíntesis artificial para la captación de CO<sub>2</sub> de la atmósfera y producir biocombustibles. El enfoque de la investigación es cualitativo porque se explora conocimientos previos teniendo como referencia investigaciones y artículos característicos relacionados al tema.

### ***1.5.3. Diseño metodológico de la investigación***

**Tabla 1**

*Metodología de la investigación*

<b>Título</b>	Propuesta de una ruta para la producción de biocombustibles mediante fotosíntesis artificial a partir de la captura de dióxido de carbono presente en el municipio de Pasto.		
<b>Objetivo general</b>	Proponer una ruta alternativa para la generación de biocombustibles utilizando el dióxido de carbono como materia prima y la aplicación de métodos basados en fotosíntesis artificial.		
<b>Objetivo</b>	<b>Meta</b>	<b>Actividades</b>	<b>Evidencias</b>
Seleccionar un método basado en fotosíntesis artificial para la producción de biocombustible a partir de dióxido de carbono, utilizando un algoritmo de minería de datos.	Recolectar la información necesaria para la producción de biocombustibles utilizando diferentes bases de datos.	Definir las palabras clave aplicables para la captura de CO <sub>2</sub> y producción de biocombustibles.	Base de datos
	Analizar críticamente cuál de los métodos es el que más se condiciona.	Mediante un software realizar una revisión sistemática en las diferentes bases bibliográficas para obtener los documentos adecuados.	Mediante un software aplicar minería de datos sobre los documentos obtenidos para identificar los atributos más relevantes.
	Determinar a través de las aplicaciones de	Aplicar un algoritmo de minería de datos	Agrupamiento de información en

	algoritmos que para determinar el objetivo metodológica es la más método idóneo certera	
	Proponer un modelo matemático basado en la metodología escogida del proceso de fotosíntesis artificial.	Evaluar mediante diagrama de bloques las diferentes etapas que conforman el proceso de fotosíntesis artificial escogido.
Determinar el punto óptimo de operación del proceso de fotosíntesis artificial		Escritura de una sección de la tesis. Proponer un modelo matemático de cada etapa del proceso.
seleccionado para producción de biocombustible a partir de dióxido de carbono.	Ajustar los parámetros del modelo a las condiciones ambientales del municipio de Pasto.	Acoplar todos los modelos en un modelo general. Mediante información secundaria obtener registros de las condiciones ambientales actualizadas en el municipio de Pasto.
	Realizar un proceso de optimización sobre los parámetros controlables del modelo, para lograr una mayor producción de biocombustible.	Identificar el índice que determina el grado de calidad del biocombustible producido. Diseñar el proceso de
		Algoritmo óptimo programado y ejecutado en software especializado.

optimización sobre el índice identificado utilizando el modelo propuesto.

Determinar el valor o nivel de los parámetros que optimizan el índice identificado.

## 1.6. Aspectos administrativos

### 1.6.1. Cronograma de actividades

**Tabla 2**

*Cronograma*

Objetivos	Actividades	Mes												
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11		
Seleccionar un método basado en fotosíntesis artificial para la producción de biocombustibles.	Definir las palabras clave aplicables para la captura de CO <sub>2</sub> y producción de biocombustibles.	■												
producción de biocombustible a partir de dióxido de carbono, utilizando un algoritmo de minería de datos.	Mediante un software realizar una revisión sistemática en las diferentes bases bibliográficas para obtener los documentos adecuados.		■											
	Mediante un software		■											

	<p>aplicar minería de datos sobre los documentos obtenidos para identificar los más relevantes.</p>	
	<p>Definir las características deseables de los métodos basados en fotosíntesis artificial sobre a producción de biocombustibles.</p>	
	<p>Aplicar la minería de datos para determinar el método idóneo.</p>	
<p>Determinar el punto óptimo de operación del proceso de fotosíntesis artificial seleccionado para producción de biocombustible a partir de dióxido de carbono.</p>	<p>Evaluar mediante diagrama de bloques las diferentes etapas que conforman el proceso de fotosíntesis artificial escogido.</p>	
	<p>Proponer un modelo matemático de cada etapa del proceso.</p>	
	<p>Acoplar todos los modelos en un modelo general.</p>	
	<p>Mediante información secundaria obtener registros de las condiciones ambientales</p>	

actualizadas en el municipio de Pasto.	
Identificar el índice que determina el grado de calidad del biocombustible producido.	
Diseñar el proceso de optimización sobre el índice identificado utilizando el modelo propuesto.	
Determinar el valor o nivel de los parámetros que optimizan el índice identificado.	
Escritura del informe.	
Preparación de sustentación.	

### 1.6.2. Presupuesto general

**Tabla 3**

*Presupuesto*

Rubro	Justificación	Universidad Mariana		Valor total
		Efectivo	Especie	
Recurso humano	Asesor e investigador principal	\$ 0	\$2036800	\$2036800
Bibliografía	Uso de base de datos para búsqueda bibliográfica	\$0	\$1000000	\$1000000

*Producción de biocombustibles mediante fotosíntesis artificial a partir de la captura de CO<sup>2</sup>*

Equipos	Computador	\$0	\$4000000	\$4000000
Eventos académicos	Participación de ponencias	\$250000	\$50000	\$300000
Publicaciones	Dejar registro del avance	\$0	\$1000000	\$1000000
Software	Software para utilizar	\$0	\$0	\$0
TOTAL		\$250000	\$8086800	\$8336800

## **2. Presentación, análisis y discusión de resultados**

### **2.1 Basados en el objetivo uno**

Para la base de datos que se desea consultar, se utilizaron dos plataformas de búsqueda diferentes: Sciencedirect y ACS catalysis. Estas plataformas permiten seleccionar palabras claves relevantes para el tema de investigación, que en este caso es la fotocatalisis de dióxido de carbono para la producción de biocombustibles. Se escogieron cuatro palabras claves para iniciar la búsqueda de artículos: Photocatalysis, photocatalyst, carbon dioxide y biofuel. Estas palabras reflejan los conceptos principales que se abordan en el estudio.

Una vez obtenido los artículos de la plataforma de búsqueda, se utilizó el software VOSviewer para la revisión sistemática. En este software se utiliza el coeficiente de Pearson y el coeficiente de Jacard que son medidas de similaridad para la construcción de redes o mapas (Ciencia Unisalle, 2022) cuantificando y cualificando la coocurrencia entre las palabras claves de los artículos descargados. En la tabla 4 se muestra como es el proceso de utilización del Software VOSviewer.

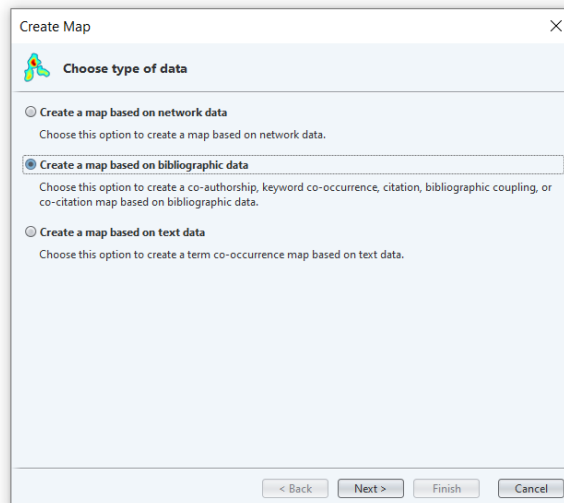
En la tabla 4 se describe el procedimiento seguido para utilizar el programa VOSviewer.

#### **Tabla 4**

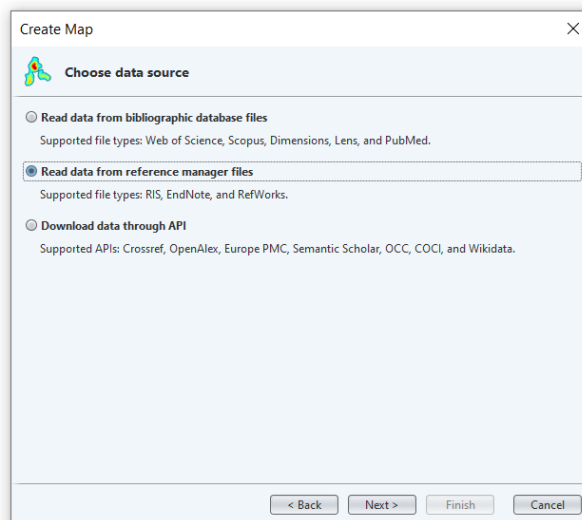
*Utilización del Software VOSviewer*

<b>Pasos</b>	<b>Figura del Software</b>
--------------	----------------------------

Para realizar un análisis bibliométrico de los artículos científicos, se puede utilizar un software especializado que permite visualizar las relaciones entre los autores, las revistas, las palabras clave y las citas. El primer paso fue descargar los registros bibliográficos de las bases de datos académicas objetivo (Sciencedirect y ACS catalysis). Luego, los archivos fueron importados al software con el fin de “crear un mapa basado en datos bibliográficos”.

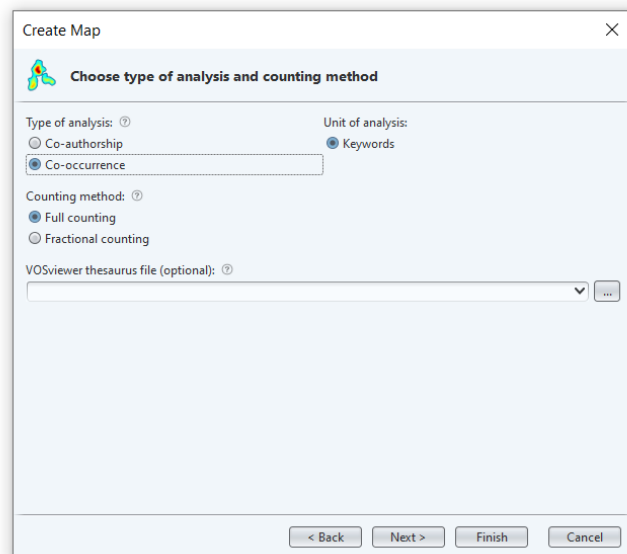


En esta parte del programa, el usuario debe elegir cómo se van a procesar los archivos que contienen los artículos descargados de las plataformas de búsqueda. Una de las opciones disponibles es usar el lector de datos de los archivos exportados de las plataformas de búsqueda, que es capaz de extraer la información relevante de los archivos en formato ris. Esta opción es útil cuando se quiere analizar los artículos de forma rápida y sencilla, sin tener que convertirlos a otro formato o usar otro programa externo.

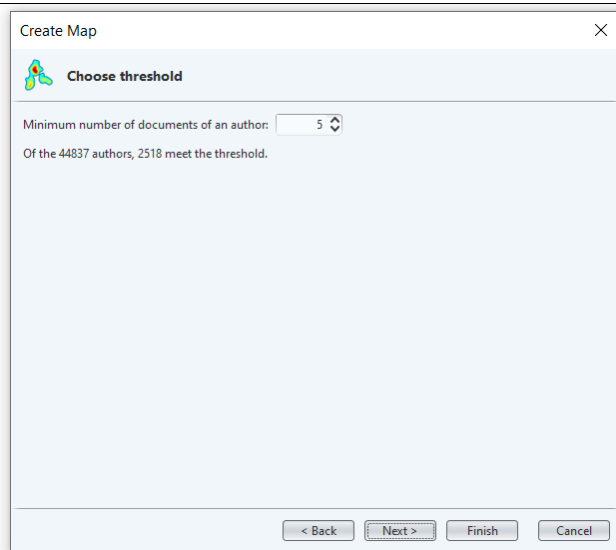


El análisis de coocurrencia es una técnica que permite identificar las relaciones entre las palabras clave de un conjunto de documentos. Para realizar este análisis, se siguieron los siguientes pasos:

- Seleccionar los archivos exportados que contienen los datos bibliográficos de los artículos que se quieren analizar. Estos archivos pueden estar en formato CSV, TXT, RIS o BIBTEX.
- Clasificar los archivos según el tipo de análisis que se desea realizar. En este caso, se elige la opción de coocurrencia, que muestra las conexiones entre las palabras clave de los artículos.
- Configurar los parámetros del análisis, como el número mínimo y máximo de palabras clave por artículo, el umbral de frecuencia y el método de cálculo de la coocurrencia.
- Visualizar los resultados del análisis en forma de matriz, red o mapa. Estos resultados permiten identificar las temáticas más relevantes, las tendencias y los vacíos de investigación en el campo estudiado.



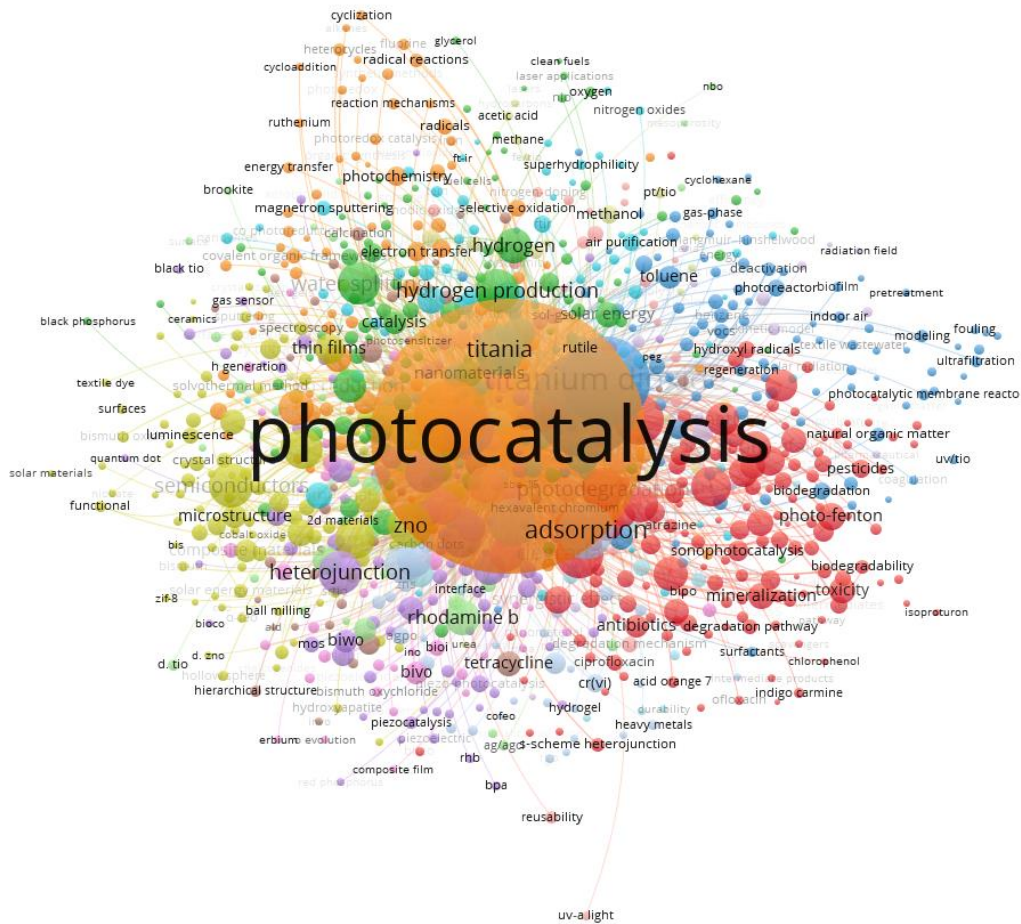
En esta nueva pestaña, se puede ajustar el umbral que define el número mínimo de documentos y palabras clave que se han identificado por el programa para mostrar la coocurrencia de las palabras clave. Este umbral permite filtrar los resultados y visualizar solo las palabras clave más relevantes y frecuentes en el corpus de análisis.



Siguiendo la metodología descrita en la Tabla 4 se realizó una búsqueda en la plataforma Sciencedirect, introduciendo la primera ecuación con las cuatro palabras clave principales seleccionadas para la búsqueda de artículos, tal como se indica en la tabla 5. Esta búsqueda arrojó un total de 31.636 artículos, que se descargaron para analizarlos en el software. Con esta primera ecuación se generó la red de coocurrencia de palabras clave que se muestra en la figura 2.

## **Figura 2**

*Red de coocurrencia de palabras clave primera ecuación, VOSviewer*



Fuente: Propia

De la figura 2, se puede apreciar que el dióxido de titanio (color azul-detrás de fotocatalísis en color naranja) se encuentra entre los términos más relevantes y frecuentes en los artículos, por lo que fue incluido en la ecuación de búsqueda; mientras que la palabra tratamiento de aguas residuales se eliminó de la ecuación porque no estaba relacionada con el objetivo de la investigación. Estas palabras se añadieron a la ecuación con los conectores correspondientes que se encuentran en la tabla 5.

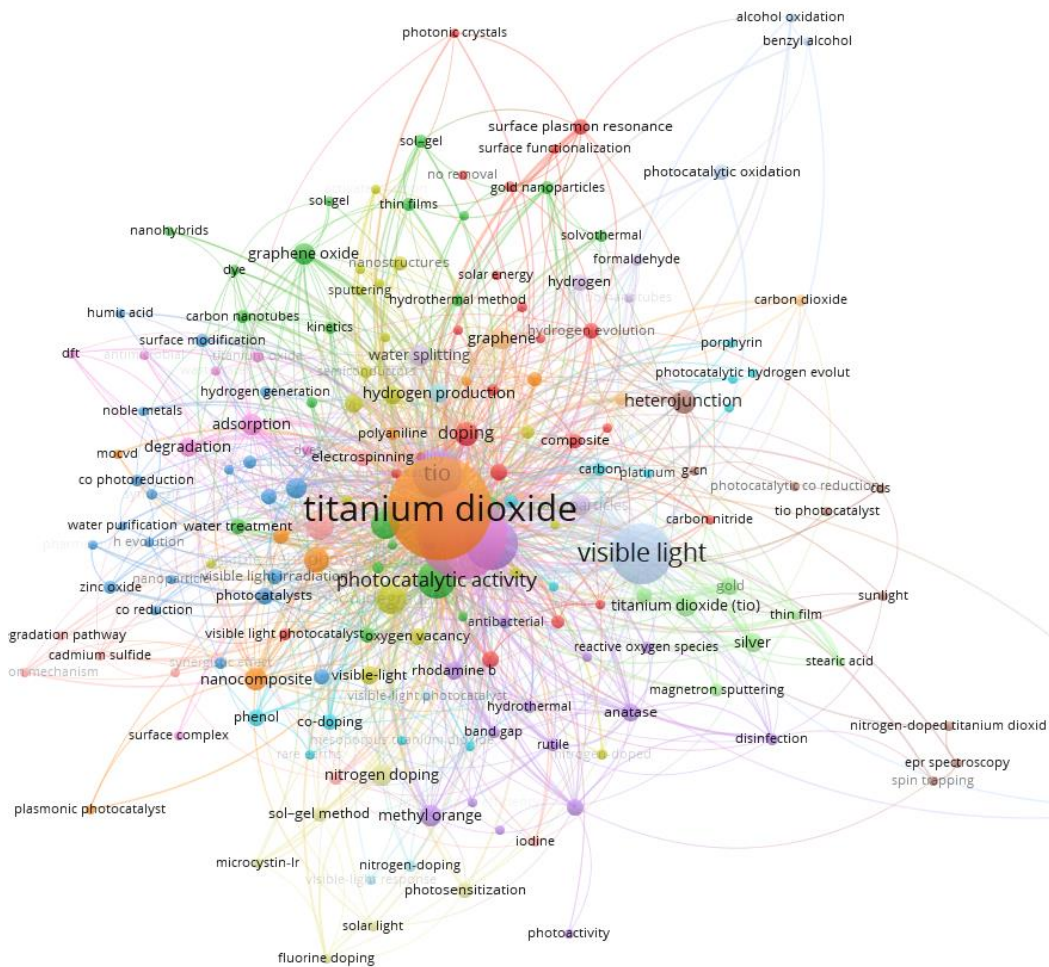
La búsqueda con esta nueva ecuación arrojó 4.924 artículos, lo que representa una reducción significativa del número inicial. De estos artículos, se seleccionaron los que cumplían con los criterios de inclusión y exclusión establecidos previamente. En la nueva red de cocurrencia (figura 3) se puede observar que el dióxido de titanio toma ahora mayor relevancia, siendo la



subproducto deseado (biocombustible), que en este caso sería la producción de hidrógeno, por lo que es un elemento esencial añadido a la nueva ecuación.

**Figura 4**

*Red de coocurrencia de palabras clave tercera ecuación, VOSviewer*

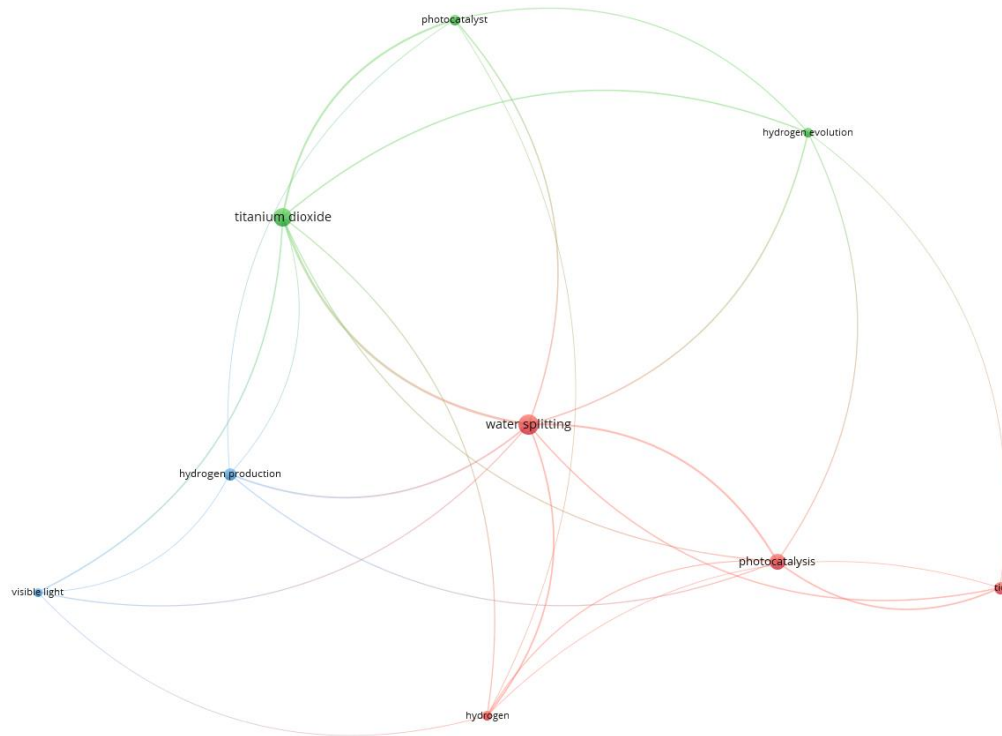


Fuente: Propia

Finalmente, con la quinta ecuación se redujo el número de artículos a 33, el cual es un número de artículos provenientes de Science Direct, que se consideró suficiente para realizar la revisión y análisis de la producción de biocombustibles mediante fotosíntesis artificial. Adicionalmente esta última ecuación se la inserto en la plataforma de búsqueda ACS catalytic, la cual dio como resultado 36 artículos diferentes a los anteriores; y, produciendo la red de coocurrencia presentada en la figura 5.

**Figura 5**

*Red de coocurrencia de palabras clave cuarta ecuación, VOSviewer*

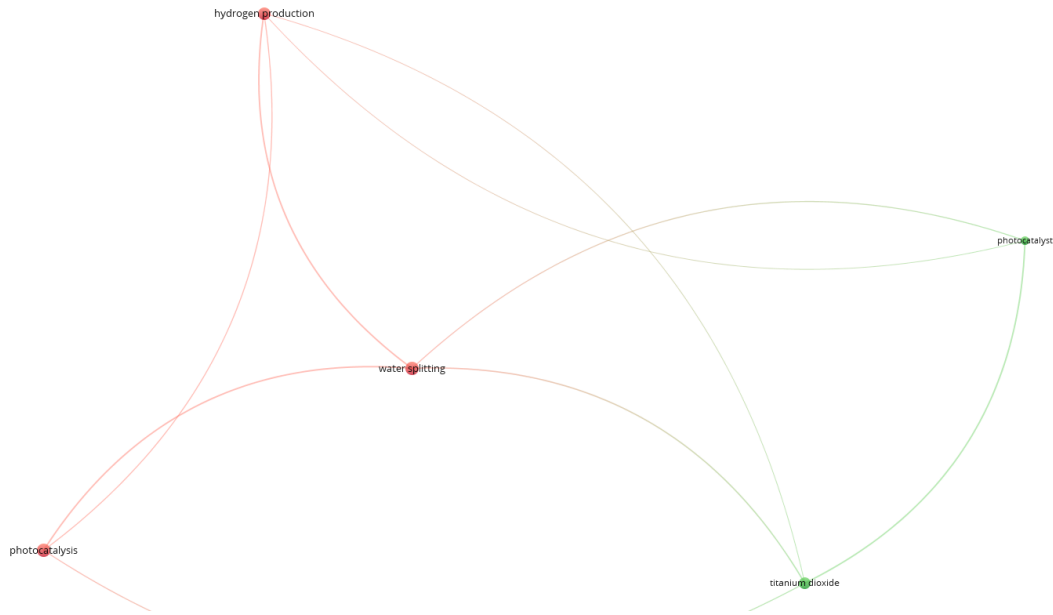


Fuente: Propia

En el proceso de selección de los artículos relevantes para el estudio de la producción de biocombustibles, se aplicó la quinta ecuación que filtró los resultados según las variables de interés, dando como resultado 33 artículos de la página de búsqueda en Sciencedirect, y la red de coocurrencia de las palabras clave como se muestra en la figura 6. Esta ecuación se introdujo en la base de datos ACS catalytic, también. Se obtuvo como resultado otros 33 artículos que cumplieran con los criterios de calidad e innovación. Estos artículos se analizaron en profundidad para extraer los datos más importantes sobre el tema.

**Figura 6**

*Red de coocurrencia de palabras clave quinta ecuación, VOSviewer*



Fuente: Propia

**Tabla 5**

*Ecuación de búsqueda*

Plataforma de búsqueda	Ecuación	Keywords	Artículos
Sciencedirect	biofuel AND cabon dioxide AND Photocatalysis OR photocatalyst	22008	31636
	biofuel AND carbon dioxide AND photocatalysis OR photocatalytic AND titanium dioxide NOT wastewater treatment.	8572	4924
	biofuel AND carbon dioxide AND photocatalysis OR photocatalytic AND titanium dioxide AND visible light NOT wastewater treatment.	3042	1383
	biofuel AND carbon dioxide AND photocatalysis OR photocatalytic AND titanium dioxide AND visible light AND water splitting NOT wastewater treatment	224	64
	biofuel AND carbon dioxide AND photocatalysis OR photocatalytic AND titanium dioxide AND visible light AND	120	33

	water splitting AND hydrogen production NOT wastewater treatment.	
ACS catalytic	biofuel AND carbon dioxide AND photocatalysis OR photocatalytic AND titanium dioxide AND visible light AND water splitting AND hydrogen production NOT wastewater treatment.	36

Los artículos seleccionados para el estudio cumplen con los criterios de calidad y relevancia. A partir de estos, se realizó un análisis utilizando un algoritmo de minería de datos, con el fin de tener una visión general de las tendencias, los avances y los desafíos que enfrenta la investigación en fotosíntesis artificial, especialmente en lo que respecta a los factores ambientales, materiales y los dispositivos que se emplean para imitar el proceso natural de transformación de la energía solar en biocombustibles.

El algoritmo de minería de datos consistió en calcular la frecuencia de aparición de las palabras clave entre los artículos bajo estudio, denominándolos componentes (Tabla 6). El cálculo se realizó utilizando el software VOSviewer, cuyos resultados fueron la base para clasificar los componentes mediante “Hierarchical clustering”; el cual, es un método común dentro de la minería de datos que agrupa la información utilizando un identificador “distancia” como discriminador; así, un grupo (o clúster) abarca datos similares entre sí. Para aplicar el método “Hierarchical clustering” sobre los datos obtenidos se utilizó el software OriginLab el cual permite hacer diferentes tipos de análisis e interpretación de datos; en este caso en específico el software se configuró para agrupar jerárquicamente los datos mediante el método Ward; el cual es un algoritmo de agrupamiento que minimiza la “distancia” (correlación) entre los clústers (Parra, 2019).

**Tabla 6**

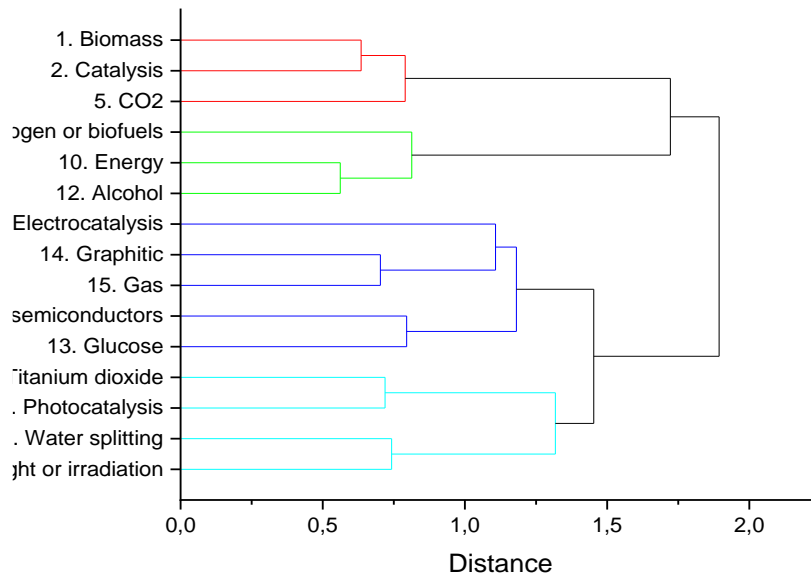
*Clústers y componentes o palabras clave*

<b>Clúster</b>	<b>Componentes</b>
Cluster Method	Ward
Distance type	Correlation
Find clustered by	Maximum distance

Number of Clústers	4
<b>Componentes</b>	<b>Cluster</b>
1. Biomass	1
2. Catalysis	1
3. Electrocatalysis	3
4. Hydrogen or Biofuel	2
5. <b>CO<sub>2</sub></b>	1
6. Titanium dioxide	4
7. Photocatalysis	4
8. Water splitting	4
9. Nano or semiconductors	3
10. Energy	2
11. Visible light or irradiation	4
12. Alcohol	2
13. Glucose	3
14. Graphitic	3
15. Gas	3

**Figura 7**

*Componentes o palabras clave agrupados por la distancia*



Fuente: Propia

El algoritmo clasificó los 15 componentes en 4 grupos distintos según su grado de correlación (“distancia”), como se puede apreciar en la figura 7. La distancia máxima entre los componentes de cada grupo refleja el nivel de similitud o correlación que existe entre ellos.

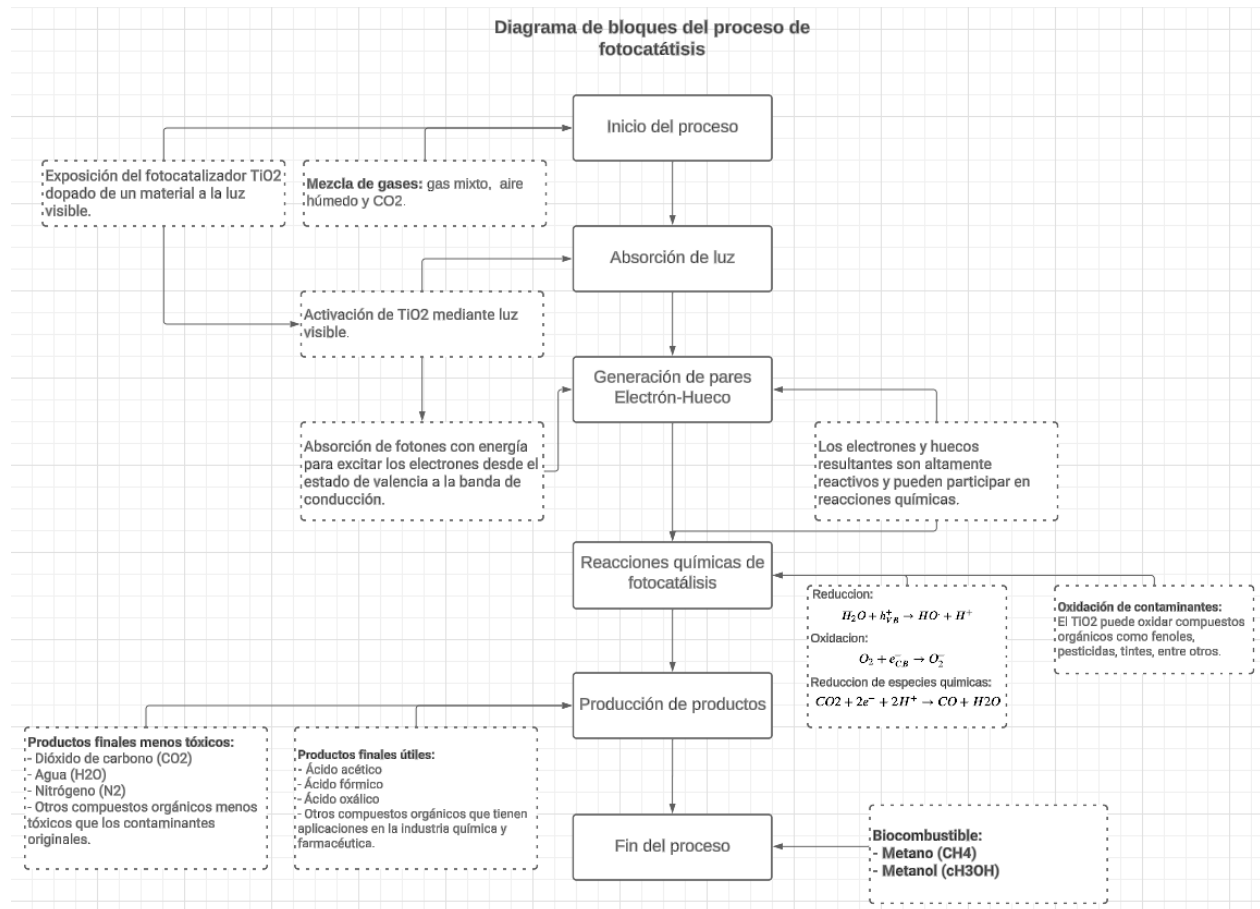
Teniendo en cuenta los clusters obtenidos en el algoritmo basado en minería de datos ejecutado en los programas VOSviewer y OriginLab; se identificó la ruta de fotosíntesis artificial como aquella que incluya las palabras clave del cluster 4, ya que aparece la palabra PHOTOCATALYSIS como representativa y la cual es la base de la fotosíntesis artificial. De esta forma, se condensan los componentes dióxido de titanio ( $TiO_2$ ), fotocátalisis, descomposición del agua y luz visible en la siguiente ruta general: La fotosíntesis artificial es un proceso que involucra la *fotocatálisis* de reacciones químicas mediante la excitación de pares electrón-hueco producidos por la interacción de *luz visible* sobre un semiconductor de  $TiO_2$ , la reacción química involucra la *descomposición de agua* u otros fluidos circundantes en otros compuestos como Hidrógeno; y, cuyas reacciones secundarias pueden producir compuestos considerados biocombustibles. Las conexiones entre las componentes descritas surgen de la relación que existente entre las componentes y las palabras utilizadas en la ecuación de búsqueda final (Tabla

5): biofuel AND carbon dioxide AND photocatalysis OR photocatalytic AND titanium dioxide AND visible light AND water splitting AND hydrogen production NOT wastewater treatment.

Con la información revisada en los artículos escogidos a la luz de los componentes del cluster 4; se identificó una ruta común (método) para la producción de biocombustibles a partir de  $CO_2$  basado en fotosíntesis artificial. La ruta fue organizada en el diagrama de bloques mostrado en la figura 8.

**Figura 8**

*Diagrama de bloques del proceso de fotocatalisis*



Fuente: Propia.

El método de fotosíntesis artificial identificado se divide en dos grandes procesos: producción de pares electrón-hueco y las reacciones químicas de estos últimos con fluidos circundantes ( $CO_2$  y  $H_2O$ ).

#### **a) Producción par electrón – hueco**

El proceso de fotosíntesis artificial involucra esencialmente reacciones primarias y secundarias de oxidación y reducción de diferentes compuestos generalmente fluidos, para esta ruta están contemplados  $CO_2$  y  $H_2O$  en fase gaseosa. Para ello es necesario contar con agentes reductores (electrones) y oxidantes (huecos) los cuales son producidos mediante la interacción de radiación electromagnética con materiales con un potencial de trabajo bajo de acuerdo a la descripción del efecto fotoeléctrico, para esta ruta se considera el semiconductor  $TiO_2$  excitado con fotones en el espectro visible. Con estas consideraciones en mente, el proceso inicia con el material semiconductor ( $TiO_2$ ) inmerso en  $CO_2$  y vapor de agua el cual es expuesto a la luz visible.

El semiconductor se encuentra caracterizado por un gap de energía ( $E_g$ ) que separa la banda de valencia de la banda de conducción; esto es, existen electrones en el material que se encuentran en la banda de valencia y no pueden escapar de él, a menos que reciban la energía externa suficiente para saltar a la banda de conducción cargando más negativamente los estados más altos de energía y ubicándolos generalmente en la superficie del material. Para lograr este salto o transición, los fotones incidentes, deben contener la energía suficiente para ceder a los electrones.

Mientras el material de  $TiO_2$  esta expuesto a la luz solar, la densidad fotónica incidente, libera electrones a la banda de conducción, dejando moléculas desapareadas (huecos) en la banda de valencia los cuales quedan cargados positivamente; esto es, se genera un par electrón-hueco ( $e_{CB}^- - h_{VB}^+$ ).

Las variables que determinan la cantidad de pares electrón-hueco producidos de acuerdo con la descripción de este subproceso son: tipo de semiconductor y sus dopantes, gap de energía de este; y, energía e intensidad de los fotones incidentes.

### b) Reacciones químicas

Cuando los pares electrón-hueco se forman, estos inician reacciones de oxidación-reducción con el medio circundante. En este caso los electrones en la banda de conducción reducen las moléculas de  $CO_2$ :



mientras que los huecos en la banda de valencia oxidan las moléculas de  $H_2O$  para formar protones de hidrógeno ( $H^+$ ) y grupos hidroxilo ( $OH^+$ ) y un electrón



El protón y el electrón forman un radical hidrógeno:

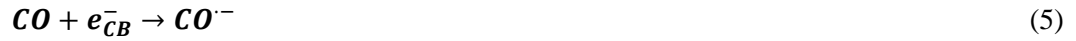


Como reacciones secundarias tenemos que los radicales hidrógeno ( $H^*$ ) reaccionan con el dióxido de carbono reducido ( $CO_2^{\cdot-}$ ) para formar monóxido de carbono ( $CO$ ) e iones hidroxilos ( $OH^-$ ):



Ya que parte de los objetivos principales de este tipo de aplicaciones es disminuir las afectaciones ambientales debidas al  $CO_2$  y otro tipo de gases de efecto invernadero, el  $CO$  como subproducto es un problema adicional; sin embargo, este puede tratarse en el mismo proceso utilizando otros electrones que aún no se hayan recombinado en el material  $TiO_2$ . Esto último puede lograrse mediante la interacción continuada de luz visible sobre el material semiconductor cuyo gap de energía se encuentre en el espectro visible o por debajo de este.

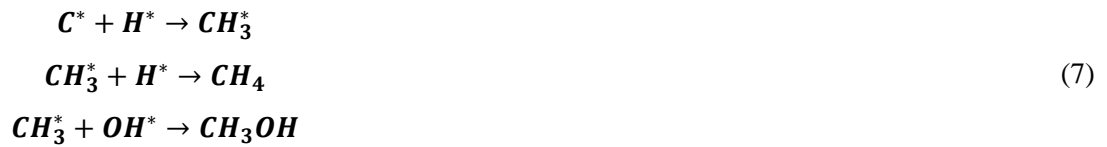
De esta forma se puede lograr una nueva reacción (terciaria), donde se obtiene el monóxido de carbono reducido:



El  $CO^{\cdot-}$  reacciona con radicales de hidrógenos produciendo carbono reducido ( $C^*$ ) e iones hidroxilo ( $HO^-$ ):

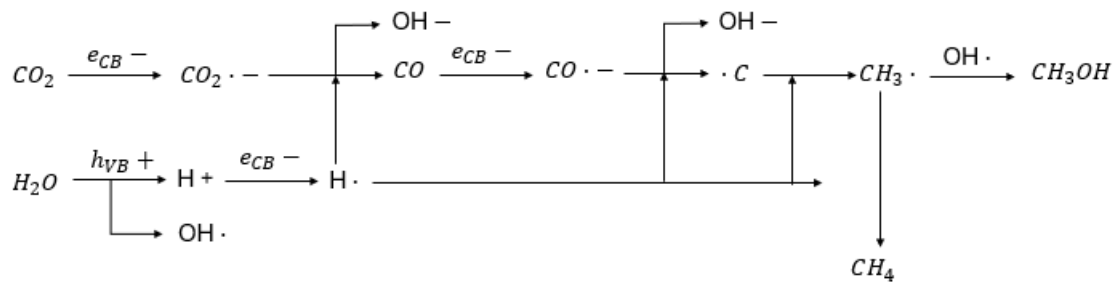


A partir de este punto se generan los primeros combustibles como productos de cuartas reacciones dentro del proceso. En primer lugar, el  $C^*$  reacciona con radicales de hidrógeno para formar radicales de metilo ( $CH_3^*$ ), que a su vez puede reaccionar o con otros radicales de hidrogeno para formar metano ( $CH_4$ ), o con radicales hidroxilos para formar metanol ( $CH_3OH$ ):



### Figura 9

Proceso de reacciones químicas de  $CO_2$  para la producción de biocombustible



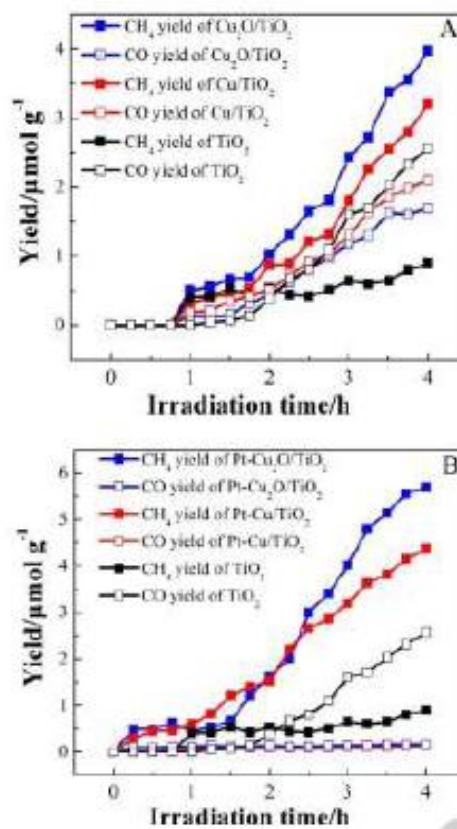
Fuente: (Kreft et al., 2020)

Tanto el metano como el metanol son compuestos que pueden almacenarse en fase líquida por lo cual se cumple con el objetivo de capturar el  $CO_2$  circundante para transformarlo en productos útiles para generar energía.

Para este subproceso las variables involucradas se pueden identificar como la cantidad de pares electrón-hueco, la cantidad (concentración) de  $CO_2$  y  $H_2O$  ambos en gase gaseosa; y, la cantidad (concentración) de biocombustibles metano y metanol. Intuitivamente, se puede afirmar que existe una correlación directa entre estas variables, de tal forma que a mayor cantidad de pares electrón-hueco, mayor cantidad de biocombustibles producidos. De hecho, en (Kreft et al., 2020) se muestra la dependencia de la cantidad de  $CH_4$  producido como una función del tiempo de irradiación de luz sobre diferentes materiales, que incluyen  $TiO_2$  dopado con otros elementos.

**Figura 10**

*Actividad fotocatalítica en semiconductores en producción de biocombustible*



Fuente: (Kreft et al., 2020)

La figura 10 muestra una correlación positiva entre la cantidad de biocombustible obtenido, el tiempo de irradiación y el tipo de dopante sobre el material  $TiO_2$ . Esto último refuerza la idea que

la producción efectiva de los pares electrón-hueco es indispensable para lograr un adecuado proceso de fotosíntesis artificial.

Adicionalmente, cabe mencionar que en las diferentes referencias revisadas no se incluyen variables ambientales como determinantes en el proceso de fotosíntesis artificial, por lo cual las condiciones ambientales de la ciudad de Pasto se descartan como variables relevantes en el proceso.

## **2.2. Basados en el objetivo dos**

De acuerdo con la literatura revisada se estableció un proceso (modelo) representativo de la producción de biocombustibles por fotosíntesis artificial (fotocatálisis) como se observa en la figura 8; el cual representa las etapas generales del proceso de fotocatalisis, que incluyen la absorción de luz, la generación de pares electrón-hueco, las reacciones químicas de fotocatalisis y la producción de productos. Cada etapa es crucial para el funcionamiento efectivo del proceso de fotocatalisis.

Adicionalmente, como ya se había mencionado, la producción de pares electrón-hueco es determinante para la producción de biocombustibles mediante fotosíntesis artificial. Por lo cual, se propone un modelo matemático centrado en las variables que permiten obtener eficientemente estos pares electrón-hueco. De esta forma, se implementó un modelo mecánico cuántico que considere el material  $TiO_2$  y sus dopantes que permita cuantificar el gap de energía  $E_g$  y la absorbancia como una función de la energía de los fotones incidentes y de la intensidad, la cual es la única variable que puede ser característica en la ciudad de Pasto.

El modelo mecánico-cuántico se resolvió utilizando el software physics COMSOL para analizar el salto de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción en el material  $TiO_2$  porque permite comprender el comportamiento de los electrones en el material fotocatalítico cuando se expone a una onda electromagnética (luz). Este modelo considera la estructura cristalina tetragonal del  $TiO_2$  y evalúa la interacción de la luz con esta red cristalina, lo que permite entender cómo se produce la excitación de los electrones y su posterior movimiento a

través del material, lo que es fundamental para la comprensión de la fotocatalisis y la producción de biocombustibles a partir de fuentes renovables.

Las diferentes consideraciones teóricas y matemáticas se muestran a continuación:

### ***2.2.1 Caracterización de semiconductores y procedimientos***

La creciente necesidad de energía limpia y sostenible ha estimulado la investigación en el avance de tecnologías destinadas a la generación de hidrógeno a partir de fuentes renovables. La utilización de fotocatalizadores en la división fotoquímica del agua para transformar la energía solar en hidrógeno se ha destacado como una perspectiva prometedora en la búsqueda de una fuente de combustible ecológica y renovable. En este escenario, la síntesis y evaluación de nanocompuestos fotocatalíticos ha emergido como un campo de estudio de notable interés, con el propósito de potenciar la eficacia y viabilidad económica de este procedimiento (Etacheri et al., 2015).

La fotocatalisis es un procedimiento que emplea materiales semiconductores para acelerar procesos químicos a través de la captación de radiación lumínica (Kumaravel et al., 2019). Este método se ha posicionado como un ámbito de estudio fundamental en la exploración de alternativas sostenibles para la generación de energía y la reducción de la contaminación ambiental. En este contexto, la creación y descripción detallada de materiales con características fotocatalíticas sobresalientes adquieren una relevancia significativa.

La caracterización de estos materiales según Thi Quyen et al. (2021,p.12), resulta esencial para comprender su disposición cristalina, forma, composición química y propiedades eléctricas, lo cual facilita la valoración de su idoneidad en aplicaciones fotocatalíticas y bioelectroquímicas. Métodos como la difracción de rayos X, la microscopía electrónica y la espectroscopía de fotoelectrones de rayos X son esenciales para suministrar detalles precisos acerca de estas propiedades. Asimismo, la correlación entre la estructura de los materiales y su rendimiento en fotocatalisis es crucial para el diseño y la mejora de fotocatalizadores eficaces, capaces de impulsar procesos como la producción de hidrógeno a partir de fuentes renovables de energía.

El dióxido de titanio ( $TiO_2$ ) es el semiconductor más comúnmente empleado en la fotocatalisis debido a sus múltiples ventajas para esta aplicación. Destaca por su capacidad de absorber luz ultravioleta y generar electrones y huecos con alta eficiencia, los cuales son responsables de la degradación de contaminantes. Además, el  $TiO_2$  presenta una buena estabilidad química, baja toxicidad, alta disponibilidad y bajo costo, lo que lo convierte en un material ideal para aplicaciones fotocatalíticas (Etacheri et al., 2015).

No obstante, al diseñar un modelo para la fotosíntesis artificial, es crucial considerar las longitudes de onda emitidas por el material utilizado para determinar la energía absorbida. Según investigaciones previas, el  $TiO_2$  abarca longitudes de onda aproximadas de 100 nm a 400 nm, con una energía en la brecha de banda más estrecha de 3.2 eV (Zeng et al., 2018), lo que indica que no se encuentra en el rango de luz visible. Por consiguiente, en la literatura se emplean diversos semiconductores o nanopartículas que se añaden al  $TiO_2$  con el objetivo de mejorar su capacidad de absorción de luz visible, así como de optimizar la separación de cargas o modificar su estructura electrónica. En la tabla 7 se detallan algunos de los semiconductores utilizados, junto con su aproximación a la longitud de onda y la eficiencia de producción.

**Tabla 7**

*Semiconductores con su longitud de onda y eficiencia de producción*

Semiconductor	Estudios	Ancho de la banda de energía (eV)	Longitud de onda (nm)	Eficiencia de producción ( $H_2$ ) ( $\mu\text{mol g}^{-1}\text{h}^{-1}$ )
$ln_2O_3 - TiO_2$	(Huo et al., 2023)	3.37	370	529
<b>3DOM CdS/<math>ln_2O_3 - TiO_2</math></b>	(Huo et al., 2023)	2.35	390	3428
<b>0.6% en peso de Pt-cargado mesoporous-assembled <math>TiO_2</math></b>	(Sreethawong et al., 2009)	3.18	460	500
<b>g-<math>C_3N_4</math></b>	(Maurya et	2.7	822	2314

	al., 2023)			
<b>CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> – TiO<sub>2</sub></b>	(Hafeez, Lakhera, Karthik, et al., 2018)	1.51	517	3598
<b>Cu- TiO<sub>2</sub></b>	(Thi Quyen et al., 2021)	2.7	460	4560
<b>CdS/ TiO<sub>2</sub></b>	(Li et al., 2010)	2.4	517	5118
<b>MBT-75 (Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/MoS<sub>2</sub>/ TiO<sub>2</sub>)</b>	(Drmosh et al., 2020)	1.2	1034	2150
<b>TiO<sub>2</sub>/rGO/ g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub></b>	(Ibrahim et al., 2020)	2.4	517	3200

Las técnicas de caracterización desempeñan un papel fundamental al determinar el ancho de banda de energía de cada semiconductor o nanopartícula, como se detalla en la tabla 7. El ancho de banda de energía, Gap de energía ( $E_g$ ) es una medida de la energía necesaria para excitar un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción, lo cual resulta crucial para comprender el comportamiento eléctrico y óptico de los materiales. Un ancho de banda de energía bajo indica que se necesita poca energía para excitar un electrón, lo que sugiere que el material es un buen conductor de electricidad y puede absorber o emitir luz visible. Por otro lado, un ancho de banda de energía alto implica que se requiere más energía para excitar un electrón, lo que indica que el material es un mal conductor de electricidad y puede ser transparente o reflectante (Yan et al., 2014).

En el contexto de la fotocatalisis, un ancho de banda de energía bajo es preferible ya que permite al material absorber fotones de luz de baja energía, como los presentes en la región visible del espectro electromagnético. Esto posibilita que el material sea activo en la producción de hidrógeno a partir de la energía solar. Por el contrario, un ancho de banda de energía alto puede limitar la eficiencia de la fotocatalisis, ya que el material solo puede absorber fotones de alta energía, como los de la región ultravioleta del espectro electromagnético (Yan et al., 2014).

El espectro electromagnético abarca todas las frecuencias de radiación electromagnética, desde las ondas de radio de baja frecuencia hasta los rayos gamma de alta frecuencia. Esta radiación se propaga en forma de ondas y exhibe propiedades tanto ondulatorias como corpusculares, lo que significa que puede comportarse como ondas (con longitudes de onda y frecuencias) y como partículas (fotones) (Kumaravel et al., 2019).

Para relacionar el gap de energía de los semiconductores con la radiación del espectro electromagnético, se emplea la ecuación de Planck-Einstein:  $E = hc/\lambda$ , donde E representa la energía del fotón, h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz y  $\lambda$  es la longitud de onda del fotón (Kumaravel et al., 2019). Esta ecuación permite calcular la longitud de onda del fotón para cada semiconductor, lo que resulta fundamental para comprender cómo interactúan los materiales con la radiación incidente. En el caso de la radiación solar, que varía entre 400 y 900 W/m<sup>2</sup> en un día, esta energía se transmite en forma de radiación electromagnética, que incluye luz visible, lo que es relevante para aplicaciones fotocatalíticas y de conversión de energía solar (Kumaravel et al., 2019).

### ***2.2.2 Proceso de fotoinducción dentro del semiconductor***

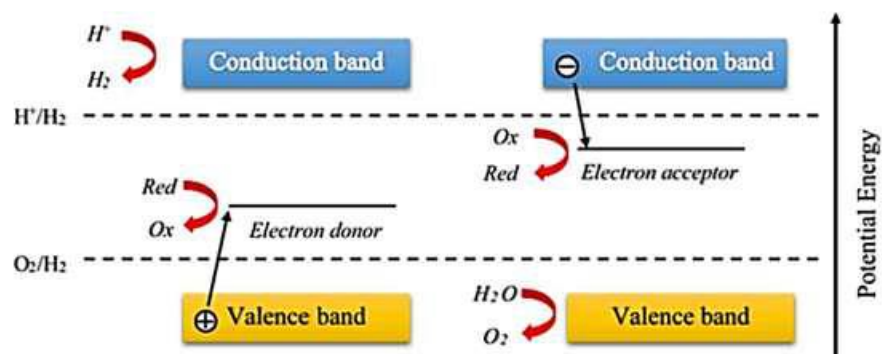
En materiales semiconductores, microscópicamente, los electrones se encuentran moviéndose dentro de un elemento de volumen alrededor de los núcleos atómicos denominada nube electrónica. Los electrones, energéticamente, se encuentran en diferentes niveles discretos de energía, de acuerdo con el modelo cuántico del átomo. Cada electrón ocupa un nivel de energía distinto a otro de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli, de tal forma que para temperaturas muy cercanas al cero absoluto, todos los electrones y sus niveles de energía se ubican dentro de una región por debajo de una energía denominada energía de fermi  $E_F$ , la cual es específica para cada sistema atómico, molecular y/o cristalino.

A temperaturas mayores, como la temperatura ambiente, los electrones poseen la suficiente energía cinética para moverse o saltar entre los diferentes niveles de energía, incluyendo niveles por encima de la energía de Fermi; estas transiciones son las causantes de fenómenos

macroscópicos como la conductividad térmica o la conductividad eléctrica, donde el movimiento de electrones en los niveles de energía más altos, son capaces de superar potenciales de confinamiento generados por los núcleos atómicos de tal forma que hay una densidad electrónica que puede “moverse” entre el material semiconductor transportando energía térmica o eléctrica. A estos niveles superiores de energía se los agrupa en una banda de energía de interés académico denominado “banda de conducción”, la cual no es más que un intervalo de energía en el que los electrones pueden desplazarse a través del semiconductor con mayor facilidad, cuando poseen la suficiente energía cinética que puede obtener por interacciones con fenómenos externos como la incidencia de radiación electromagnética para saltar desde la denominada “banda de valencia”, donde están más fuertemente ligados a los núcleos atómicos.

**Figura 11**

*Banda de valencia, conducción y gap de energía*



Fuente: Kumaravel et al., 2019.

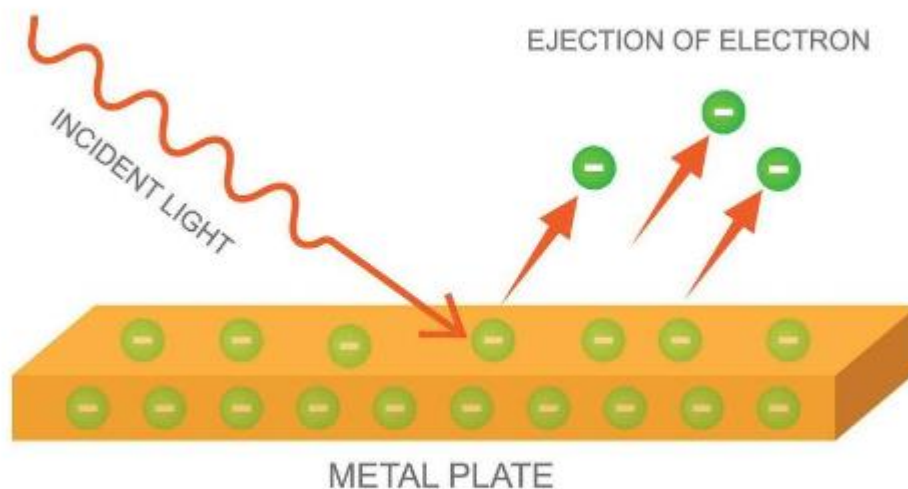
Para que un electrón alcance la banda de conducción debe superar una barrera energética que separa la banda de valencia de la banda de conducción, denominada gap de energía  $E_g$ . El gap de energía se produce por las interacciones cuánticas entre las diferentes partículas que conforman el semiconductor, en mayor proporción los núcleos atómicos, electrones, impurezas o elementos dopantes en el material. Por definición clásica, el electrón debe ganar energía igual al del gap de energía, para poder superarlo, para ello, el electrón puede excitarse de forma externa mediante,

campos electromagnéticos externos, como los eventos fenomenológicos producidos cuando un haz de luz que incide sobre un material semiconductor.

De acuerdo con el efecto fotoeléctrico, un haz de luz monocromático que incide sobre un semiconductor, entendido como paquetes de energía incidentes (fotones), colisionan elásticamente con los electrones, cediendo energía a los mismos. Si la energía cedida es igual o mayor que el gap de energía, el electrón se libera de un estado fuertemente ligado a los núcleos atómicos (banda de valencia) a uno de débil ligadura (banda de conducción), donde es capaz de desplazarse por el semiconductor, permitiendo transportar energía térmica o eléctrica.

### **Figura 12**

*Efecto fotoeléctrico*



Fuente: (Shutterstock, 2023).

El estudio de este tipo de interacciones donde se involucran partículas subatómicas, debe realizarse bajo el marco teórico de la mecánica cuántica ya que los fenómenos físicos que se

presentan a escala por debajo de los nanómetros no coinciden con el tratamiento clásico de partículas, pues existe un comportamiento dual onda-partícula, tal y como se demostró en el experimento de la doble rendija, la cual es bombardeada con electrones, los cuales forman un patrón de interferencia por detrás de las rendijas, mostrando que las partículas pueden comportarse como ondas.

Adicionalmente, de acuerdo con el principio de incertidumbre de Heisenberg, las partículas se encuentran en diferentes estados de energía a la vez, tal que el observador no puede conocer a priori el estado en el que se encuentra una partícula, sino con una cierta probabilidad. Cuando el observador realiza una medición, altera el sistema, haciendo que la partícula caiga en un solo nivel de energía. Otra forma de entender este principio es que, no se puede determinar al mismo tiempo dos variables físicas medibles que no conmuten; por ejemplo, la posición y el momentum, de tal forma que, una pequeña incertidumbre en la medida de la posición implica una gran incertidumbre en la medida del momentum, y viceversa.

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (8)$$

Este comportamiento contraintuitivo de la naturaleza a nano escala puede estudiarse mediante la solución de la ecuación de Schrodinger, la cual es una ecuación diferencial de segundo orden cuya solución es la denominada función de onda  $\psi(\vec{r})$  que depende de las coordenadas espaciales  $\vec{r} = x \hat{i} + y \hat{j} + z \hat{k}$ . La función de onda posee toda la información del sistema bajo estudio, dicha información se puede extraer realizando cálculos adicionales, bajo análisis estadístico. La ecuación de Schrodinger en estado estable para una partícula se muestra a continuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad (9)$$

Donde  $\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$  es la constante reducida de Planck,  $m$  es la masa de la partícula bajo estudio,  $V$  es la energía potencial del sistema,  $E$  es la energía del sistema,  $\psi$  es la función de onda; y,  $\nabla^2$  es el operador Laplaciano definido como:

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \quad (10)$$

La ecuación de Schrodinger, es un caso particular del problema de Sturm-Liouville, cuya solución es un conjunto de  $n$  funciones ortogonales  $\psi_n$  denominadas autofunciones, las cuales están asociadas a un conjunto de autofunciones  $E_n$  que son los valores de energía de cada  $n$ -ésimo estado. Es decir, la solución de la ecuación de Schrodinger nos permite obtener todos los valores discretos de energía del sistema, además de la función de onda para cada estado, el cual nos permite calcular otras variables físicas como posición o momentum.

Por supuesto, un sistema real, consta de muchas partículas del orden del número de Avogadro  $N_A = 6.022 \times 10^{23}$ , de tal forma que la ecuación a resolver sería la siguiente:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N_A} \frac{\nabla_i^2 \psi}{m_i} + V\psi = E\psi \quad (11)$$

Donde la función de onda depende de las coordenadas de cada partícula  $\psi = \psi(r_1, r_2, \dots, r_{N_A})$ . Esta ecuación diferencial es imposible de resolver analíticamente, por lo cual se utilizan diferentes métodos o aproximaciones que permiten obtener soluciones aproximadas. Entre los métodos más utilizados se encuentra la “teoría del funcional de densidad” (DFT por sus siglas en inglés: Density Functional Theory), este método consiste en encontrar una solución aproximada del comportamiento conjunto de todas las partículas.

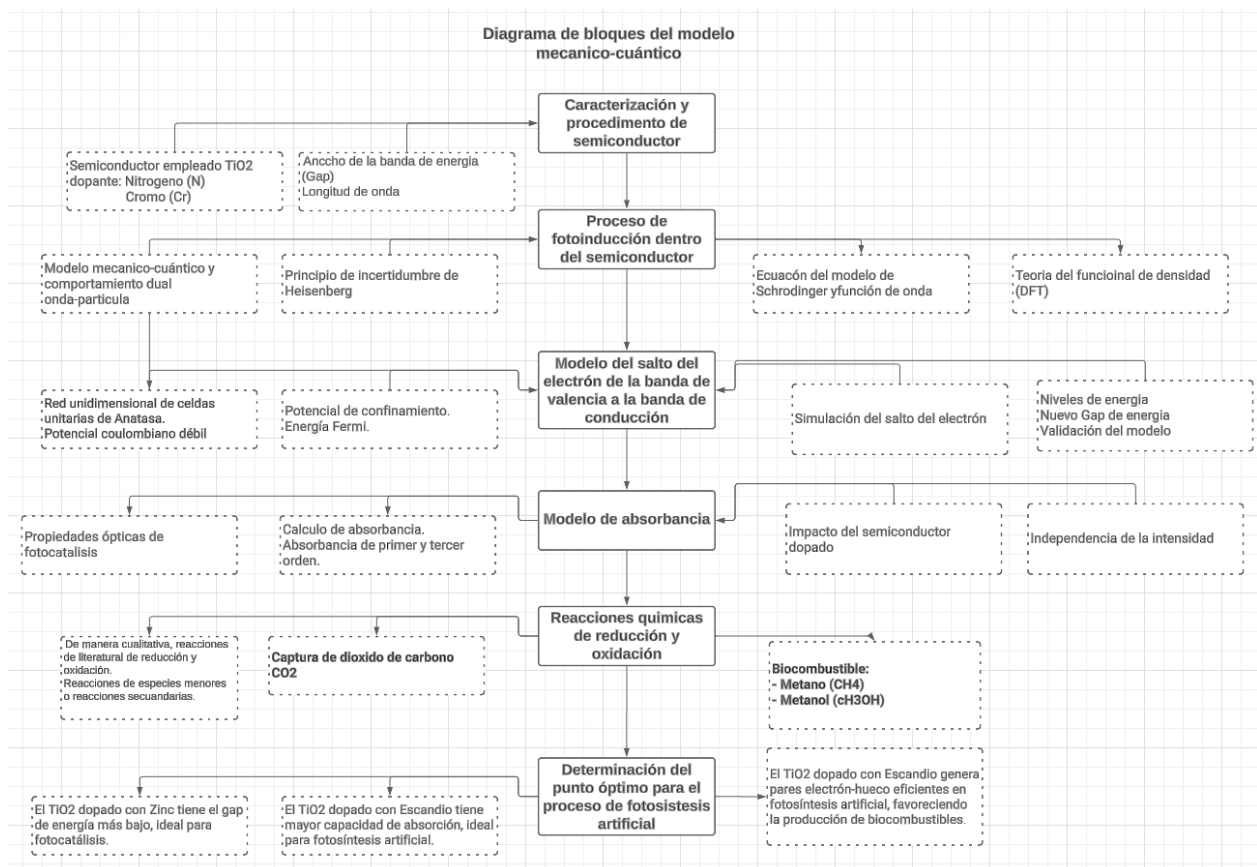
En el caso de los semiconductores, la solución para un sistema de  $n$  partículas resuelto mediante el método DFT, permite identificar los estados de energía que pertenecen a la banda de valencia, los estados de energía que pertenecen a la banda de conducción; y, el gap de energía que los separa.

### **2.2.3 Modelo para el salto de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción**

Teniendo en cuenta que el material objetivo de estudio en la mayoría de los procesos de fotocatalisis es el  $TiO_2$ , se considera construir y evaluar un modelo mecánico-cuántico de una red de  $TiO_2$  a la cual se le hace incidir una onda electromagnética (luz).

**Figura 13**

*Diagrama de bloques del modelo mecánico-cuántico*

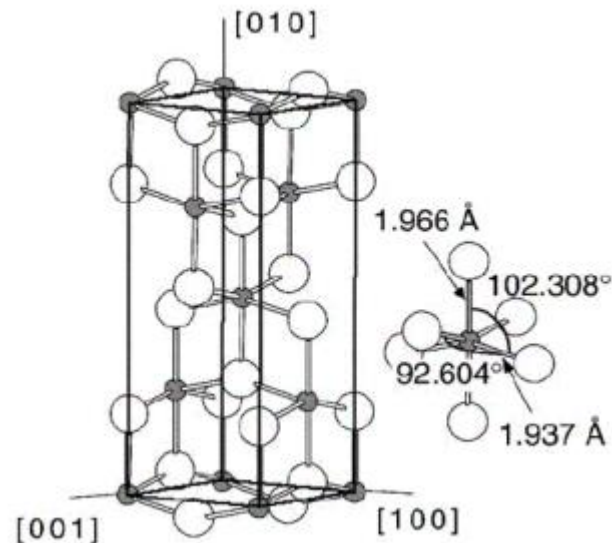


Fuente: Propia.

En primer lugar, se considera la forma cristalina tetragonal conocida como Anatasa del  $TiO_2$ , cuya celda unitaria está compuesta por átomos de titanio y Oxígeno, donde cada átomo de titanio está rodeado por seis átomos de oxígeno. Las dimensiones de la celda unitaria son  $a = b = 3.782 \text{ \AA}$  y  $c = 9.502 \text{ \AA}$  (Huamán Aguirre, 2014), las cuales están distribuidas en una red cristalina.

**Figura 14**

Forma cristalina de Anastasa del  $TiO_2$



Fuente: Huamán Aguirre, 2014.

Se realizan las siguientes consideraciones y simplificaciones:

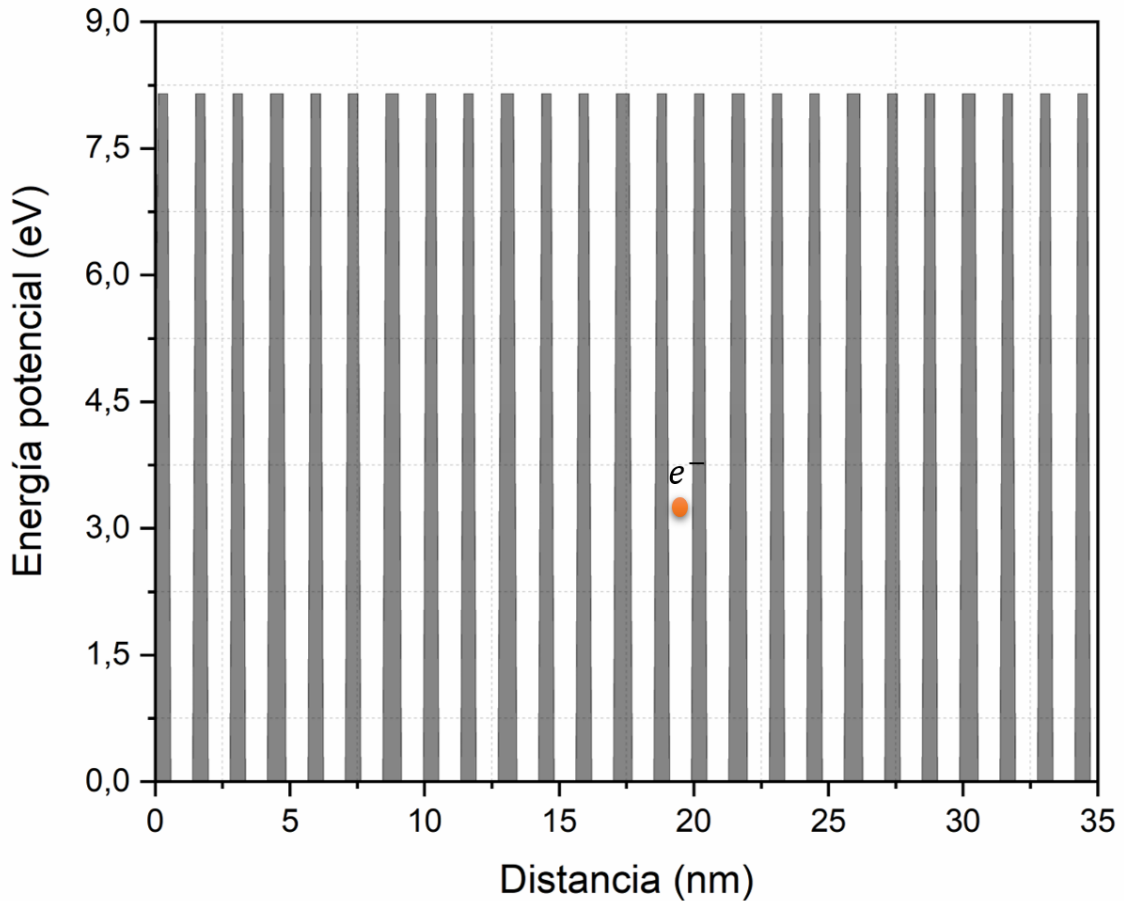
- Se considera una red cristalina unidimensional creada por celdas unitarias de anatasa con un tamaño de  $9.502 \text{ \AA}$ , ya que esta dimensión es la de mayor magnitud donde la nube electrónica estará mayormente distribuida.
- El potencial coulombiano de repulsión entre los electrones es mucho más débil que el potencial de confinamiento de estas en las celdas, por lo cual el potencial coulombiano es casi cero.
- Como el electrón se encuentra dentro de las celdas unitarias, los potenciales coulombianos de atracción con los núcleos de titanio y oxígeno pueden tratarse bajo la aproximación de masa efectiva, de tal forma que la masa efectiva del electrón se considera igual a  $m_{eff} = 5.9 m_o$ , donde  $m_o = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$  es la masa en reposo del electrón (Yahia, 1966).

El potencial de confinamiento es un sistema de pozos y barreras de potencial que simulan las celdas unitarias, de tal forma que la altura de la barrera es igual a la energía de Fermi del  $TiO_2$   $E_F = 8.15$  (Ashcroft & Mermin, 1976); esto debido a que la nube electrónica se encuentra confinada por debajo de esta energía, mientras que electrones que se encuentran en los estados de energía por encima de este valor se consideran en la banda de conducción (cuasi libres).

Con las anteriores consideraciones el potencial de confinamiento de la nube electrónica se puede observar en la Figura 15, cada pozo de potencial simula una celda unitaria de  $TiO_2$ , y las barreras de potencial son la energía de Fermi del mismo material. La nube electrónica se encuentra confinada en estos pozos de potencial, simulando la banda de valencia; los electrones pueden pasar entre cada pozo superando la barrera o por efecto de tunelamiento. En el caso de superar la barrera de potencial, el electrón debe absorber energía, tal que su energía cinética supere la barrera de potencial, para desplazarse entre los pozos (celdas unitarias); es decir, el electrón se encuentra en la banda de conducción.

### **Figura 15**

*Potencial de confinamiento de la nube electrónica dentro del  $TiO_2$*



Fuente: Propia

Ya definido el potencial de confinamiento, se construye el hamiltoniano (ecuación de Schrodinger) del sistema como:

$$-\frac{\hbar}{2m_{eff}} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \quad (12)$$

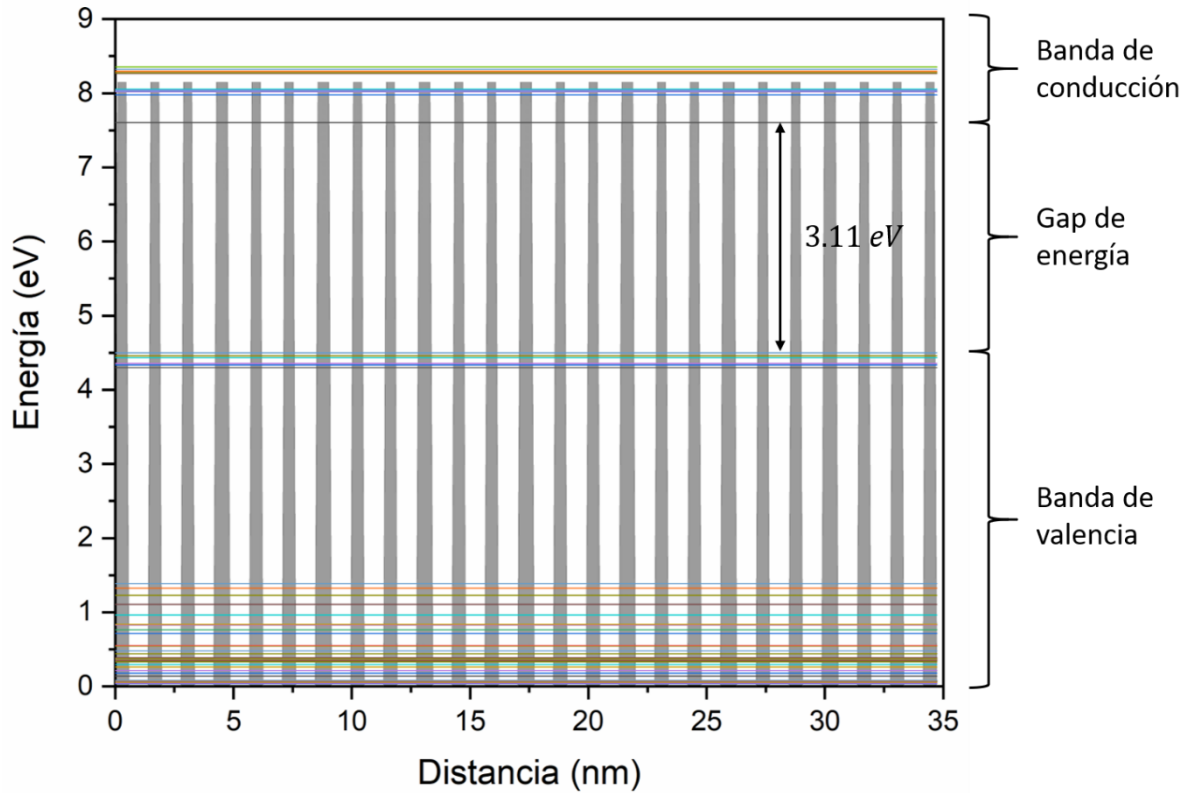
Esta ecuación diferencial se cumple para todos u cada uno de los electrones que conforman la nube electrónica, por lo cual todas van a compartir la misma solución, y van a poder estar en el mismo conjunto de niveles de energía; sin embargo, por el principio de exclusión de Pauli, en cada nivel de energía sólo podrá estar un solo electrón.

La solución al hamiltoniano se determinó mediante el software computacional physics COMSOL.

La solución del conjunto de niveles de energía al sistema se muestra en la figura 16. Se puede apreciar que existen tres zonas donde se agrupan los niveles de energía, de los cuales el grupo con niveles de energía semejantes o superiores a la energía de Fermi (8.15 eV) se considera la banda de conducción, pues con estos valores de energía los electrones son capaces de desplazarse entre las celdas unitarias del material con mayor facilidad, ya que superan la barrera de potencial o el efecto de tunelamiento es más probable. Esta banda de conducción está separada por un gap de energía con los otros grupos de niveles de energía, los cuales agrupados en uno sólo, correspondiente a la banda de valencia, donde los electrones están fuertemente confinados a las celdas unitarias de  $TiO_2$ . Identificando que el último nivel de energía de la banda de valencia es el septuagésimo nivel (70) con un valor de  $E_{70} = 4.50 \text{ eV}$ ; y, que el primer nivel de energía de la banda de conducción es el septuagésimo primero nivel (71) con un valor de  $E_{71} = 7.61 \text{ eV}$ ; el gap de energía es igual a  $E_g = 7.61 - 4.50 = 3.11 \text{ eV}$ . Este valor es semejante al valor encontrado en la literatura de  $3.2 \text{ eV}$  (Etacheri et.al. 2015), por lo cual el modelo predice con un error de 2.8% la energía necesaria para liberar un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción en un material de Anatasa  $TiO_2$ .

### **Figura 16**

*Niveles de energía de la nube electrónica en el material  $TiO_2$*



Fuente: Propia

Como ya se ha mencionado el gap de energía de la Anatasa (3.2 eV) corresponde al valor de energía mínimo necesario para que un fotón incidente excite a un electrón en la banda de valencia, para que pueda saltar a la banda de conducción. Este valor en particular corresponde a la radiación ultravioleta dentro del espectro electromagnético; es decir, longitudes de onda de alrededor de  $\lambda = 387.5 \text{ nm}$ . La radiación solar que incide sobre la Tierra posee fotones con estas longitudes de onda, adicionales a aquellos que inciden dentro del espectro visible, el cual se considera generalmente dentro de los siguientes rangos:

$$387.5 \text{ nm} < \lambda < 780 \text{ nm}$$

$$3.8462 \times 10^{14} \text{ Hz} < f < 7.7419 \times 10^{14} \text{ Hz} \quad (13)$$

$$1.59 \text{ eV} < E < 3.20 \text{ eV}$$

Un material con un gap de energía que coincida con el espectro visible del espectro electromagnético es de mayor interés a nivel ambiental, puesto que se pueden lograr procesos de fotocátalisis utilizando energía renovable (luz solar incidente). Por esta razón, varias investigaciones se han centrado en encontrar materiales con estas características, entre ellos, está el dióxido de titanio dopado con otros elementos metales y no metales.

Con el fin de simular el comportamiento energético de la Anatasa con algún dopante, se consideró colocar un átomo de un elemento dopante dado en la mitad del pozo de potencial, de esta forma se añadieron los potenciales coulombianos de atracción (electrón-dopante) y de repulsión (dopante dopante) al Hamiltoniano de la siguiente forma:

$$-\frac{\hbar}{2m_{eff}} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi - \sum_{j=1}^{N-1} \frac{K_e e^2}{|x - \xi_j|} \psi + \frac{(N-2)(K_e e)^2}{4\pi\epsilon_o(a+b)} \psi = E\psi \quad (14)$$

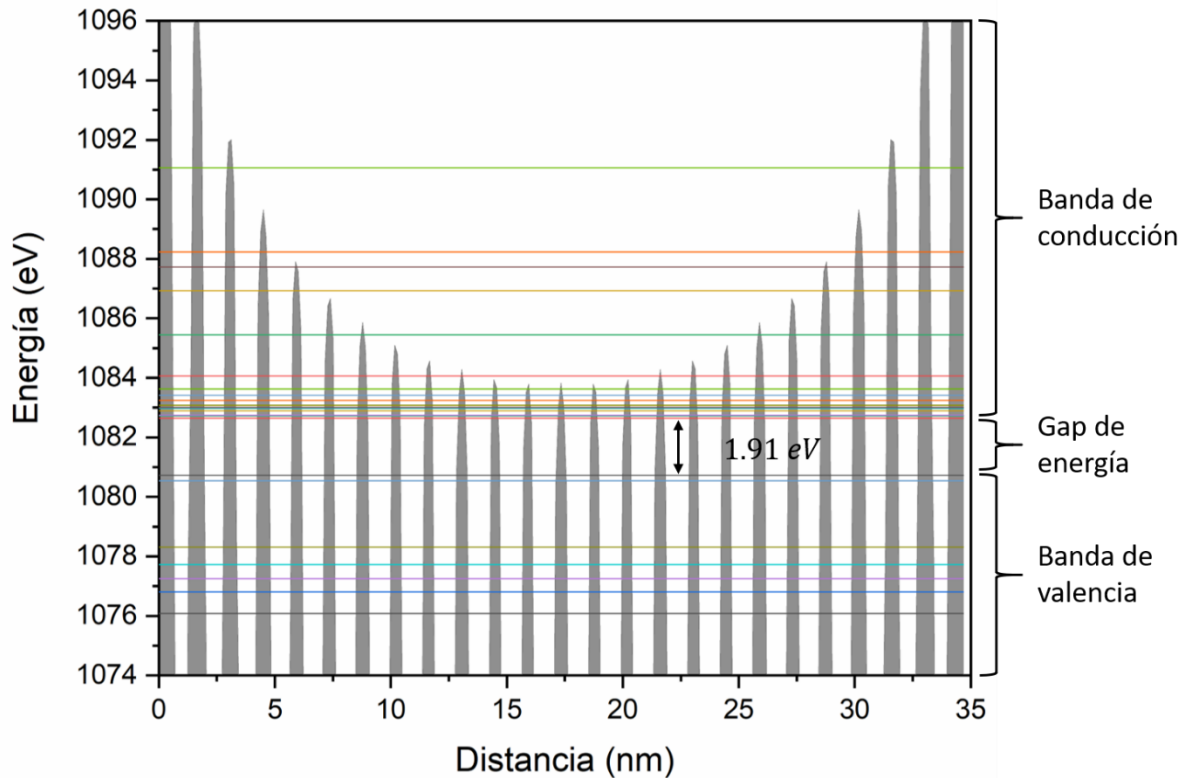
Donde  $K_e$  es el número atómico del dopante,  $N$  es el número de barreras en el potencial,  $e$  es la carga del electrón; y,  $\xi$  es la posición de cada dopante.

Añadiendo estos nuevos términos se realizaron simulaciones en el software COMSOL multiphysics para un dopante de Nitrógeno ( $K_e = 7$ ). En la figura 13 se muestra como el potencial se ve deformado con respecto al original (sin dopantes), modificando los niveles de energía del sistema, de tal forma que el último nivel de energía de la banda de valencia se acerque a la banda de conducción haciendo que el nuevo gap de energía sea de  $E_g = 1.91 \text{ eV}$ ; este valor corresponde a la energía de un fotón incidente dentro del espectro visible, cercano al rojo.

Este resultado es consecuente con investigaciones realizadas con  $TiO_2$  dopado, donde se ha observado una disminución del gap de energía de estos materiales, para aplicaciones de fotocátalisis con luz en el espectro visible.

### **Figura 17**

*Niveles de energía de la nube electrónica en el material  $TiO_2$  dopado con Nitrógeno*



Fuente: Propia

Análogamente, se realizó una simulación con núcleos de Cromo ( $K_e = 24$ ) como dopante. Los resultados se muestran en la figura 17, donde se puede observar que el gap de energía se ha modificado ahora a un valor de  $E_g = 2.30 \text{ eV}$  debido a la perturbación en el potencial que modifica los niveles de energía de los electrones; este gap de energía sigue estando dentro del rango del espectro visible, lo cual es concordante con lo reportado en la literatura.

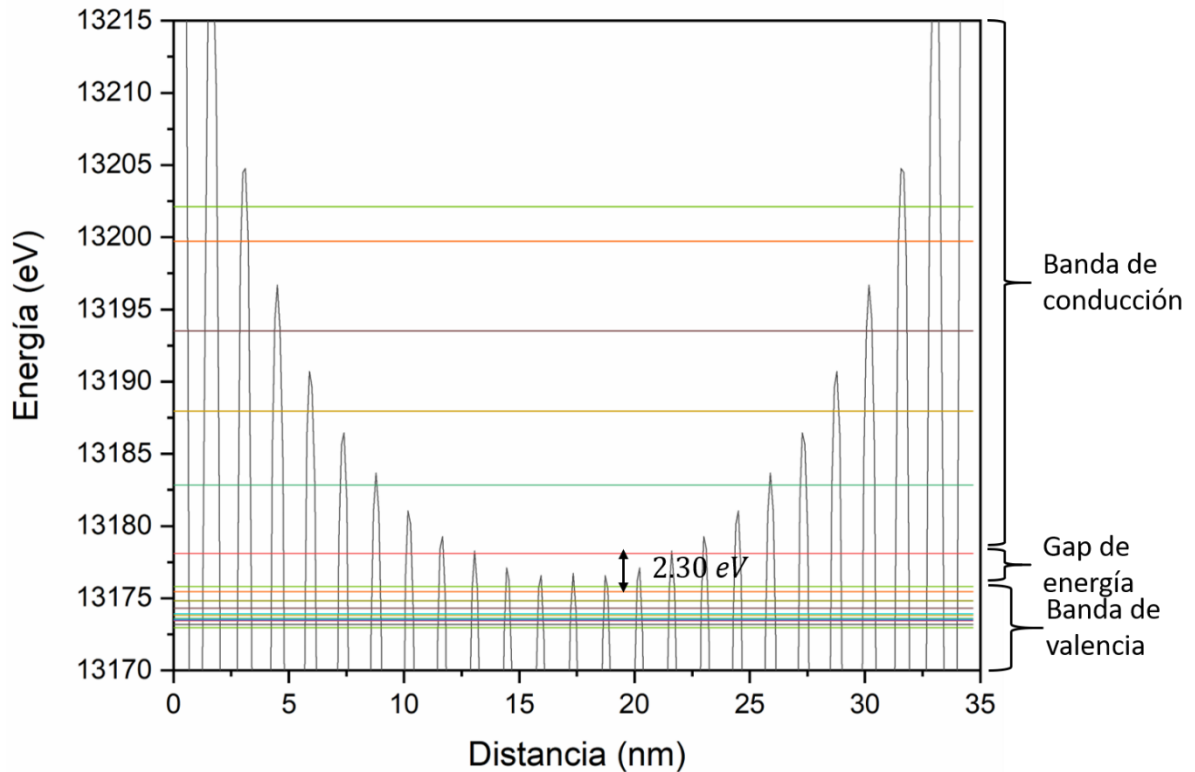
Estos resultados muestran que el modelo propuesto es capaz de predecir de manera cualitativa y cuantitativa la respuesta energética de un sistema de  $\text{TiO}_2$  dopado con diferentes elementos, buscando una mejor respuesta frente al espectro que incide sobre la Tierra en mayor proporción; y, específicamente en el municipio de Pasto.

Para analizar el espectro solar que llega a la ciudad de Pasto, se utilizaron datos de la (NASA, 2023) de radiación solar. Se obtuvieron datos de los flujos solares de todo el año 2023, se consideró la variable de Irradiancia descendente de onda corta en toda la superficie del cielo la

cual tiene un promedio de 15,58 (MJ/m<sup>2</sup>/día). Este valor indica la cantidad de energía solar que incide sobre una superficie horizontal por unidad de área y tiempo.

**Figura 18**

Niveles de energía de la nube electrónica en el material TiO<sub>2</sub> dopado con Cromo



Fuente: Propia

#### 2.2.4. Modelo de absorbanca

Ya que el proceso de liberar al electrón de la banda de valencia hacia la banda conducción involucra la colisión con fotones en fotocatalisis, es pertinente evaluar propiedades ópticas involucradas en este proceso fenomenológico. En este sentido, se consideró cuantificar la radiación que absorbe (absorbancia) un sistema de TiO<sub>2</sub> dopado con diferentes elementos para la longitud de onda asociada al gap de energía del semiconductor.

Debido a que se trata de un proceso que ocurre a nivel microscópico, se calcula la absorbancia utilizando las funciones de onda y energías obtenidas del modelo de liberación de electrón, de acuerdo con las siguientes ecuaciones (Duque et al., 2013).

$$\alpha^{(1)}(E) = E \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \frac{|M_{ij}|^2 \sigma_v \Gamma_{ij}}{(E_g - E)^2 + (\hbar \Gamma_{ij})^2} \quad (15)$$

$$\alpha^{(3)}(E, I) = -E \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \left( \frac{I}{2\epsilon_0 n c} \right) \frac{|M_{ij}|^2 \sigma_v \Gamma_{ij}}{[(E_g - E)^2 + (\hbar \Gamma_{ij})^2]^2} \left[ 4|M_{ij}|^2 - \frac{\delta M [3E_g^2 - 4EEg + E^2 - \hbar^2 \Gamma_{ij}^2]}{E_g^2 + (\hbar \Gamma_{ij})^2} \right] \quad (16)$$

Donde  $\alpha^{(1)}$  es la absorbancia de primer orden o lineal,  $\alpha^{(3)}$  es la absorbancia de tercer orden o no lineal. Estas dos últimas contribuyen al valor de la absorbancia; es decir:

$$\alpha(E, I) = \alpha^{(1)}(E) + \alpha^{(3)}(E, I) \quad (17)$$

Adicionalmente,  $i, j$  son los estados asociados al salto de la banda de valencia (i) a la banda de conducción (j),  $\delta M = (M_{jj} - M_{ii})^2$ ,  $\mu$  es la permeabilidad magnética del sistema,  $\epsilon_R = \epsilon_0 \epsilon$  es la permitividad eléctrica del sistema,  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica en el vacío,  $\epsilon$  es el valor de la constante dieléctrica del sistema,  $n$  es el índice de refracción,  $\Gamma_{ij}$  es el inverso del tiempo de relajación,  $\sigma_v$  es la densidad electrónica del sistema; y,  $I$  es la intensidad o irradiancia óptica incidente.

Para realizar los cálculos se consideraron los valores de la tabla 8.

### Tabla 8

Valores de los parámetros utilizados en la absorbancia lineal y no lineal

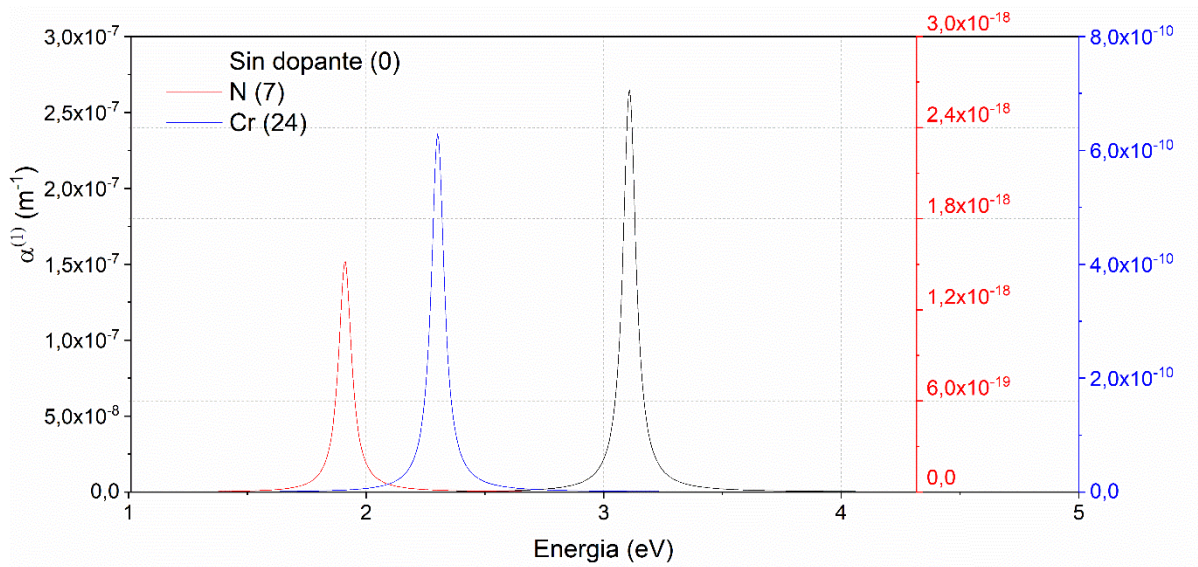
Parámetro	Valor
$\sigma_v$	$5 \times 10^{22} \text{ 1/m}^3$ (Duque et al., 2013)
$n$	2.55 (ALPA Powder, 2021)
$\epsilon$	48(OFC, 2018)
$\epsilon_0$	$8.8541 \times 10^{-12} \text{ N m}^2/\text{C}^2$
$\mu$	$4\pi \times 10^{-7} \text{ T m /A}$
$e$	$1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
$\Gamma_{ij}$	0.5 1/ps

Para determinar la intensidad óptica incidente, se analizó el espectro solar que llega a la ciudad de Pasto utilizando datos de la NASA, (2023) de radiación solar. Se obtuvieron datos de los flujos solares de todo el año 2023 considerando la variable de Irradiancia descendente de onda corta en toda la superficie del cielo la cual tiene un promedio de 15,58 ( $\text{MJ}/\text{m}^2/\text{día}$ ). Este valor indica la cantidad de energía solar que incide sobre una superficie horizontal por unidad de área y tiempo; es decir, el valor de intensidad requerido para los cálculos.

La figura 19 muestra la absorbancia de primer orden o lineal calculada para un sistema de  $TiO_2$  y sus aleaciones con Nitrógeno y Cromo, se puede observar como el pico representativo de cada curva está caracterizado por el gap de energía ( $E_g$ ) del semiconductor. E acuerdo a la figura W el material de  $TiO_2$  dopado con Nitrógeno posee el gap de energía más bajo, haciéndolo ideal para aplicaciones de fotocatalisis con luz en el espectro visible; sin embargo, su capacidad de absorber radiación es muy baja, del orden de  $10^{-18} \text{ m}^{-1}$ , comparándola con la absorbancia del material sin dopante ( $\sim 10^{-7} \text{ m}^{-1}$ ), por lo cual esta aleación va a afectar negativamente el rendimiento del proceso a pesar de su bajo gap de energía. Por otra parte, una aleación con Cromo como dopante, se obtienen un gap de energía no tan bajo pero su capacidad de absorción es significativamente más alta, del orden de  $10^{-10} \text{ m}^{-1}$ , haciéndolo un candidato más idóneo para aplicaciones de fotosíntesis artificial.

**Figura 19**

Absorbancia de primer orden  $\alpha^{(1)}$  para Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y sus aleaciones con Nitrógeno y Cromo

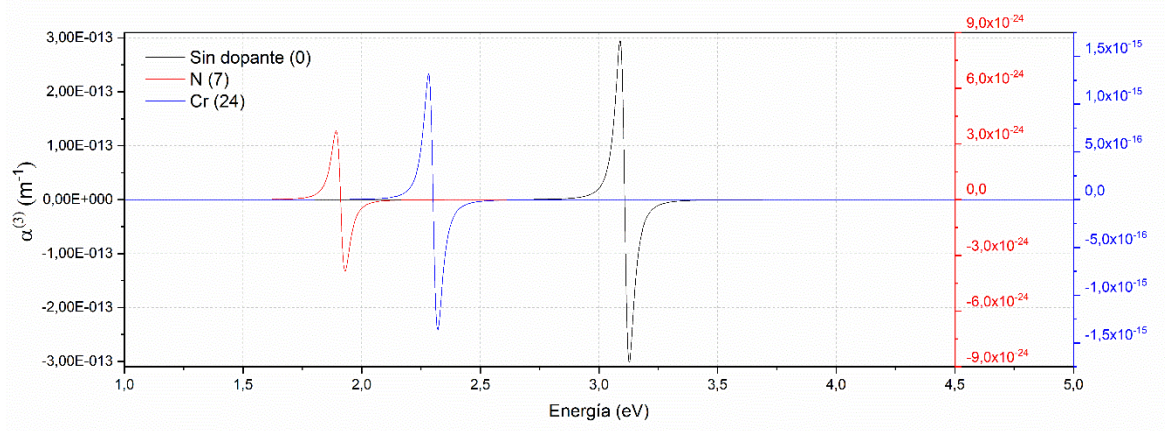


Fuente: Propia

Análogamente, se realizó el cálculo para la absorbancia no lineal (orden 3) para Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y sus aleaciones con Nitrógeno y Cromo. La figura W1, muestra como la contribución no lineal de la absorbancia sigue un patrón similar a la contribución lineal (figura 20); sin embargo, esta contribución es 3 órdenes de magnitud (10<sup>-3</sup>) menor, por lo cual la contribución es lineal es mucho más significativa, provocando que la capacidad de absorber radiación por parte de los semiconductores sea casi independiente de la intensidad; es decir, que las condiciones de irradiancia de la ciudad de Pasto no son determinantes en el proceso de fotocátalisis evaluado.

### Figura 20

Absorbancia de primer orden  $\alpha^{(3)}$  para Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y sus aleaciones con Nitrógeno y Cromo



Fuente: Propia

### 2.2.5. Reacciones químicas redox y de oxidación antes y después del salto del electrón a la banda de conducción

El proceso de fotocatalisis involucra una amplia gama de reacciones químicas que varían según el material semiconductor empleado. Estas reacciones, que abarcan desde procesos redox hasta oxidación-reducción, han sido objeto de numerosos estudios en el campo. Por ejemplo, investigaciones han demostrado que, durante la fotocatalisis del agua bajo la influencia de la luz, los electrones generados pueden desempeñar un papel crucial en la reducción del agua, dando como resultado la producción de hidrógeno molecular ( $H_2$ ) (Y. Wang et al., 2020). Del mismo modo, se ha observado que el  $CO_2$  puede ser reducido para sintetizar compuestos orgánicos valiosos, como el metano  $CH_4$ .

Además, se ha destacado la capacidad de la fotocatalisis para oxidar contaminantes orgánicos, convirtiéndolos en productos menos nocivos para el medio ambiente. En este contexto, los pares electrón-hueco generados durante la fotocatalisis pueden iniciar reacciones de oxidación que transforman los contaminantes en formas menos tóxicas, como dióxido de carbono y agua.

En la mayoría de los estudios sobre fotocatalisis, se investiga la división fotoquímica del agua, un proceso fundamental que implica una serie de reacciones de reducción y oxidación. Durante las reacciones de reducción del agua, los electrones y huecos generados por la absorción de luz pueden catalizar la formación de ( $H_2$ ) e iones hidróxido ( $OH^-$ ) (Hafeez, Lakhera, Karthik, et al.,

2018). Por otro lado, en las reacciones de oxidación del agua, se generan electrones y protones, liberando oxígeno molecular como producto final.

Además, se ha observado en ciertos casos la reducción del oxígeno, donde los electrones en la capa de conducción pueden desempeñar un papel en la formación de radicales superóxidos ( $O_2^-$ ) o peróxido de hidrógeno ( $H_2O_2$ ) (Zeng et al., 2018). Estas reacciones desempeñan un papel crucial en la aplicación de la fotocátalisis para la producción de energía limpia y la eliminación de contaminantes, destacando así la importancia de comprender en detalle los mecanismos subyacentes a estas transformaciones químicas.

Durante la fotocátalisis en presencia de  $TiO_2$ , la presencia de electrones en la capa de conducción induce una serie de reacciones cruciales. Por un lado, estos electrones pueden catalizar la reducción del oxígeno adsorbido en la superficie del  $TiO_2$ , generando radicales ( $O_2^-$ ) y ( $H_2O_2$ ). Estas especies altamente reactivas tienen la capacidad de oxidar compuestos orgánicos presentes en el medio acuoso, lo que resulta en la descomposición de contaminantes orgánicos como el formaldehído en productos menos perjudiciales como dióxido de carbono y agua (Maria Dalcin Fornari et al., 2016a)

Por otro lado, cuando el  $TiO_2$  es dopado con materiales o compuestos, las reacciones que suceden son de manera adicional según el dopante empleado, por ejemplo, cuando el  $TiO_2$  es dopado con Fe, se observa una dinámica interesante después de que los electrones salten a la banda de conducción. En este caso particular, los electrones pueden moverse libremente a través del material y transferirse a las impurezas de Fe. Esta transferencia facilita la separación de los huecos en la banda de valencia, permitiendo que los electrones participen en reacciones de reducción, como la conversión de protones en ( $H_2$ ), mientras que los huecos en la banda de valencia pueden participar en reacciones de oxidación, como la formación de oxígeno molecular (Sun et al., 2013).

Para evitar la recombinación de pares electrón-hueco, se ha observado que los electrones liberados en la banda de conducción pueden ser capturados por impurezas como el Fe o por partículas de Ag depositadas en la superficie del  $TiO_2$ . Una vez que los electrones son

transferidos a estas impurezas o atrapados en la superficie del catalizador, pueden reaccionar con protones para formar ( $H_2$ ), el producto deseado de la reacción de división del agua. Este proceso ilustra cómo la ingeniería de materiales puede modular eficazmente las reacciones durante la fotocatalisis para mejorar su eficiencia y selectividad.

Estos hallazgos resaltan cómo el dopaje y la deposición de impurezas en semiconductores como el  $TiO_2$  pueden mejorar la eficiencia de la fotocatalisis al facilitar la separación de cargas, evitar la recombinación de electrones y huecos, y promover las reacciones de reducción y oxidación necesarias para la generación de hidrógeno a partir de la división del agua.

La utilización de estos dopajes en el semiconductor es esenciales dado a la importancia de la transferencia de electrones, lo cual facilita las reacciones de reducción y mejora la eficiencia de la producción de hidrógeno en el sistema de fotocatalisis (Fiss et al., 2020).

Es importante tener en cuenta que al utilizar diferentes compuestos y materiales algunos de estos pueden ser tóxicos para ciertos organismos vivos como por ejemplo el compuesto 3DOM CdS/ *g*- $ln_2O_3$ -  $TiO_2$  y contribuir a la generación de estrés oxidativo en sistemas biológicos (Huo et al., 2023). Por lo tanto, es esencial evaluar y controlar los posibles efectos adversos de estos radicales en el medio ambiente y en la salud.

Estos hallazgos destacan cómo el dopaje de semiconductores puede mejorar la eficiencia de la fotocatalisis al facilitar la separación de cargas, promover las reacciones redox necesarias para la generación de hidrógeno y otros productos, y evitar la recombinación de electrones y huecos que puede disminuir la efectividad del proceso.

De manera general después de que un electrón salta a la banda de conducción en un fotocatalizador como el  $TiO_2$  activado por luz visible, se inician una serie de reacciones fundamentales para el proceso de fotocatalisis. Estas reacciones se enfocan en la formación y utilización eficiente de especies oxidantes reactivas (ROS) que desempeñan un papel crucial en la degradación de contaminantes orgánicos y en otras aplicaciones ambientales (Etacheri et al., 2015).

Una de las principales reacciones es la reducción de  $O_2$  a radicales superóxidos ( $\bullet O_2^{\bullet-}$ ), donde los electrones en la banda de conducción pueden reducir el oxígeno molecular ( $O_2$ ) para formar radicales superóxidos. Estos radicales son altamente reactivos y pueden desempeñar un papel importante en la degradación de contaminantes orgánicos. Además, se produce la formación de oxígeno singlete ( $^1O_2$ ) como una reacción adicional de los radicales superóxidos con los huecos en la banda de valencia, generando otra especie altamente reactiva que puede participar en reacciones de oxidación avanzada (Etacheri et al., 2015).

Después de estas reacciones, se generan radicales hidroxilos ( $\bullet HO\bullet$ ) y peróxido de hidrógeno ( $H_2O_2$ ), donde los huecos en la banda de valencia pueden reaccionar con agua adsorbida en la superficie del fotocatalizador para formar radicales hidroxilo y peróxido de hidrógeno. Estas especies son conocidas por su capacidad para degradar una amplia gama de contaminantes orgánicos (Kumaravel et al., 2019; Taheri Najafabadi & Taghipour, 2012). Además, se producen reacciones adicionales en las que las especies reactivas generadas, como los radicales hidroxilos y el peróxido de hidrógeno, pueden participar en reacciones secundarias que conducen a la degradación completa de los contaminantes orgánicos en productos más simples y menos tóxicos.

#### ***2.2.6. Captura de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) en la producción de biocombustible***

En la literatura se evidencia indirectamente la relevancia del  $CO_2$  en el proceso de fotocátalisis y su potencial impacto en la producción de biocombustibles mediante la fotosíntesis artificial. El  $CO_2$  desempeña un papel crucial en la captura y conversión de compuestos durante las reacciones fotocatalíticas. La captura de  $CO_2$  como materia prima, su participación en reacciones de reducción para la generación de compuestos orgánicos, y su potencial influencia en la producción de biocombustibles sostenibles a partir de fuentes renovables, destacan la importancia de considerar el  $CO_2$  como un componente clave en la fotosíntesis artificial con miras a la producción de biocombustibles limpios y respetuosos con el medio ambiente (Ibrahim et al., 2020).

La capacidad de los materiales fotocatalíticos que absorben la luz visible y desencadenan reacciones químicas, siguieren un potencial para la captura y conversión de CO<sub>2</sub> en productos orgánicos. La actividad fotocatalítica de los materiales dopados en presencia de luz visible plantea la posibilidad de catalizar reacciones de reducción del CO<sub>2</sub> para la producción de compuestos orgánicos, incluidos potenciales biocombustibles derivados de fuentes renovables. (Serra et al., 2016).

En la interacción del CO<sub>2</sub> en el proceso de fotocátalisis, se destaca que la presencia de oxígeno y CO<sub>2</sub> en el ambiente es esencial para la formación de defectos de oxígeno en la superficie del TiO<sub>2</sub>, lo que influye en la actividad fotocatalítica, lo que podría tener implicaciones en la producción de compuestos orgánicos y biocombustibles (Hou et al., 2019a).

La presencia de TiO<sub>2</sub> mejora la eficiencia en la transferencia de electrones, lo que favorece la producción de CO en lugar de CH<sub>4</sub> durante la reducción de CO<sub>2</sub>. Asimismo, se destaca que la estructura de los catalizadores es esencial para la selectividad de los productos obtenidos, lo que sugiere que la estructura de los materiales fotocatalíticos y los componentes utilizados para la dopación desempeña un papel fundamental en la producción de biocombustibles a partir de la captura y conversión de CO<sub>2</sub> (Y. Wang et al., 2020).

En estudios como Hafeez, Lakhera, Bellamkonda, et al. (2018.p.15), se menciona una tasa de producción de hidrógeno de 23,143 mmol g<sup>-1</sup> h<sup>-1</sup> en el nanocompuesto utilizado con su optimización. Estos valores indican la eficiencia del proceso de conversión de CO<sub>2</sub> en hidrógeno utilizando nanocompuestos fotocatalíticos. Por otra parte, en el estudio de Tobaldi et al. (2021.p.14), los nanomateriales exhiben una producción destacada de H<sub>2</sub>, alcanzando valores de hasta 9600 μmol·g<sup>-1</sup> para los nanomateriales híbridos DMSTNs, lo que sugiere una influencia positiva del CO<sub>2</sub> en la generación de este gas.

Por lo tanto, la utilización efectiva del CO<sub>2</sub> en este proceso demuestra su relevancia en la producción sostenible de biocombustibles a partir de fuentes renovables, contribuyendo así a la mitigación del cambio climático y a la obtención de energía limpia. La captura y conversión de CO<sub>2</sub> en la producción de biocombustibles mediante la fotocátalisis representan un enfoque

prometedor para la generación de energía ecológica y sostenible, destacando la importancia de considerar el CO<sub>2</sub> como un componente clave en la fotosíntesis artificial con miras a la obtención de biocombustibles respetuosos con el medio ambiente.

### ***2.2.7. Determinación del punto óptimo para el proceso seleccionado de fotosíntesis artificial***

Teniendo en cuenta la figura 20, los resultados del modelo matemático propuesto sugieren considerar las variables tipo dopante y absorbancia como determinantes del punto óptimo de operación, ya que el tipo de dopante modifica el gap de energía, siendo más probable obtener mayor cantidad de pares electrón-hueco para gaps en el espectro visible, además de obtener mayor cantidad de biocombustible de acuerdo a lo mostrado en (Kreft et al., 2020); por otro lado, variables como la temperatura, la irradiación y la humedad no parecen ser tan significativas según la literatura consultada y los resultados obtenidos. Es importante destacar que la temperatura de fusión del dióxido de titanio es de aproximadamente 1843 grados Celsius (FORMULACIÓN QUÍMICA, 2023), lo que indica que el modelo propuesto podría ser implementado a temperatura ambiente. Además, es relevante mencionar que los estados de materia de los materiales de escandio y zinc, utilizados en el modelo, son sólidos a temperatura ambiente (Ptable, 2023), lo que facilita su manipulación y aplicación en procesos de fotosíntesis artificial para la producción de biocombustibles.

Debido a que el proceso de generación par-hueco en el material semiconductor, y sus propiedades ópticas son considerables en las reacciones de oxidación-reducción que conllevan a la formación de biocombustible; se realizó un proceso de optimización sobre el modelo de liberación del electrón.

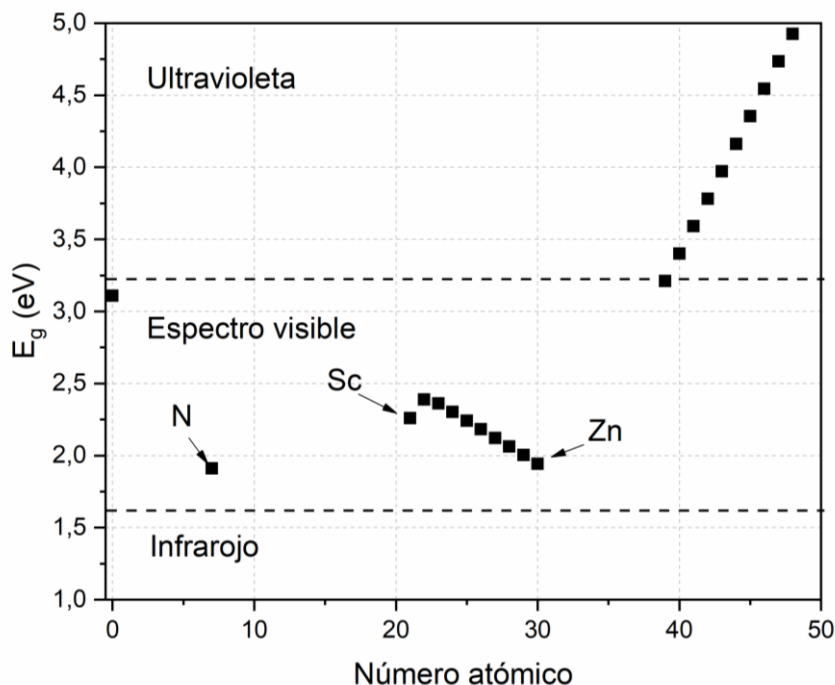
La optimización consistió en calcular el gap de energía para el semiconductor  $TiO_2$  dopado con diferentes metales transicionales de los periodos 4 y 5 de la tabla periódica (figura 18), con el fin de establecer cuál es el material con el gap de energía más bajo dentro del espectro visible. Los resultados mostrados en la figura 18, muestran que el  $TiO_2$  dopado con Zinc (Zn) tiene el gap de energía más bajo (1.94 eV) después del Nitrógeno (1.91 eV) siendo el candidato ideal para la

fotocatálisis; es decir el punto óptimo de operación es utilizar un material de  $TiO_2$  dopado con  $Zn$  durante la irradiación.

Sin embargo, la optimización debe considerar la variable absorbancia ( $\alpha$ ) ya que se había establecido que el gap de energía no es proporcional a la capacidad de absorción de radiación electromagnética por parte del material semiconductor, por lo cual se evaluó la absorbancia para cada material  $TiO_2$  dopado con los diferentes metales de transición considerados (Figura 21).

**Figura 21**

*Gap de energía para  $TiO_2$  dopado con diferentes materiales de transición del periodo 4 y 5*



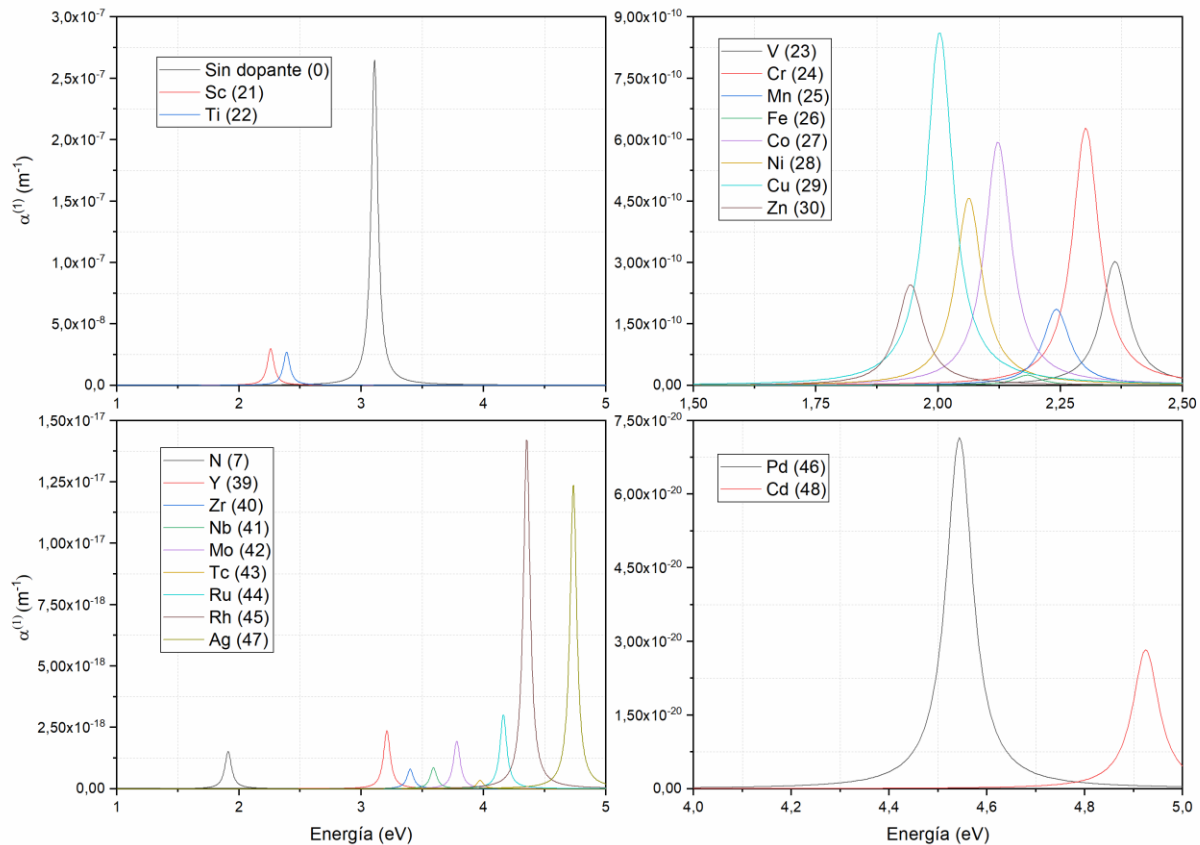
Fuente: Propia

En el panel superior derecho de la figura 21 se puede observar que la absorbancia para el  $TiO_2$  dopado con Zinc es del orden de  $10^{-10} m^{-1}$  el cual es un valor relativamente alto; sin embargo, existen dopantes que logran una capacidad de absorbancia mayor como el Escandio (Sc), con un pico de absorbancia del orden de  $10^{-8} m^{-1}$ , lo cual lo posiciona como un mejor candidato, considerando que también su gap de energía se encuentra dentro del espectro visible.

Es claro de la figura 21 que los demás dopantes no logran una absorbancia relevante para ser considerados, por lo cual el principal resultado de este proceso de optimización donde se considera el menor gap de energía y a la vez el mayor pico de absorbancia, es que un material semiconductor de  $TiO_2$  dopado con Escandio (Sc), genera pares electrón-hueco con mayor rendimiento en procesos de fotosíntesis artificial con luz en el espectro visible, lo cual permitiría lograr mejores resultados en las reacciones de oxido-reducción cuyo compuesto final son biocombustibles.

**Figura 22**

*Absorbancia lineal  $\alpha^{(1)}$  para  $TiO_2$  y sus aleaciones con diferentes metales de transición de los periodos 4 y 5 de la tabla periódica*



fuelle: Propia

Tras analizar detalladamente los resultados obtenidos en el estudio y considerando las variables dopantes evaluadas, se determinó que el punto óptimo de operación para la producción de biocombustibles mediante fotosíntesis artificial se encuentra en el escandio; esto es, el punto de operación óptimo es utilizar un material  $TiO_2$  dopado con  $Sc$  ya que su gap de energía permite obtener pares electrón-hueco en el espectro visible con una actividad óptica adecuada. Este hallazgo se fundamenta en el número atómico del escandio, el cual ha demostrado ser crucial en la optimización del proceso. Al ser un material semiconductor dopado con escandio, se pudo observar un rendimiento sobresaliente en la generación de pares electrón-hueco, lo que favorece significativamente la eficiencia de las reacciones de oxidación-reducción necesarias para la producción de biocombustibles. Por lo tanto, el escandio se posiciona como el elemento clave en la ruta propuesta, destacando su relevancia en la obtención de resultados exitosos en la conversión de dióxido de carbono en combustibles sostenibles.

### **3. Conclusiones**

La investigación sobre la fotocatalisis del dióxido de carbono para la producción de biocombustibles es un área emergente que intenta emular la fotosíntesis natural utilizando materiales y dispositivos que capturan la luz solar. Este estudio ha seleccionado un método basado en la fotosíntesis artificial para la producción de biocombustibles a partir de CO<sub>2</sub> utilizando un algoritmo de minería de datos. Se ha realizado una revisión sistemática de la literatura en bases de datos científicas especializadas, como Sciencedirect y ACS catalysis, que proporcionan artículos relevantes y actualizados. Mediante el uso de técnicas bibliométricas en el software VOSviewer, se han analizado estos artículos, creando redes o mapas que representan la coocurrencia y la relevancia de los términos clave. Estos mapas permiten visualizar las tendencias, los avances y los desafíos en la investigación de la fotocatalisis del dióxido de carbono, destacando especialmente los factores ambientales, los materiales y los dispositivos implicados en el proceso de conversión de la energía solar en biocombustibles.

La ruta que se utilizó en el proceso de fotosíntesis artificial a partir de la minería de datos demostró que la producción de biocombustibles (metano y metanol) mediante fotosíntesis artificial a partir de la captura de CO<sub>2</sub>, reveló el potencial de esta tecnología para contribuir a la sostenibilidad ambiental y la generación de energía limpia. Los estudios revisados resaltan la importancia de la interacción del CO<sub>2</sub> en el proceso de fotocatalisis, demostrando cómo la captura eficiente de este gas de efecto invernadero puede conducir a la producción de compuestos orgánicos, como el hidrógeno, esencial para la obtención de biocombustibles. La utilización de fotocatalizadores y materiales híbridos ha demostrado ser efectiva en la conversión de CO<sub>2</sub> en combustibles limpios y sostenibles, destacando la relevancia de considerar el CO<sub>2</sub> como un componente clave en la fotosíntesis artificial para la producción de biocombustibles respetuosos con el medio ambiente.

El modelo presentado en este documento ofrece una perspectiva innovadora y prometedora para mejorar la eficiencia de la fotocatalisis en aplicaciones ambientales. Al reducir el gap de energía necesario para la activación del proceso, se logra una mayor utilización de la energía

solar incidente, lo que resulta en una descomposición más efectiva de contaminantes en el aire y el agua. Este enfoque no solo tiene el potencial de mejorar la calidad ambiental, sino que también destaca la importancia de la investigación en semiconductores dopados para aplicaciones prácticas y sostenibles.

En el desarrollo de la propuesta, se ha demostrado la importancia del modelo de absorbancia en la evaluación de las propiedades ópticas de los semiconductores dopados. La utilización de ecuaciones que relacionan la absorbancia lineal y no lineal con parámetros como la densidad electrónica, el índice de refracción y la intensidad óptica incidente ha permitido calcular de manera precisa la capacidad de absorción de radiación electromagnética por parte de los materiales estudiados. Además, la optimización del modelo ha revelado la influencia significativa del gap de energía y la capacidad de absorción en la eficiencia de la fotosíntesis artificial. Estos resultados resaltan la relevancia de considerar aspectos ópticos en el diseño de sistemas fotocatalíticos para la producción sostenible de biocombustibles.

La determinación del material objetivo para fotosíntesis artificial ha sido un proceso fundamental en la propuesta de una ruta para la producción de biocombustibles a partir de la captura de CO<sub>2</sub>, dado que se encontró ese punto de optimización. A través de la evaluación de diferentes semiconductores dopados con metales de transición, se ha identificado que el dopado con Zinc y Escandio presenta ventajas significativas en términos de gap de energía y capacidad de absorción de radiación en el espectro visible. Estos hallazgos sugieren que los materiales dopados con Escandio son los más adecuados para generar pares electrón-hueco con alto rendimiento en procesos de fotosíntesis artificial. La combinación de un gap de energía reducido y una alta absorbancia de luz solar posiciona a estos materiales como candidatos prometedores para impulsar la producción de biocombustibles de manera eficiente y sostenible.

#### **4. Recomendaciones**

Este estudio muestra la relevancia de emplear diversas fuentes de búsqueda y herramientas de análisis para obtener una perspectiva integral y actualizada sobre el estado de la investigación en el ámbito de la fotocatalisis de dióxido de carbono para la producción de biocombustibles. Asimismo, se resalta la utilidad del software VOSviewer para visualizar y analizar las relaciones entre los términos clave de los documentos obtenidos, lo que puede ofrecer información valiosa para la toma de decisiones en la investigación y el desarrollo de nuevas estrategias en este campo.

Basándose en los hallazgos de esta investigación, se recomienda continuar explorando y desarrollando nanocompuestos fotocatalíticos con propiedades óptimas para la conversión de la energía solar en hidrógeno. Es crucial seguir investigando y aplicando técnicas avanzadas de caracterización de materiales para comprender a fondo las propiedades estructurales y electrónicas de estos nanocompuestos. Además, se sugiere enfocar los esfuerzos en la síntesis de materiales semiconductores que puedan absorber la luz visible de manera más eficiente, lo que ampliaría significativamente las aplicaciones de la fotocatalisis en la producción de energía limpia. Asimismo, se insta a los investigadores a explorar la posibilidad de utilizar diferentes semiconductores o tipos de dopado para ampliar el rango de longitudes de onda que los materiales pueden absorber, lo que podría abrir nuevas oportunidades en el campo de la fotosíntesis artificial.

Se recomienda continuar investigando y desarrollando modelos que exploren la dopación de semiconductores para mejorar la eficiencia de la fotocatalisis. Es importante complementar los modelos teóricos con experimentos a escala piloto para validar su eficacia en condiciones reales. Esto permitirá verificar la viabilidad y eficiencia de las propuestas teóricas. Es fundamental considerar la escalabilidad y la viabilidad económica de los modelos propuestos para garantizar su implementación práctica a gran escala. Se deben evaluar los costos y beneficios de manera integral.

### Referencias bibliográficas

- Alcaldía Municipal de Pasto. (2020). *Información General - Pasto - Nariño - Colombia*.  
<https://pasto.gov.co/index.php/nuestro-municipio/informacion-general>
- ALPA Powder. (2021). *Rendimiento del dióxido de titanio y su función y aplicación en recubrimientos*. <https://www.alpapowder.com/es/113857/>
- Andrei, V., Wang, Q., Uekert, T., Bhattacharjee, S., & Reisner, E. (2022). Solar Panel Technologies for Light-to-Chemical Conversion. *Accounts of Chemical Research*, 55(23), 3376–3386. <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.2c00477>
- Arias Peñaranda, M. T., Martínez Roldán, A. D. J., & Cañizares Villanueva, R. O. (2013). PRODUCCIÓN DE BIODIESEL A PARTIR DE MICROALGAS: PARÁMETROS DEL CULTIVO QUE AFECTAN LA PRODUCCIÓN DE LÍPIDOS. In *Acta biol. Colomb* (Vol. 18, Issue 1). <http://algaetec.com.au>
- Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (1976). *Solid State Physics, Saunders Energías de Fermi, Temperaturas de Fermi y Velocidades de Fermi*. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/Solids/solref.html#c1>
- Augugliaro, V., Bellardita, M., Loddo, V., Palmisano, G., Palmisano, L., & Yurdakal, S. (2012). Overview on oxidation mechanisms of organic compounds by TiO<sub>2</sub> in heterogeneous photocatalysis. In *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews* (Vol. 13, Issue 3, pp. 224–245). <https://doi.org/10.1016/j.jphotochemrev.2012.04.003>
- Azcón Bieto, J., & Talón, M. (2008). *Fundamentos de Fisiología Vegetal*. <https://exa.unne.edu.ar/biologia/fisiologia.vegetal/FundamentosdeFisiologiaVegetal2008Azcon.pdf>
- Barrios, C. E., Albiter, E., & Zanella, R. (2015). La fotosíntesis artificial, una alternativa para la producción de combustibles. *Revista Interdisciplinaria En Nanociencias y Nanotecnología*, 8(15), 6–21. <https://doi.org/10.22201/ceiich.24485691e.2015.15.53813>
- BBVA. (2023). *¿Qué son los gases de efecto invernadero o “greenhouse gases”?* <https://www.bbva.com/es/sostenibilidad/que-son-los-gases-de-efecto-invernadero-o-greenhouse-gases/>
- Berberoglu, H., Gomez, P. S., & Pilon, L. (2009). Radiation characteristics of *Botryococcus braunii*, *Chlorococcum littorale*, and *Chlorella* sp. used for fixation and biofuel production.

- Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110(17), 1879–1893. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2009.04.005>
- Caglar, A., Aktas, N., & Kivrak, H. (2021). Tailoring Cadmium Composition on Titanium Dioxide to Achieve Enhanced Photocatalytic Glucose Fuel Cell Anode Performance. *ACS Applied Energy Materials*, 4(11), 12298–12309. <https://doi.org/10.1021/acsaem.1c02121>
- Ciencia Unisalle. (2022). *GUÍA PARA LA VISUALIZACIÓN DE DATOS: VOSviewer*.
- Ding, H., Xu, M., Zhang, S., Yu, F., Kong, K., Shen, Z., & Hua, J. (2020). Organic blue-colored D-A- $\pi$ -A dye-sensitized TiO<sub>2</sub> for efficient and stable photocatalytic hydrogen evolution under visible/near-infrared-light irradiation. *Renewable Energy*, 155, 1051–1059. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.04.009>
- Do, V. H., & Lee, J. M. (2022). Orbital Occupancy and Spin Polarization: From Mechanistic Study to Rational Design of Transition Metal-Based Electrocatalysts toward Energy Applications. In *ACS Nano* (Vol. 16, Issue 11, pp. 17847–17890). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/acsnano.2c08919>
- Dodekatos, G., Schünemann, S., & Tüysüz, H. (2018). Recent Advances in Thermo-, Photo-, and Electrocatalytic Glycerol Oxidation. In *ACS Catalysis* (Vol. 8, Issue 7, pp. 6301–6333). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/acscatal.8b01317>
- Drmosh, Q. A., Hezam, A., Hendi, A. H. Y., Qamar, M., Yamani, Z. H., & Byrappa, K. (2020). Ternary Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/MoS<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> with double Z-scheme configuration as high performance photocatalyst. *Applied Surface Science*, 499. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.143938>
- Duque, C. M., Morales, A. L., Mora-Ramos, M. E., & Duque, C. A. (2013). Optical nonlinearities associated to applied electric fields in parabolic two-dimensional quantum rings. *Journal of Luminescence*, 143, 81–88. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2013.04.039>
- EPA. (2023). *Emisiones de dióxido de carbono*. <https://espanol.epa.gov/la-energia-y-el-medioambiente/emisiones-de-dioxido-de-carbono>
- Etacheri, V., Di Valentin, C., Schneider, J., Bahnemann, D., & Pillai, S. C. (2015). Visible-light activation of TiO<sub>2</sub> photocatalysts: Advances in theory and experiments. In *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews* (Vol. 25, pp. 1–29). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochemrev.2015.08.003>
- Fiss, B. G., Vu, N. N., Douglas, G., Do, T. O., Friščić, T., & Moores, A. (2020). Solvent-free mechanochemical synthesis of ultrasmall nickel phosphide nanoparticles and their

- application as a catalyst for the hydrogen evolution reaction (her). *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, 8(32), 12014–12024. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.0c02762>
- FORMULACIÓN QUÍMICA. (2023). *TiO<sub>2</sub> / óxido de titanio (IV)*. <https://www.formulacionquimica.com/TiO2/>
- GOBERNACION DE NARIÑO. (2020). *APENDICE DEL DEPARTAMENTO DE NARIÑO (COLOMBIA)*. <https://www.theclimategroup.org/sites/default/files/2020-10/Nari%C3%B1o%20Under%20Coalition%20Appendix.pdf>
- Hafeez, H. Y., Lakhera, S. K., Bellamkonda, S., Rao, G. R., Shankar, M. V., Bahnemann, D. W., & Neppolian, B. (2018). Construction of ternary hybrid layered reduced graphene oxide supported g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-TiO<sub>2</sub> nanocomposite and its photocatalytic hydrogen production activity. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(8), 3892–3904. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.09.048>
- Hafeez, H. Y., Lakhera, S. K., Karthik, P., Anpo, M., & Neppolian, B. (2018). Facile construction of ternary CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-TiO<sub>2</sub> nanocomposite supported reduced graphene oxide (rGO) photocatalysts for the efficient hydrogen production. *Applied Surface Science*, 449, 772–779. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.01.282>
- Haldorai, Y., Rengaraj, A., Lee, J. B., Huh, Y. S., & Han, Y. K. (2015). Highly efficient hydrogen production via water splitting using Pt@MWNT/TiO<sub>2</sub> ternary hybrid composite as a catalyst under UV-visible light. *Synthetic Metals*, 199, 345–352. <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2014.12.014>
- Han, H. S., Moon, S. I., Choi, S., Enkhtuvshin, E., Kim, S. J., Jung, S. Y., Thu Thao, N. T., & Song, T. (2021). Enhanced photoelectrochemical characteristic of TiO<sub>2</sub> nanotubes via surface plasma treatment. *Ceramics International*, 47(21), 30741–30746. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.07.253>
- Hou, L., Guan, Z., Liu, T., He, C., Li, Q., & Yang, J. (2019a). Synergistic effect of {101} crystal facet and bulk/surface oxygen vacancy ratio on the photocatalytic hydrogen production of TiO<sub>2</sub>. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(16), 8109–8120. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.02.075>
- Hou, L., Guan, Z., Liu, T., He, C., Li, Q., & Yang, J. (2019b). Synergistic effect of {101} crystal facet and bulk/surface oxygen vacancy ratio on the photocatalytic hydrogen production of

- TiO<sub>2</sub>. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(16), 8109–8120.  
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.02.075>
- Huamán Aguirre, A. A. (2014). “*PRODUCCIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE DIÓXIDO DE TITANIO POR MOLIENDA HÚMEDA: CARACTERIZACIÓN Y APLICACIÓN A CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS CON COLORANTE.*”  
<https://www.researchgate.net/publication/350291267>
- Huo, Y., Tian, Y., Hu, T., Yang, M., Yu, Y., Liu, Y., Hou, J., & Li, L. (2023). CdS-loaded three-dimensional ordered macroporous composite material In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub>: Construction of type II heterostructure and enhancement of photocatalytic performance. *Applied Catalysis A: General*, 652. <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2023.119042>
- Ibrahim, Y. O., Hezam, A., Qahtan, T. F., Al-Aswad, A. H., Gondal, M. A., & Drmosh, Q. A. (2020). Laser-assisted synthesis of Z-scheme TiO<sub>2</sub>/rGO/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> nanocomposites for highly enhanced photocatalytic hydrogen evolution. *Applied Surface Science*, 534. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.147578>
- IDEAM. (2016). *INVENTARIO NACIONAL DE GASES EFECTO INVERNADERO*.  
[http://documentacion.ideam.gov.co/openbiblio/bvirtual/023421/cartilla\\_INGEI.pdf](http://documentacion.ideam.gov.co/openbiblio/bvirtual/023421/cartilla_INGEI.pdf)
- IDEAM. (2023). *ATMÓSFERA*. <http://www.ideam.gov.co/web/tiempo-y-clima/atmosfera>
- IEA. (2021). *Greenhouse Gas Emissions from Energy Data Explorer*. <https://www.iea.org/data-and-statistics/data-tools/greenhouse-gas-emissions-from-energy-data-explorer>
- Khan Academy. (2023). *Energía libre*. <https://es.khanacademy.org/science/biology/energy-and-enzymes/free-energy-tutorial/a/gibbs-free-energy>
- Kreft, S., Wei, D., Junge, H., & Beller, M. (2020). Recent advances on TiO<sub>2</sub>-based photocatalytic CO<sub>2</sub> reduction. *EnergyChem*, 2(6).  
<https://doi.org/10.1016/j.enchem.2020.100044>
- Kumaravel, V., Mathew, S., Bartlett, J., & Pillai, S. C. (2019). Photocatalytic hydrogen production using metal doped TiO<sub>2</sub>: A review of recent advances. In *Applied Catalysis B: Environmental* (Vol. 244, pp. 1021–1064). Elsevier B.V.  
<https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2018.11.080>
- Kuo, Y., Frye, C. D., Ikenberry, M., & Klabunde, K. J. (2013). Titanium-indium oxy(nitride) with and without RuO<sub>2</sub> loading as photocatalysts for hydrogen production under visible

- light from water. *Catalysis Today*, 199(1), 15–21.  
<https://doi.org/10.1016/j.cattod.2012.03.012>
- Ley 1715 de. (2014). *Por medio de la cual se regula la integración de las energías renovables no convencionales al Sistema Energético Nacional*.
- Li, C., Yuan, J., Han, B., Jiang, L., & Shangguan, W. (2010). TiO<sub>2</sub> nanotubes incorporated with CdS for photocatalytic hydrogen production from splitting water under visible light irradiation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(13), 7073–7079.  
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.01.008>
- Lin, H.-Y., & Chang, Y.-S. (2010). Photocatalytic water splitting for hydrogen production on Au/KTiNbO<sub>5</sub>. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(16), 8463–8471.  
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.06.006>
- MALES CASTRO, D. M., & ORTÍZ ARTEAGA, Á. N. (2017). *ALMACENAMIENTO DE CARBONO EN DIFERENTES USOS DE SUELO EN EL MUNICIPIO DE PASTO*. UNIVERSIDAD DE NARIÑO.
- Maria Dalcin Fornari, A., de Araujo, M. B., Bergamin Duarte, C., Machado, G., Teixeira, S. R., & Weibel, D. E. (2016a). Photocatalytic reforming of aqueous formaldehyde with hydrogen generation over TiO<sub>2</sub>nanotubes loaded with Pt or Au nanoparticles. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(27), 11599–11607. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.02.055>
- Maria Dalcin Fornari, A., de Araujo, M. B., Bergamin Duarte, C., Machado, G., Teixeira, S. R., & Weibel, D. E. (2016b). Photocatalytic reforming of aqueous formaldehyde with hydrogen generation over TiO<sub>2</sub>nanotubes loaded with Pt or Au nanoparticles. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(27), 11599–11607. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.02.055>
- Maurino, V., Bedini, A., Minella, M., Rubertelli, F., Pelizzetti, E., & Minero, C. (2008). Glycerol Transformation Through Photocatalysis: A Possible Route to Value Added Chemicals. *J. Adv. Oxid. Technol*, 11(2). <http://www.environmentalchemistry.unito.it>
- Maurya, J., Gemechu, E., & Kumar, A. (2023). The development of techno-economic assessment models for hydrogen production via photocatalytic water splitting. *Energy Conversion and Management*, 279. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.116750>
- Míguez Gómez, C. D. (2013). *La eficiencia energética en el uso de la biomasa para la generación de energía eléctrica: optimización energética y exergética*. UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID.

- Muñoz Fernández, J. A., Beleño Mendoza, W. A., & Díaz Consuegra, H. (2022). Analysis of the potential of the use of green hydrogen to reduce carbon emissions in Colombia. *Fuentes El Reventon Energetico*, 20(1), 57–72. <https://doi.org/10.18273/revfue.v20n1-2022006>
- NASA. (2023). *El proyecto POWER*. <https://power.larc.nasa.gov/>
- NATIONAL GEOGRAPHIC. (2022). *¿Qué son los biocombustibles?* <https://www.nationalgeographic.es/medio-ambiente/que-son-los-biocombustibles>
- OFC. (2018). *Propiedades físicas del dióxido de titanio—Conocimiento—Sólo Flúor químicos*. . <http://www.chinaquimicos.com/info/physical-properties-of-titanium-dioxide-29428930.html>
- Parra, F. (2019). *Estadística y Machine Learning con R*. <https://bookdown.org/content/2274/agrupacion-de-la-informacion.html>
- Pomar-Castromonte, R., Ingol-Blanco, E., Santos, J., & Santa-Cruz, S. (2021). Analytical and numerical modeling for the assessment of CO<sub>2</sub> storage in the Pariñas geological formation - Talara, Peru. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 110, 103446. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2021.103446>
- Ptable. (2023). *Tabla periódica, propiedades, serie*. <https://ptable.com/?lang=es#Propiedades/Serie>
- Ramsurn, H., & Gupta, R. B. (2013). Nanotechnology in solar and biofuels. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, 1(7), 779–797. <https://doi.org/10.1021/sc400046y>
- Rave, A. G. (2013). *Evaluación de cepas de microalgas para captura de dióxido de carbono*.
- Reyes Cruz, E. A., Nishiori, D., Wadsworth, B. L., Nguyen, N. P., Hensleigh, L. K., Khusnutdinova, D., Beiler, A. M., & Moore, G. F. (2022). Molecular-Modified Photocathodes for Applications in Artificial Photosynthesis and Solar-to-Fuel Technologies. In *Chemical Reviews* (Vol. 122, Issue 21, pp. 16051–16109). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00200>
- Riedel, M., Parak, W. J., Ruff, A., Schuhmann, W., & Lisdat, F. (2018). Light as Trigger for Biocatalysis: Photonic Wiring of Flavin Adenine Dinucleotide-Dependent Glucose Dehydrogenase to Quantum Dot-Sensitized Inverse Opal TiO<sub>2</sub> Architectures via Redox Polymers. *ACS Catalysis*, 8(6), 5212–5220. <https://doi.org/10.1021/acscatal.8b00951>
- Scheuermann, A. G., & McIntyre, P. C. (2016). Atomic Layer Deposited Corrosion Protection: A Path to Stable and Efficient Photoelectrochemical Cells. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 7(14), 2867–2878. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b00631>

- SECRETARÍA DE AMBIENTE Y DESARROLLO SOSTENIBLE, & GOBERNACIÓN DE NARIÑO. (2019). *Diagramacion\_pigcct-Fondo-Accion-y-Gobernacion*. [https://sitio.narino.gov.co/wp-content/uploads/Diagramacion\\_pigcct-Fondo-Accion-y-Gobernacion.pdf](https://sitio.narino.gov.co/wp-content/uploads/Diagramacion_pigcct-Fondo-Accion-y-Gobernacion.pdf)
- Serra, M., Baldovi, H. G., Albarracin, F., & Garcia, H. (2016). Visible light photocatalytic activity for hydrogen production from water-methanol mixtures of open-framework V-doped mixed-valence titanium phosphate. *Applied Catalysis B: Environmental*, *183*, 159–167. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.10.027>
- Shutterstock. (2023). *physics-illustration-photoelectric-effect-emission-electrons*.
- Sovacool, B. K., & Gross, A. (2015). The social acceptance of artificial photosynthesis: towards a conceptual framework. *Interface Focus*, *5*(3), 20140089. <https://doi.org/10.1098/rsfs.2014.0089>
- Sreethawong, T., Junbua, C., & Chavadej, S. (2009). Photocatalytic H<sub>2</sub> production from water splitting under visible light irradiation using Eosin Y-sensitized mesoporous-assembled Pt/TiO<sub>2</sub> nanocrystal photocatalyst. *Journal of Power Sources*, *190*(2), 513–524. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.01.054>
- Sun, T., Liu, E., Fan, J., Hu, X., Wu, F., Hou, W., Yang, Y., & Kang, L. (2013). High photocatalytic activity of hydrogen production from water over Fe doped and Ag deposited anatase TiO<sub>2</sub> catalyst synthesized by solvothermal method. *Chemical Engineering Journal*, *228*, 896–906. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2013.04.065>
- Taheri Najafabadi, A., & Taghipour, F. (2012). Cobalt precursor role in the photocatalytic activity of the zeolite-supported TiO<sub>2</sub>-based photocatalysts under visible light: A promising tool toward zeolite-based core-shell photocatalysis. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, *248*, 1–7. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2012.07.015>
- Thi Quyen, V., Jitae, K., Thi Huong, P., Thi Thu Ha, L., My Thanh, D., Minh Viet, N., & Quang Thang, P. (2021). Copper doped titanium dioxide as a low-cost visible light photocatalyst for water splitting. *Solar Energy*, *218*, 150–156. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.02.036>
- Thimsen, E., Le Formal, F., Grätzel, M., & Warren, S. C. (2011). Influence of Plasmonic Au Nanoparticles on the Photoactivity of Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Electrodes for Water Splitting. *Nano Letters*, *11*(1), 35–43. <https://doi.org/10.1021/nl1022354>

- Tobaldi, D. M., Kočí, K., Edelmannová, M., Lajaunie, L., Figueiredo, B., Calvino, J. J., Seabra, M. P., & Labrincha, J. A. (2021). CuxO and carbon–modified TiO<sub>2</sub>–based hybrid materials for photocatalytically assisted H<sub>2</sub> generation. *Materials Today Energy*, 19. <https://doi.org/10.1016/j.mtener.2020.100607>
- Twenergy. (2019). *Emisiones de CO<sub>2</sub>*. <https://twenergy.com/ecologia-y-reciclaje/huella-ecologica/emisiones-de-co2-458/>
- Vebber, M. C., Faria, A. C. R., Dal’Acqua, N., Beal, L. L., Fetter, G., Machado, G., Giovanela, M., & Crespo, J. S. (2016). Hydrogen production by photocatalytic water splitting using poly(allylamine hydrochloride)/poly(acrylic acid)/TiO<sub>2</sub>/copper chlorophyllin self-assembled thin films. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(40), 17995–18004. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.07.238>
- Wang, J., Zhao, H., Zhu, B., Larter, S., Cao, S., Yu, J., Kibria, M. G., & Hu, J. (2021). Solar-Driven Glucose Isomerization into Fructose via Transient Lewis Acid-Base Active Sites. *ACS Catalysis*, 11(19), 12170–12178. <https://doi.org/10.1021/acscatal.1c03252>
- Wang, Y., He, J., Shi, Y., & Zhang, Y. (2020). Structure-dependent adsorptive or photocatalytic performances of solid and hollow dendritic mesoporous silica & titania nanospheres. *Microporous and Mesoporous Materials*, 305. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110326>
- Yahia, J. (1966). POLARON AND EFFECTIVE MASSES IN TITANIUM ROOM TEMPERATURE. In *English Transl. : Soviet Phys. JETP* (Vol. 23, Issue 7).
- Yan, Z., Wu, H., Han, A., Yu, X., & Du, P. (2014). Noble metal-free cobalt oxide (CoO<sub>x</sub>) nanoparticles loaded on titanium dioxide/cadmium sulfide composite for enhanced photocatalytic hydrogen production from water. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(25), 13353–13360. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.04.121>
- Yglesias González, M., Alejandro, H., García, C., & Sanitario, H. (2013). *Riesgo de padecer enfermedades y síntomas respiratorios asociado a la exposición a dióxido de carbono y dióxido de azufre provenientes del volcán Turrialba, Costa Rica. Universidad de Costa Rica.*
- Zeng, D., Yang, L., Zhou, P., Hu, D., Xie, Y., Li, S., Jiang, L., Ling, Y., & Zhao, J. (2018). Au–Cu alloys deposited on titanium dioxide nanosheets for efficient photocatalytic hydrogen

evolution. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(32), 15155–15163.  
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.06.078>

## **Anexos**

**Anexo A.** Tabla de Clúster 4 con las respectivas clasificaciones de los artículos

<b>Clúster 4</b>		
<b>Construction of ternary hybrid layered reduced graphene oxide supported g-C3N4-TiO2 nanocomposite and its photocatalytic hydrogen production activity</b> (Hafeez, Lakhera, Bellamkonda, et al., 2018).		
<b>Resumen:</b>	<b>Semiconductores:</b>	<b>Banda de energía:</b>
<p>-Se centra en la síntesis y caracterización de un nanocompuesto fotocatalítico a base de grafeno reducido soportado en óxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) y carbono nitruro de grafeno reducido (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>). Además, se investiga la actividad fotocatalítica de este nanocompuesto en la producción de hidrógeno a partir de la división del agua. El estudio detalla la preparación de los materiales, las técnicas de caracterización utilizadas y los resultados obtenidos, con el objetivo de explorar su potencial aplicación en la generación de energía renovable.</p>	<p>- El carbono nitruro de grafeno reducido (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) es un semiconductor de bajo costo, no tóxico y altamente estable con un ancho de banda de energía en el rango visible. Es un material semiconductor con una estructura laminar que facilita la transferencia de carga, lo que lo hace prometedor para la producción fotocatalítica de hidrógeno.</p> <p>-El óxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) es otro semiconductor ampliamente estudiado en aplicaciones fotocatalíticas debido a su estabilidad química, no toxicidad y su capacidad para absorber luz ultravioleta. Sin embargo, su principal limitación es su respuesta limitada a la luz visible, lo que ha llevado a la modificación de TiO<sub>2</sub> para extender su actividad fotocatalítica al rango de luz visible.</p> <p>Ambos semiconductores se</p>	<p>-El ancho de banda de energía del carbono nitruro de grafeno reducido (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) es de aproximadamente 2,7 eV, lo que lo hace un semiconductor con actividad fotocatalítica en el rango visible.</p> <p>-El óxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) tiene un ancho de banda de energía de aproximadamente 3,18 eV, lo que lo hace un semiconductor con actividad fotocatalítica en el rango de luz ultravioleta.</p> <p>Es importante destacar que la combinación de estos dos semiconductores en un nanocompuesto ternario fotocatalítico, junto con el grafeno reducido (rGO), permite extender la actividad fotocatalítica al rango de luz visible, lo que mejora la eficiencia en la producción de hidrógeno a través de la división del agua.</p>

combinan con grafeno reducido (rGO) para formar un nanocompuesto ternario fotocatalítico, con el objetivo de mejorar la eficiencia en la producción de hidrógeno a través de la división del agua mediante la absorción de luz visible.

Reacciones:	Eficiencia fotocatalítica:	Morfología y composición del nanocompuesto:
<p>- En la banda de energía del nanocompuesto fotocatalítico, cuando un fotón de luz visible es absorbido por el material, se produce un salto de electrón desde la banda de valencia (VB) del g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> a la banda de conducción (CB) del TiO<sub>2</sub>, lo que genera un par de electrones y huecos cargados positivamente. Los electrones y huecos pueden reaccionar con moléculas de agua adsorbidas en la superficie del material para producir hidrógeno y oxígeno, respectivamente, a través de las siguientes reacciones:</p>	<p>-La combinación de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, TiO<sub>2</sub> y rGO en un nanocompuesto fotocatalítico ternario ha demostrado una alta actividad fotocatalítica para la producción de hidrógeno a través de la división del agua, con una tasa de producción de hidrógeno de 23,143 mmol g<sup>-1</sup> h<sup>-1</sup>. Esta alta tasa de producción de hidrógeno sugiere que la eficiencia fotocatalítica del nanocompuesto ternario es significativamente alta.</p>	<p>-El nanocompuesto fotocatalítico ternario g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-TiO<sub>2</sub>/rGO tiene una morfología de nanopartículas aglomeradas con una textura similar a la de un tejido.</p>
$2\text{H}_2\text{O} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 + 2\text{OH}^-$ $2\text{H}_2\text{O} + 2\text{h}^+ \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+$	<p><b>Irradiación:</b> -la irradiación se realizó utilizando luz UV-visible de una lámpara de xenón con una potencia de 250 W. La irradiación se llevó a cabo durante el proceso de evaluación de la actividad fotocatalítica del nanocompuesto para la producción de hidrógeno.</p>	<p>-La composición química del nanocompuesto se analizó mediante espectroscopía de dispersión de energía (EDS) y se encontró que contiene carbono (C), nitrógeno (N), oxígeno (O), titanio (Ti) y silicio (Si). Además, se confirmó la presencia de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, TiO<sub>2</sub> y rGO en el nanocompuesto mediante análisis de difracción de rayos X (XRD) y espectroscopía de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR). La combinación de estos materiales en el nanocompuesto ternario se logró mediante un</p>

---

energía en forma de calor, lo que reduce la eficiencia fotocatalítica del material.

proceso de síntesis que involucró la reducción de óxido de grafeno (GO) y la deposición de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> y TiO<sub>2</sub> sobre la superficie de rGO.

---

**Relación De masa:**

-La relación de masa entre g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> y TiO<sub>2</sub> en el compuesto sintetizado afecta sus propiedades de varias maneras, incluyendo la actividad fotocatalítica y la absorción de luz. En el estudio mencionado, se encontró que la relación de masa óptima de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> a TiO<sub>2</sub> fue de 70:30, lo que resultó en la mayor actividad de producción de hidrógeno. Esta relación de masa óptima puede maximizar la eficiencia de la conversión de energía solar en hidrógeno al equilibrar las contribuciones individuales de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> y TiO<sub>2</sub> al proceso fotocatalítico.

**Equipos y procedimientos:**

**-síntesis de óxido de grafeno (GO):** Se utilizó el método modificado de Hummer para sintetizar el óxido de grafeno.

**-Síntesis de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>:** El g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> se sintetizó a partir de melamina mediante un proceso de calcinación.

**-Síntesis de nanocompuesto g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-TiO<sub>2</sub>/rGO:** Se utilizó un método de impregnación húmeda asistida por ultrasonido para sintetizar el nanocompuesto.

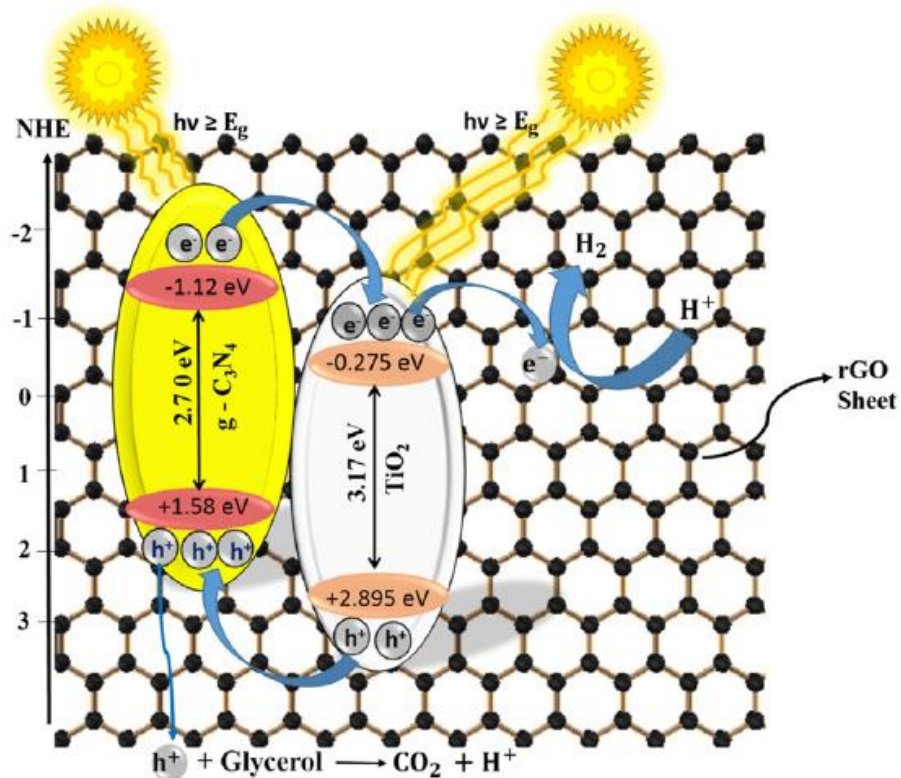
**-Caracterización del nanocompuesto:** Se llevaron a cabo varios análisis para caracterizar el nanocompuesto, incluyendo microscopía electrónica de barrido de emisión de campo (FE-SEM), espectroscopía de dispersión de energía (EDS), difracción de rayos X (XRD), espectroscopía de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR), espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS),

---

espectroscopía de absorción de luz UV-visible y espectroscopía de reflectancia difusa (DRS), espectroscopía de fotoluminiscencia (PL) y espectroscopía Raman.

**-Análisis de la actividad fotocatalítica:** Se evaluó la actividad fotocatalítica del nanocompuesto para la producción de hidrógeno bajo irradiación de luz UV-visible utilizando un espectrofotómetro UV y una lámpara de xenón.

**Reacciones:**



**Au-Cu alloys deposited on titanium dioxide nanosheets for efficient photocatalytic hydrogen evolution** (Zeng et al., 2018).

<p><b>Resumen:</b></p> <p>-Se centra en la preparación de heteroestructuras de AueCu/TiNs mediante la deposición de nanopartículas de oro y cobre en nanoláminas de dióxido de titanio (TiNs) para mejorar la absorción de luz visible y la actividad fotocatalítica para la producción de hidrógeno a partir de la división del agua. El estudio analiza la influencia de la relación de masa de Au y Cu en las heteroestructuras y el método de deposición en el rendimiento fotocatalítico.</p>	<p><b>Semiconductores:</b></p> <p>-El semiconductor utilizado en este estudio es el dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) en forma de nanoláminas (TiNs). Las nanopartículas utilizadas son de oro (Au) y cobre (Cu), que se depositan gradualmente en la superficie de las TiNs para formar las heteroestructuras de AueCu/TiNs.</p>	<p><b>Banda d energía:</b></p> <p>-El ancho de banda de energía es una propiedad importante de los semiconductores que determina su capacidad para absorber luz y participar en reacciones fotocatalíticas. En el caso del dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>), su ancho de banda de energía es de aproximadamente 3.2 electronvoltios (eV). En cuanto a las nanopartículas de oro (Au) y cobre (Cu), sus anchos de banda de energía específicos no se mencionan en el resumen proporcionado. Sin embargo, el ancho de banda de energía de estos metales puede variar dependiendo de su tamaño y estructura cristalina.</p>
<p><b>Reacciones:</b></p> <p>-En el caso de la producción de hidrógeno a partir de la división del agua, los electrones generados en la banda de conducción del semiconductor pueden reducir los protones (H<sup>+</sup>) en el agua para producir hidrógeno (H<sub>2</sub>), mientras que los huecos generados en la banda de valencia pueden oxidar el agua para producir oxígeno (O<sub>2</sub>) y protones (H<sup>+</sup>). Estas reacciones ocurren en los extremos de la</p>	<p><b>Eficiencia fotocatalítica:</b></p> <p>-En el caso específico de las heteroestructuras de AueCu/TiNs, la eficiencia fotocatalítica se evalúa mediante la medición de la producción de hidrógeno a partir de la división del agua bajo la irradiación de luz.</p> <p>-La tasa de producción de hidrógeno para las heteroestructuras de AueCu/TiNs se menciona en el estudio como 710 mmol g<sup>-1</sup></p>	<p><b>Propiedades estructurales:</b></p> <p><b>-Estructura cristalina:</b> En el estudio, se caracterizan las heteroestructuras de AueCu/TiNs mediante técnicas como microscopía electrónica de transmisión (TEM) y microscopía electrónica de barrido (SEM) para analizar su estructura cristalina y morfología.</p> <p><b>-Morfología:</b> Se observa que las heteroestructuras de AueCu/TiNs presentan una</p>

banda de energía del semiconductor, donde los electrones y los huecos tienen suficiente energía para participar en reacciones redox.  $h^{-1}$ , lo que representa la tasa de producción de hidrógeno bajo las condiciones experimentales específicas utilizadas en el estudio. Esta tasa de producción de hidrógeno es significativamente mayor que la observada para el TiO<sub>2</sub> puro, lo que indica la mejora en la eficiencia fotocatalítica de las heteroestructuras de AueCu/TiNs en comparación con el TiO<sub>2</sub> puro. morfología específica, posiblemente en forma de nanohojas.

<b>Método utilizado:</b>	<b>Relación de masa:</b>	<b>Equipos y procedimientos:</b>
-El método utilizado para construir las heteroestructuras AueCu/TiNs es un proceso de deposición-precipitación. Este método implica la deposición gradual de nanopartículas de oro (Au) y cobre (Cu) sobre las nanohojas de dióxido de titanio (TiNs). La formación de una heterounión entre las aleaciones de AueCu depositadas sobre las nanohojas de TiO <sub>2</sub> se logra a través de la creación de una barrera de Schottky. Esta barrera se forma debido a la diferencia en el nivel de Fermi entre las aleaciones de AueCu (nivel de Fermi más bajo) y las nanohojas de TiO <sub>2</sub> (nivel de Fermi más alto), lo que suprime la	-La relación de masa entre el oro y el cobre en las heteroestructuras de AueCu/TiNs es un factor clave que influye en su actividad fotocatalítica. Según el estudio, se menciona que la relación de masa entre el oro y el cobre fue variada para analizar su efecto en la actividad fotocatalítica de las heteroestructuras. Específicamente, se menciona que se estudiaron relaciones de masa en las que el oro y el cobre estaban presentes en proporciones iguales (1:1) y en otras proporciones diferentes.	<b>-Equipos:</b> -Microscopía electrónica de transmisión (TEM) para la observación de la morfología y la estructura cristalina de las muestras. -Espectroscopía de reflectancia difusa UV-Vis para analizar las propiedades ópticas de las muestras. -Análisis de corriente fotocatalítica para medir la actividad fotocatalítica de las muestras. -Espectroscopía de fotoelectrones emitidos por rayos X (XPS) para estudiar la composición química de las muestras. <b>-Procedimientos:</b>

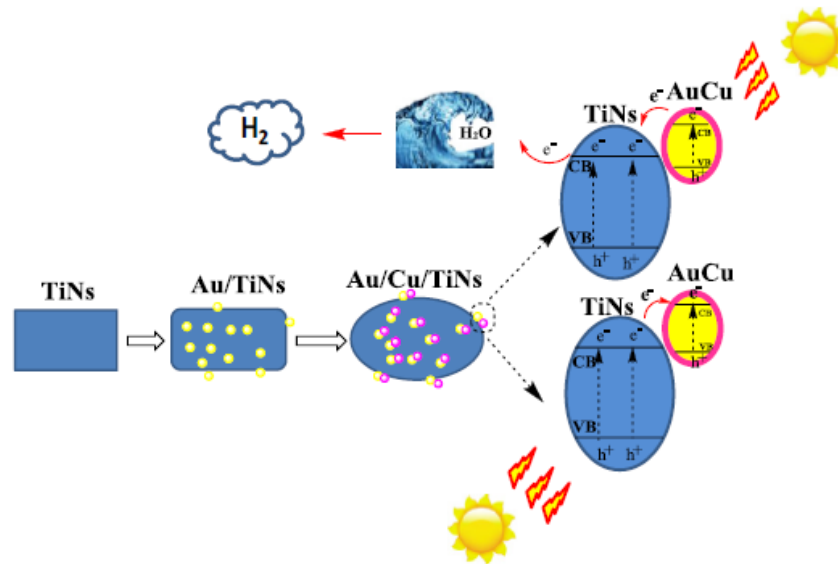
recombinación de los portadores de carga fotogenerados y mejora la actividad fotocatalítica.

-Preparación de las heteroestructuras de AuCu/TiNs mediante métodos de deposición de metal controlados.

-Caracterización de la morfología, estructura cristalina, propiedades ópticas y estado químico superficial de las heteroestructuras.

-Evaluación de la actividad fotocatalítica de las heteroestructuras para la producción de hidrógeno.

**Reacciones:**



**Synergistic effect of {101} crystal facet and bulk/surface oxygen vacancy ratio on the photocatalytic hydrogen production of TiO<sub>2</sub> (Hou et al., 2019b).**

Resumen:	Propiedades estructurales:	Banda de energía de TiO <sub>2</sub> :
-Estudia el impacto de la faceta cristalina {101} y la relación de vacancia de oxígeno en la	<b>-Vacancias de oxígeno:</b> Las vacancias de oxígeno son defectos en la estructura	-El TiO <sub>2</sub> es un semiconductor con una estructura de bandas de energía típica de un material de

producción fotocatalítica de cristalina del TiO<sub>2</sub> donde los este tipo. La estructura de hidrógeno<sup>8</sup> de nanocristales de átomos de oxígeno están bandas de energía del TiO<sub>2</sub> TiO<sub>2</sub>. ausentes. Estos defectos pueden consiste en una banda de -Se investiga cómo el porcentaje influir en la estructura de bandas valencia y una banda de de la faceta cristalina {101} y la de energía, la movilidad de los conducción separadas por una relación de vacancias de oxígeno portadores de carga y la brecha de energía, que en el caso afectan las propiedades reactividad superficial del del TiO<sub>2</sub> es de fotocatalíticas de los material. La presencia de aproximadamente 3.2 eV para la nanocristales de TiO<sub>2</sub>, con el vacancias de oxígeno puede fase anatasa y 3.0 eV para la objetivo de comprender cómo introducir niveles de energía fase rutilo. estos factores pueden ser localizados dentro de la brecha ajustados para mejorar la de energía del material, lo que actividad fotocatalítica en la afecta su capacidad para producción de hidrógeno. absorber luz y participar en -El estudio proporciona reacciones de transferencia de información detallada sobre la carga.

preparación y caracterización de **-Faceta cristalina {101}:** La los nanocristales de TiO<sub>2</sub>, así proporción de la faceta cristalina como los hallazgos clave {101} en los cristales de TiO<sub>2</sub> relacionados con la actividad también es una propiedad fotocatalítica y los mecanismos estructural importante. subyacentes que influyen en Diferentes facetas cristalinas dicha actividad. tienen diferentes energías superficiales y estructuras electrónicas, lo que puede influir en la reactividad superficial y la capacidad del material para interactuar con especies químicas y absorber luz.

<b>Caracterización de los nanocristales de TiO<sub>2</sub>:</b>	<b>Aplicaciones prácticas:</b>	<b>Relación óptima de bulk SETOVs/SOVs:</b>
-Los nanocristales de TiO <sub>2</sub> se prepararon mediante el método de síntesis hidrotermal con	<b>-Diseño de Fotocatalizadores Eficientes:</b> La influencia de las vacancias de oxígeno, tanto de tipo superficial como de tipo	-Mantener una relación óptima de bulk SETOVs/SOVs es crucial para lograr una alta

alcohol-tert-butílico y fluoruro de hidrógeno (HF) como agente de control de forma. Se prepararon cuatro tipos de muestras de TiO<sub>2</sub> con diferentes proporciones de la faceta cristalina {101}. Las muestras se caracterizaron utilizando varias técnicas, incluyendo difracción de rayos X (XRD) en la cual Las muestras exhibieron distintos picos de difracción correspondientes a las facetas cristalinas {101}, {004}, {200}, {105} y {211} de la anatasa TiO<sub>2</sub>; microscopía electrónica de transmisión (TEM), espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS) lo que permitió confirmar la formación de vacancias de oxígeno en los nanocristales de TiO<sub>2</sub>, así como identificar la concentración y el tipo de vacancias de oxígeno presentes en las muestras; espectroscopía de resonancia paramagnética electrónica (ESR) y espectroscopía de reflectancia difusa UV-vis.

bulk, en la eficiencia de separación de cargas fotogeneradas. Esta comprensión puede guiar el diseño y la optimización de fotocatalizadores para maximizar la producción de hidrógeno a partir de la energía solar.

**-Mejora de la Eficiencia Energética:** Al identificar la importancia de mantener una relación óptima de bulk SETOVs/SOVs para lograr una alta eficiencia de separación de cargas fotogeneradas.

eficiencia de separación de cargas fotogeneradas en los fotocatalizadores de TiO<sub>2</sub>.

**-Separación eficiente de cargas:** La presencia de vacancias de oxígeno, tanto de tipo superficial como de tipo bulk, influye en la capacidad del material para separar eficientemente las cargas fotogeneradas. Una relación óptima de bulk SETOVs/SOVs puede favorecer la separación de electrones y huecos, lo que es fundamental para la eficacia de los procesos fotocatalíticos.

**-Mejora de la actividad fotocatalítica:** La relación adecuada entre bulk SETOVs y SOVs puede contribuir a una mayor actividad fotocatalítica al facilitar la separación eficiente de cargas fotogeneradas. Esto es crucial para aplicaciones como la producción de hidrógeno a partir de fuentes renovables, donde la eficiencia de separación de cargas influye directamente en la eficacia del proceso.

**-Optimización de la respuesta a la luz visible:** La relación óptima de bulk SETOVs/SOVs puede influir en la capacidad del

<p><b>Capacidad de absorción de luz en la región visible en función del tiempo:</b></p> <p>-La capacidad de absorción de luz en la región visible de las muestras de TiO<sub>2</sub> varía significativamente en función del tiempo de reducción. Se observó que a medida que aumenta el tiempo de reducción, la concentración de vacancias de oxígeno, tanto de tipo superficial como de tipo bulk, aumenta, lo que a su vez conduce a una mayor capacidad de absorción de luz en la región visible.</p> <p>-Se encontró que las muestras de TiO<sub>2</sub> reducidas presentaban una absorción más intensa en la región visible en comparación con la muestra de TiO<sub>2</sub> original. Este aumento en la capacidad de absorción de luz en la región visible se atribuyó a la presencia y aumento de las vacancias de oxígeno, las cuales contribuyen a extender la respuesta del TiO<sub>2</sub> a la luz visible.</p>	<p><b>Eficiencia fotocatalítica:</b></p> <p>-La eficiencia fotocatalítica de los nanocristales de TiO<sub>2</sub> se puede medir en términos de su capacidad para producir hidrógeno a partir de la fotocatálisis del agua. En este proceso, los nanocristales de TiO<sub>2</sub> actúan como catalizadores para la reacción de reducción del agua, que produce hidrógeno y oxígeno a partir de la energía luminosa.</p> <p>-La cantidad de hidrógeno producido por los diferentes nanocristales de TiO<sub>2</sub> se expresa en milimoles por gramo por hora (mmol/g/h). Los valores de producción de hidrógeno para los diferentes nanocristales de TiO<sub>2</sub> son los siguientes:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- H-TiO<sub>2</sub>: 717.4 mmol/g/h</li> <li>- M-TiO<sub>2</sub>: 181.4 mmol/g/h</li> <li>- L-TiO<sub>2</sub>: 31.8 mmol/g/h</li> <li>- A-TiO<sub>2</sub>: 52.6 mmol/g/h</li> </ul> <p>-Se utilizó una lámpara de xenón de 300 W como fuente de luz y se midió la cantidad de</p>	<p>fotocatalizador para absorber luz en la región visible, lo que es fundamental para maximizar la eficiencia en la conversión de energía solar en procesos fotocatalíticos.</p> <p><b>Equipos y procedimientos:</b></p> <p><b>-Equipos:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Autoclave</li> <li>-Microscopio electrónico de transmisión (TEM)</li> <li>-Espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS)</li> <li>-Espectroscopía de resonancia de espín electrónico (ESR)</li> <li>-Espectrofotometría ultravioleta-visible (UV-Vis)</li> <li>-Espectroscopía de aniquilación de positrones</li> <li>-Sistema de medición de corriente fotocatalítica</li> <li>-Lámpara de xenón de 300 W</li> </ul> <p><b>-Procedimiento:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Preparación de nanocristales de TiO<sub>2</sub>:             <ol style="list-style-type: none"> <li>a. Utilización de nanotubos de ácido titánico como precursor.</li> <li>b. Empleo de un método de reducción sólida con NaBH<sub>4</sub>.</li> <li>c. Ajuste del porcentaje de la faceta cristalina {101} expuesta mediante la adición de diferentes cantidades de HF durante la preparación.</li> </ol> </li> </ul>
--	---	---

hidrógeno producido a intervalos de 30 minutos durante un período de 5 horas.	d. Caracterización de los nanocristales de TiO <sub>2</sub> mediante TEM, XPS, ESR y UV-Vis.
---	--

**Facile construction of ternary CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-TiO<sub>2</sub> Nanocomposite Supported Reduced Graphene Oxide (rGO) photocatalysts for the efficient Hydrogen Production** (Hafeez, Lakhera, Karthik, et al., 2018).

<b>Resumen:</b>	<b>Semiconductores:</b>	<b>Banda de energía:</b>
-Se centra en la construcción de fotocatalizadores para la producción eficiente de hidrógeno. Específicamente, describe la síntesis de un nanocompuesto ternario de CuFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> -TiO <sub>2</sub> soportado en óxido de grafeno reducido (rGO) y su aplicación en la producción de hidrógeno a través de la fotocatalisis. El enfoque principal del artículo es la caracterización de estos fotocatalizadores y su desempeño en la generación de hidrógeno a partir de fuentes de agua.	-Los semiconductores utilizados en el estudio son el óxido de titanio (TiO <sub>2</sub> ) y el ferrito de cobre (CuFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ). Estos materiales se combinan con óxido de grafeno reducido (rGO) para formar un nanocompuesto ternario utilizado como fotocatalizador para la producción de hidrógeno a través de la fotocatalisis.	-El nanocompuesto ternario de CuFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> -TiO <sub>2</sub> soportado en óxido de grafeno reducido (rGO) presenta un ancho de banda óptico (GAB) de 1.51 eV, en comparación con el valor de 3.20 eV para las nanopartículas de TiO <sub>2</sub> sin modificar.
<b>Eficiencia fotocatalítica:</b>	<b>Equipos empleados:</b>	<b>Procedimientos realizados:</b>
-El rendimiento máximo de producción de hidrógeno obtenido fue de 35981 μmolg <sup>-1</sup> h <sup>-1</sup> , lo que es aproximadamente 8 y 3 veces mayor que el rendimiento de las nanopartículas de TiO <sub>2</sub> sin modificar (4640 μmolg <sup>-1</sup> h <sup>-1</sup> ) y las nanopartículas de CuFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> -	<b>-Espectrómetro de absorción UV-vis:</b> Utilizado para medir la absorbancia de los fotocatalizadores en el rango UV-vis. <b>-Espectrómetro de emisión de fotoluminiscencia (PL):</b> Empleado para medir la intensidad de la	<b>-Síntesis del nanocompuesto:</b> Se llevó a cabo la síntesis del nanocompuesto ternario CuFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> -TiO <sub>2</sub> soportado en óxido de grafeno reducido (rGO) mediante un método de impregnación húmeda asistida por ultrasonido. <b>-Caracterización de los</b>

---

TiO<sub>2</sub> (14719 μmolg<sup>-1</sup>h<sup>-1</sup>), fotoluminiscencia de los **fotocatalizadores:** Se realizaron respectivamente. Esto indica que fotocatalizadores. análisis de XRD, FTIR, Raman, el nanocompuesto ternario de **Microscopio electrónico de FE-SEM, HR-TEM, UV-vis, CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-TiO<sub>2</sub>** soportado en **barrido de emisión de campo DRS y PL** para caracterizar la óxido de grafeno reducido (rGO) **(FE-SEM):** Utilizado para estructura, morfología, es un fotocatalizador altamente caracterizar la morfología composición y propiedades eficiente para la producción de superficial de los ópticas de los fotocatalizadores. hidrógeno a través de la fotocatalizadores. **-Evaluación de la actividad fotocatalítica:** Se llevó a cabo la fotocatalítisis.

**-Microscopio electrónico de transmisión de alta resolución (HR-TEM):** Empleado para evaluación de la actividad observar la morfología y fotocatalítica de los fotocatalizadores para la estructura cristalina a nivel producción de hidrógeno nanométrico. mediante la fotólisis del agua en presencia de glicerol como agente captador de huecos.

**-Espectrómetro de dispersión de Raman:** Utilizado para analizar la estructura y composición de los fotocatalizadores.

**-Difractómetro de rayos X (XRD):** Empleado para determinar la estructura cristalina y la composición de los fotocatalizadores.

**-Espectroscopio de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR):** Utilizado para analizar la composición química y las interacciones superficiales de los fotocatalizadores.

**-Espectrofotómetro de reflectancia difusa (DRS):** Empleado para medir la reflectancia difusa de los

---

	fotocatalizadores y determinar sus propiedades ópticas.	
<b>Características estructurales y morfológicas:</b>	<b>Mecanismos de transferencia de carga:</b>	<b>Irradiación:</b>
-los fotocatalizadores ternarios CuFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> -TiO <sub>2</sub> soportados en óxido de grafeno reducido (rGO) presentaron una estructura cristalina bien definida y una morfología uniforme de partículas de tamaño reducido (~56 nm). Además, se observó una distribución homogénea de los componentes en la superficie del rGO.	-Se identificaron posibles mecanismos de transferencia de carga y separación de portadores en los fotocatalizadores ternarios mediante técnicas de caracterización como PL y Raman. Se propuso un mecanismo de doble separación de carga, en el que los electrones se transfieren desde el CB de TiO <sub>2</sub> al rGO y los huecos se transfieren desde el VB de CuFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> a los agujeros captadores de glicerol.	-la irradiación utilizada para evaluar la actividad fotocatalítica de los fotocatalizadores ternarios CuFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> -TiO <sub>2</sub> soportados en óxido de grafeno reducido (rGO) fue luz UV-visible. Se utilizó una lámpara de xenón de 250 W con una longitud de onda de 300-800 nm para irradiar los fotocatalizadores durante la producción de hidrógeno mediante la fotólisis del agua. Antes de la irradiación, la solución de reacción se mantuvo en la oscuridad durante 20 minutos para alcanzar un equilibrio de adsorción-desorción, seguida de 20 minutos de purga de nitrógeno para eliminar el oxígeno disuelto.
<b>Laser-assisted synthesis of Z-scheme TiO<sub>2</sub>/rGO/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> nanocomposites for highly enhanced photocatalytic hydrogen evolution (Ibrahim et al., 2020).</b>		
<b>Resumen:</b>	<b>Bandas de energía de los nanocompuestos:</b>	<b>Longitud de onda:</b>
-la síntesis asistida por láser de nanocompuestos Z-esquema de TiO <sub>2</sub> /rGO/g-C <sub>3</sub> N <sub>4</sub> para una evolución fotocatalítica altamente mejorada del hidrógeno.	-La estructura de bandas de energía de los nanocompuestos TiO <sub>2</sub> /rGO/g-C <sub>3</sub> N <sub>4</sub> contribuye a su eficiencia fotocatalítica mejorada.	-Longitudes de onda específicas para caracterizar las propiedades ópticas de los fotocatalizadores. -Se utilizó espectroscopia de fotoluminiscencia (PL) a una longitud de onda de excitación

<p>-La fabricación de una arquitectura fotocatalítica novedosa utilizando la técnica de ablación láser pulsada en líquidos (PLAL) y se evalúa la actividad fotocatalítica del compuesto sintetizado mediante la división del agua.</p> <p>-Se emplean diversas técnicas analíticas para investigar las propiedades composicionales, morfológicas, estructurales y ópticas de los fotocatalizadores.</p> <p>-Alto rendimiento de producción de hidrógeno de los nanocompuestos TiO<sub>2</sub>/rGO/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> en comparación con otros materiales, lo que los hace altamente prometedores para aplicaciones en la división del agua y posiblemente en otras áreas de la catálisis fotocatalítica.</p>	<p>-La incorporación de rGO y g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> en la estructura del TiO<sub>2</sub> resulta en una reducción del ancho de la banda de energía, lo que aumenta la absorción de luz visible y mejora la eficiencia fotocatalítica.</p> <p>-La estructura de bandas de energía de los nanocompuestos TiO<sub>2</sub>/rGO/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> permite la transferencia eficiente de electrones y la separación de cargas, lo que es fundamental para la reacción de división del agua y la producción de hidrógeno.</p>	<p>de 320 nm y espectroscopia de reflectancia difusa (DRS) en el rango de longitudes de onda de 200 a 800 nm para medir los perfiles de absorción de luz de los fotocatalizadores. Estas longitudes de onda específicas fueron utilizadas para evaluar las propiedades ópticas de los nanocompuestos TiO<sub>2</sub>/rGO/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> y comprender su capacidad para absorber la luz, lo que es crucial para su eficiencia fotocatalítica.</p> <p>-Se utilizaron longitudes de onda en el rango de 250-800 nm para la caracterización de las propiedades ópticas de los nanocompuestos TiO<sub>2</sub>/rGO/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. La energía correspondiente a estas longitudes de onda varía de aproximadamente 1.55 eV a 4.96 eV, respectivamente.</p> <p>-La incorporación de rGO y g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> en la estructura del TiO<sub>2</sub> permite una mayor absorción de luz visible, lo que aumenta la eficiencia fotocatalítica y la producción de hidrógeno.</p>
--	--	---

<p><b>Técnica PLAL:</b></p> <p>-La técnica PLAL (pulsed laser ablation in liquids) es un método de síntesis que utiliza pulsos</p>	<p><b>Arquitectura fotocatalítica de esquema Z:</b></p> <p>-Es un diseño que implica la combinación de dos</p>	<p><b>Eficiencia fotocatalítica de los nanocompuestos:</b></p> <p>-Este se evaluó mediante la monitorización de la producción</p>
--	--	---

láser para generar semiconductores con niveles de de hidrógeno a través de la nanomateriales en presencia de energía adecuadamente fotocatalisis.

un líquido. En el caso de los alineados para facilitar la -Se midió la tasa de producción nanocompuestos TiO<sub>2</sub>/rGO/g- transferencia eficiente de de hidrógeno como un indicador C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, la técnica PLAL se electrones y la separación de de la eficiencia fotocatalítica de utiliza para fabricar estos cargas. los nanocompuestos.

materiales mediante la ablación En este diseño, un **-Tasa de producción de de un blanco compuesto por los semiconductor actúa como un hidrogeno:** la muestra indica materiales de partida (TiO<sub>2</sub>, fotosensibilizador (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) que que 2rGT, con una relación de rGO, g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) en un líquido, absorbe la luz visible y genera masa de TiO<sub>2</sub>/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> de 1:2 y que puede ser agua u otro pares electrón-hueco, mientras 1% de rGO, mostró una tasa de disolvente adecuado. que el otro semiconductor actúa producción de hidrógeno de 32 ± -En el caso específico de los como un aceptador (TiO<sub>2</sub>) de 1 mmol g<sup>-1</sup> h<sup>-1</sup>.

nanocompuestos TiO<sub>2</sub>/rGO/g- electrones que utiliza los -La tasa de producción de C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, la técnica PLAL se electrones generados para llevar hidrógeno para la muestra 2rGT utiliza para sintetizar estos a cabo una reacción redox, como fue aproximadamente 93 veces materiales mediante la ablación la reducción del agua para mayor que la de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, 3.8 de blancos compuestos por producir hidrógeno. El rGO veces mayor que la de TiO<sub>2</sub> y TiO<sub>2</sub>, rGO, y g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> en un actúa como un mediador de 2.6 veces mayor que la de líquido apropiado. La electrones que facilita la TiO<sub>2</sub>/rGO. Estas comparaciones interacción del plasma generado transferencia eficiente de resaltan la notable mejora en la por el láser con el líquido electrones desde el g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> al eficiencia fotocatalítica lograda conduce a la formación de TiO<sub>2</sub>. con los nanocompuestos nanomateriales compuestos por -La disposición de los tres sintetizados en este estudio en TiO<sub>2</sub>, rGO, y g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> dispersos materiales en una arquitectura de comparación con los materiales en el líquido. Estos esquema Z permite una individuales y otros nanomateriales pueden ser separación eficiente de los pares nanocompuestos. recogidos y utilizados para la electrón-hueco generados por la fabricación de los absorción de luz, lo que evita la recombinação de cargas y este caso, los nanocompuestos aumenta la eficiencia del proceso fotocatalítico.

---

**Morfología y composición elemental de los Equipos y procedimientos:**  
**-Microscopía electrónica de**

---

---

**nanocompuestos:**

-Se caracterizaron utilizando microscopía electrónica de barrido de emisión de campo (FESEM) y análisis de energía dispersiva de rayos X (EDS).

-La FESEM se utilizó para observar la morfología de los nanocompuestos, lo que permitió visualizar la estructura de los componentes a nivel microscópico. Por otro lado, el análisis de EDS se empleó para confirmar la presencia y la distribución de los elementos químicos en los nanocompuestos.

-Los nanocompuestos presentaron una morfología en la que los nanotubos de TiO<sub>2</sub> estaban envueltos por láminas de rGO y g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, y la composición elemental de los nanocompuestos mostró una distribución homogénea de carbono, oxígeno, titanio y nitrógeno.

**barrido de emisión de campo**

**(FESEM):** Se utilizó para observar la morfología de los nanocompuestos a nivel microscópico, lo que permitió visualizar la distribución y la estructura de los componentes.

**-Análisis de energía dispersiva de rayos X (EDS):** Se empleó para confirmar la presencia y la distribución de los elementos químicos en los nanocompuestos, lo que proporcionó información sobre la composición elemental de los materiales.

**-Espectroscopía de reflectancia difusa (DRS):**

Se utilizó para analizar la absorción de luz de los nanocompuestos, lo que permitió evaluar su eficiencia en la absorción de luz en el rango visible y en el ultravioleta cercano.

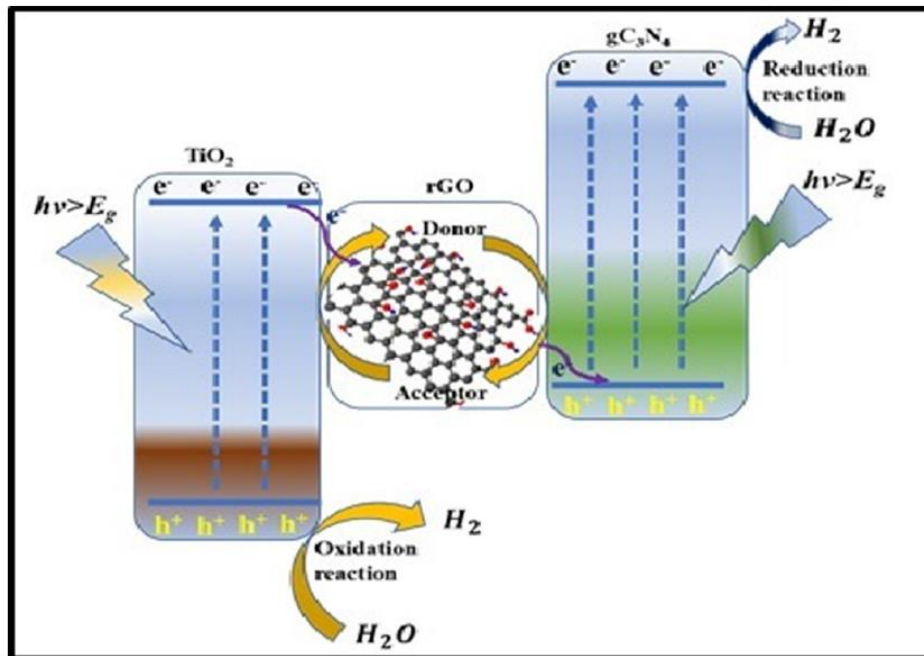
**-Espectroscopía de fotoemisión**

**de rayos X (XPS):** Se empleó para investigar las propiedades químicas y electrónicas de los componentes de los nanocompuestos, lo que proporcionó información detallada sobre los estados químicos y las interacciones entre los elementos.

**-Espectroscopía de fotoluminiscencia (PL):** Se utilizó para investigar las propiedades ópticas de los nanocompuestos, lo que permitió evaluar su capacidad para emitir luz en respuesta a la excitación por luz.

**-Espectroscopía Raman:** Se empleó para obtener información sobre las vibraciones moleculares y la estructura cristalina de los nanocompuestos.

**Reacciones:**



$$\begin{aligned} \text{Apparent quantum yield} &= \frac{\text{number of reacted electrons}}{\text{number of absorbed photons}} \times 100 \\ &= \frac{\text{number of reacted electrons}}{\text{number of incident photons}} \times 100 \\ &= \frac{2 \times \text{number of evolved H}_2 \text{ molecules}}{\text{number of incident photons}} \times 100 \end{aligned}$$

$$\text{Number of incident photons} = I \text{ (W/m}^2\text{)} \times A \text{ (m}^2\text{)} \times t \times [(hc/\lambda) \times N_A]$$

---

**Ternary Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/MoS<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> with double Z-scheme configuration as high performance photocatalyst** (Drmosh et al., 2020).

---

<b>Fotocatalizador:</b>	<b>Configuración de doble esquema Z:</b>	<b>Reacciones o formulas:</b>
<p>Fotocatalizador de alto rendimiento llamado Ternary Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/MoS<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> con configuración de doble esquema Z. El fotocatalizador fue preparado utilizando un método hidrotérmico asistido por microondas y las propiedades de transporte de electrones únicas de los catalizadores nanoestructurados.</p>	<p>Configuración de transporte de carga en la que los electrones y los huecos generados por la luz en dos semiconductores diferentes se transfieren en una secuencia de esquema Z. En esta configuración, los electrones y los huecos se transfieren de un semiconductor a otro a través de un mediador redox, lo que permite una separación eficiente de carga y una mayor eficiencia en la producción de hidrógeno y la fotodegradación de contaminantes. En el caso del fotocatalizador Ternary Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/MoS<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub>, la configuración de doble esquema Z se refiere a la transferencia de electrones y huecos entre los tres componentes del fotocatalizador, lo que contribuye a su alto</p>	<p><b>-Propiedades ópticas:</b></p> $\alpha h\nu = A(h\nu - E_g)^{n/2}$ <p><b>-Cinetica de degradación:</b></p> $-\ln\left(\frac{C_t}{C_0}\right) = K_1 t$ $\frac{1}{C_t - C_e} = \frac{1}{C_0 - C_e} + K_2 t$

---

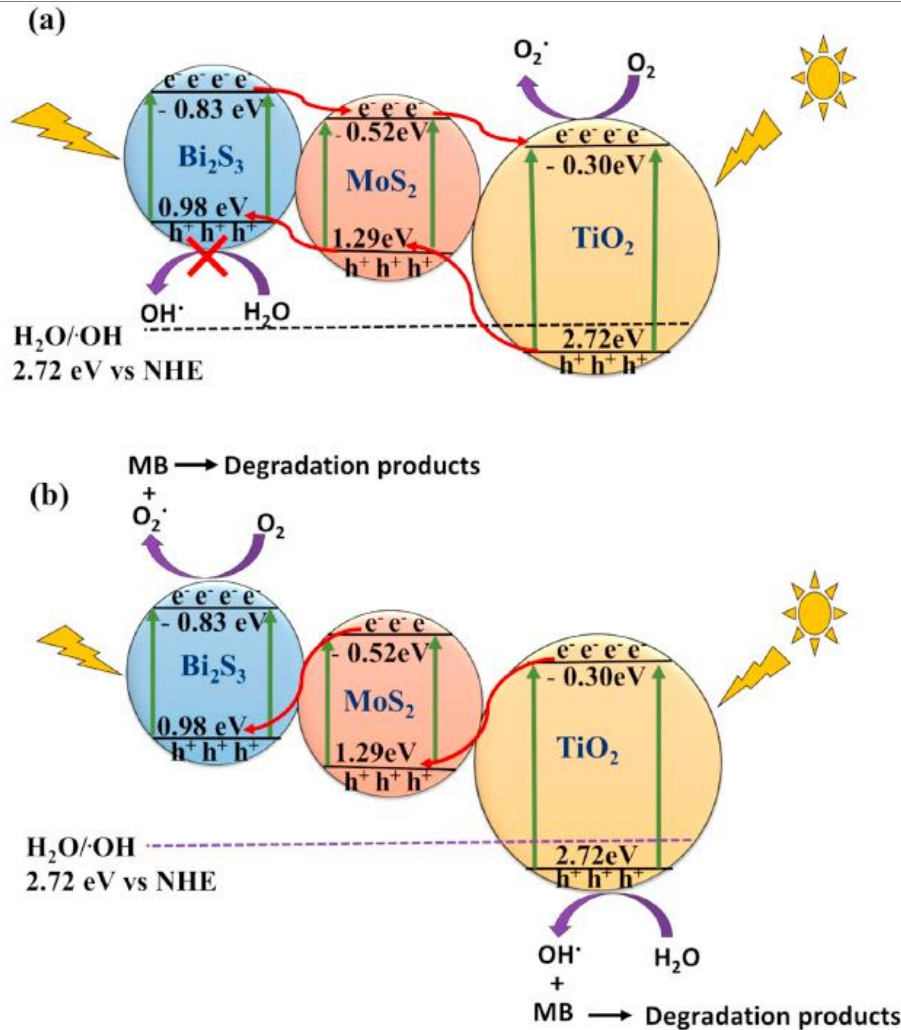
rendimiento.		
<b>Componentes del fotocatalizador:</b>	<b>Irradiación de luz visible y solar:</b>	<b>Bandas de energía de los componentes:</b>
<p>-Bismuto sulfuro (Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) en forma de nanovarillas.</p> <p>-Molibdeno sulfuro (MoS<sub>2</sub>) en forma de nanoplacas.</p> <p>-Dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) en forma de nanotubos.</p> <p>Estos tres componentes se combinan para formar el fotocatalizador Ternary Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/MoS<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub>, que tiene una configuración de doble esquema Z y exhibe una alta eficiencia en la producción de hidrógeno y la fotodegradación de contaminantes bajo la irradiación de luz visible y solar.</p>	<p>Los tres componentes del fotocatalizador tienen diferentes bandas de energía y, por lo tanto, pueden absorber diferentes longitudes de onda de la luz visible y solar. Además, la configuración de doble esquema Z del fotocatalizador permite una separación eficiente de carga y una transferencia de electrones y huecos entre los tres componentes, lo que contribuye a su alto rendimiento fotocatalítico bajo la irradiación de luz visible y solar.</p>	<p>La energía de la banda prohibida (E<sub>g</sub>) de:</p> <p>-Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> es de 1,39 eV.</p> <p>-MoS<sub>2</sub> es de 1,81 eV.</p> <p>-TiO<sub>2</sub> es de 3,04 eV.</p> <p>Además, el artículo menciona que el nanocompuesto MBT-75 tiene una banda de energía de 1,61 eV, lo que lo convierte en un material con una banda de energía estrecha que mejora la absorción de fotones en la luz visible y, por lo tanto, mejora su rendimiento fotocatalítico.</p>
<b>Radiación solar:</b>	<b>Propiedades adecuadas de los componentes para el fotocatalizador Ternario:</b>	
<p>Uso de un simulador solar (lámpara Xe de 250 W con 100 mW cm<sup>-2</sup>) para irradiar el electrodo de trabajo.</p> <p>Lámpara de xenón de 250 W equipada con un filtro de corte para eliminar la luz UV, y la luz visible con una longitud de onda mayor o igual a 420 nm se utilizó para la irradiación.</p> <p>Área activa de los electrodos de trabajo: -0,5 cm<sup>2</sup></p>	<p>-Las nanobarras de Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> tienen una alta área superficial y excelentes propiedades de transporte de electrones.</p> <p>-Las nanoláminas de MoS<sub>2</sub> tienen una alta capacidad de absorción de luz y una buena capacidad de transferencia de electrones.</p> <p>Los nanotubos de TiO<sub>2</sub>, por otro lado, tienen una estructura unidimensional que facilita el</p>	

transporte de electrones y proporciona una gran área de contacto para los otros dos componentes. Se encontró que el aumento del contenido de nanotubos de TiO<sub>2</sub> anatasa en el catalizador ternario Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/MoS<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> mejora la eficiencia de producción de hidrógeno fotocatalítico. En los experimentos, se observó que el catalizador ternario con un contenido del 75% de nanotubos de TiO<sub>2</sub> anatasa produjo la mayor cantidad de hidrógeno. La combinación de estas propiedades en el fotocatalizador ternario Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/MoS<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> da como resultado un rendimiento fotocatalítico mejorado para la producción de hidrógeno y la degradación de tintes bajo luz visible y luz solar, respectivamente.

---

**Reacciones:**

---



**Organic blue-colored D-A- $\pi$ -A dye-sensitized TiO<sub>2</sub> for efficient and stable photocatalytic hydrogen evolution under visible/near-infrared-light irradiation (Ding et al., 2020).**

Fotocatalizadores-sensibilizados con tinte orgánico de color azul D-A- $\pi$ -A	Importancia en la producción de hidrógeno:	Estabilidad del desprendimiento de hidrógeno:
-S5@Pt/TiO <sub>2</sub> tiene una estructura D-A- $\pi$ -A	-Su capacidad para mejorar la eficiencia y la estabilidad de la producción de hidrógeno mediante la irradiación de luz visible / infrarroja cercana.	-Pueden absorber la luz en el rango de longitud de onda visible / infrarroja cercana, lo que aumenta la eficiencia de la producción de hidrógeno.
-S6@Pt/TiO <sub>2</sub> tiene una estructura D- $\pi$ -A.		Además, el uso de estos fotocatalizadores puede mejorar la estabilidad de la producción
-Ambos tintes tienen un grupo donador de electrones (D) y un grupo aceptador de electrones (A) unidos por un puente $\pi$ -		

conjugado.		de hidrógeno, lo que significa que pueden mantener una alta eficiencia de producción de hidrógeno durante un período de tiempo más largo en comparación con otros fotocatalizadores.
<p><b>Radiación solar:</b></p> <p>-El fotocatalizador de color azul puede utilizar el espectro solar de manera más eficiente con longitudes de onda mayores a 600 nm. Esto sugiere que el fotocatalizador es capaz de absorber una porción de la radiación solar en las regiones visible e infrarroja cercana del espectro electromagnético.</p> <p>-Se utilizó una irradiación de luz monocromática de 420 nm para medir la actividad fotocatalítica del fotocatalizador.</p>	<p><b>Energía:</b></p> <p>-Los niveles de energía más alto ocupado (HOMO), el nivel de energía más bajo desocupado (LUMO) y el HOMO-1 de los tintes orgánicos S5 y S6.</p>	<p><b>Longitudes de onda de absorción máxima:</b></p> <p>-El tinte S5 tiene dos bandas de absorción obvias que ocurren en 370-400 nm (atribuidas a la transición <math>\pi</math>-<math>\pi^*</math>) y 500-650 nm (atribuidas a la transferencia de carga intramolecular, ICT), respectivamente, y la longitud de onda de absorción máxima (<math>\lambda_{max}</math>) correspondiente de S5 se observó a 590 nm</p> <p>-El tinte S6 también tiene dos bandas de absorción obvias que ocurren en 370-400 nm y 500-650 nm, respectivamente, y la longitud de onda de absorción máxima correspondiente de S6 se observó a 533 nm.</p>
<p><b>Eficiencia de absorción de luz:</b></p> <p>La eficiencia de absorción molar (<math>\epsilon</math>) de S5 es de <math>6.03 \times 10^{-4} \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}</math>.</p> <p>-La eficiencia de absorción molar de S6 es de <math>0.82 \times 10^{-4} \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}</math>.</p>	<p><b>Potencial redox:</b></p> <p>-Los potenciales HOMO de S5 y S6 se midieron en solución tetrahidrofurano (THF) y se encontraron que eran de 1,88 V y 2,08 V (vs. NHE), respectivamente.</p> <p>-Los potenciales LUMO se</p>	<p><b>Absorbancia:</b></p> <p>-A medida que aumenta la cantidad de tinte S5 adsorbido en TiO<sub>2</sub>, la actividad de producción de H<sub>2</sub> aumenta. Sin embargo, una vez que la cantidad de tinte S5 supera los 7,5 <math>\mu\text{mol g}^{-1}</math>, la actividad de</p>

---

calcularon restando el E0-0 de producción de H<sub>2</sub> comienza a HOMO, y se encontraron que disminuir. Esto puede deberse a eran de -1,08 V y -1,26 V (vs. que cuando la cantidad de tinte NHE) para S5 y S6, es demasiado baja, el compuesto respectivamente. no puede aprovechar toda la luz incidente, mientras que cuando la cantidad de tinte es demasiado alta, las moléculas de tinte pueden agregarse y provocar una alta recombinación de carga, lo que reduce la producción de hidrógeno fotocatalítico.

---

**Condiciones para la Estabilidad fotocatalítica:**

**producción de hidrógeno fotocatalítico:**

-Para las pruebas de producción de hidrógeno fotocatalítico, se utilizaron electrodos de membrana de TiO<sub>2</sub> sensibilizados con tinte y se realizaron mediciones fotoelectroquímicas con una solución tampón fosfato de 0,1 M como electrolito de soporte y una lámpara de xenón de 300 W como fuente de luz.

-La intensidad de la corriente fotocatalítica de los electrodos de membrana de TiO<sub>2</sub> sensibilizados con tinte se midió a 0,1 V vs Ag/AgCl con la luz encendida y apagada.

-La impedancia electroquímica en el rango de frecuencia de

-Se pudo mantener más del 94% de la actividad fotocatalítica de S5@Pt/TiO<sub>2</sub>.

-Se pudo mantener el 67% de la actividad fotocatalítica de S6@Pt/TiO<sub>2</sub>.

Esto indica que el fotocatalizador basado en S5 tenía una mejor repetibilidad y fotoestabilidad para la evolución de hidrógeno bajo irradiación de luz visible. Además, se indica que a diferencia de muchos tintes orgánicos que son fácilmente desorbidos o descompuestos después de un período de irradiación, el tinte S5 no tuvo una degradación obvia después de 15 horas de irradiación.

---

10<sup>2</sup>-10<sup>6</sup> Hz con una amplitud de modulación de 0,01 V en el estado oscuro.

---

**Photocatalytic hydrogen production using metal doped TiO<sub>2</sub>: A review of recent advances** (Kumaravel et al., 2019).

---

**Resumen:**

-Se centra en revisar los avances recientes, hallazgos clave y mecanismos de la fotocatalisis para la producción de hidrógeno utilizando TiO<sub>2</sub> dopado con metales. Examina en detalle cómo la introducción de metales en la estructura del TiO<sub>2</sub> puede mejorar la eficiencia de la producción de hidrógeno a través de la fotocatalisis. Además, el artículo aborda la importancia de este proceso para la sostenibilidad ambiental y la producción de energía.

**Nanopartículas:**

**-Nanopartículas de NiP:** Estas nanopartículas se han utilizado como cocatalizadores en la superficie de los semiconductores para mejorar la separación de cargas y la transferencia de electrones.

**-Nanopartículas de CdS:** Las nanopartículas de CdS pueden absorber la luz visible y generar pares de electrones y huecos, lo que puede conducir a la producción de hidrógeno.

**-Nanopartículas de Ti<sup>3+</sup>:** Las nanopartículas de Ti<sup>3+</sup> pueden actuar como centros de captura de electrones y mejorar la separación de cargas en la superficie del semiconductor.

**-Nanopartículas de Au-Ag:** las nanopartículas bimetalicas de oro-plata (Au-Ag) se han utilizado como cocatalizadores en la superficie de los semiconductores. Estas nanopartículas pueden mejorar la separación de cargas y la transferencia de electrones en la

**Banda de energía:**

-El dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>), que es uno de los semiconductores más utilizados en la fotocatalisis para la separación del agua, tiene un band gap de alrededor de 3,2 eV, lo que significa que puede absorber fotones con longitudes de onda menores a 387 nm. Otros semiconductores, como el sulfuro de cadmio (CdS), tienen band gaps más pequeños y pueden absorber fotones con longitudes de onda más largas, hasta alrededor de 515 nm.

superficie del semiconductor.

**-Nanopartículas de Cu:** Las nanopartículas de Cu pueden actuar como centros de captura de electrones y mejorar la separación de cargas en la superficie del semiconductor.

**-Nanopartículas de Pt:** Las nanopartículas de Pt pueden mejorar la separación de cargas y la transferencia de electrones en la superficie del semiconductor.

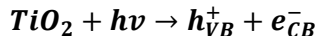
---

**Visible-Light Activation of TiO<sub>2</sub> Photocatalysts: Advances in Theory and Experiments** (Etacheri et al., 2015).

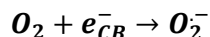
---

**Reacciones:**

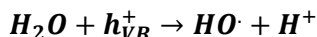
**En la banda**



**Reducción**



**Oxidación**



**Propiedades estructurales y Estudios:**

**electrónicas:**

**Uso:** se debe a su

-no toxicidad, abundancia (barato), estabilidad térmica/química y alto potencial redox.

- La estructura cristalina minimiza la recombinación de huecos de electrones fotoexcitados.

- La transferencia de huecos se produce sólo a través de una especie de hueco atrapada en la superficie o a través del radical hidroxilo. Los radicales hidroxilos son las principales especies oxidantes en el TiO<sub>2</sub> fotoactivado.

---

**Polimorfos de TiO<sub>2</sub>:**

-Anastasa: banda prohibida 3,2 eV, fases metaestables, fotocatalíticamente más activo. La estructura cristalina tetragonal de la anatasa (a= b =

**Factores que afectan la actividad fotocatalítica del TiO<sub>2</sub>:** El área de superficie, el tamaño de partícula, la proporción de polimorfos, el tipo de dopantes,

**Clasificación de los fotocatalizadores:**  
**-Fotocatalizadores basados en dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>):** - TiO<sub>2</sub> dopado con nitrógeno (N-TiO<sub>2</sub>).

---

---

3,78 Å, c = 9,50 Å) cada octaedro comparte esquinas para formar el plano (001).

-rutilo: banda prohibida 3,0 eV, termodinámicamente estable, la estructura tetragonal del rutilo (a = b = 4,58 Å, c = 2,95 Å) consiste en un plano octaedro (001) que comparte bordes.

-Brookita: banda prohibida 3,4 eV, fase metaestable. Estructura ortorrómbica de la fase de brookita (a = 5,43 Å, b = 9,16 Å, c = 5,13 Å) se compone de octaedros que comparten esquinas y aristas.

-la diferencia entre las tres son: los distintos grados de distorsión y el ensamblaje tridimensional de los octaedros de TiO<sub>6</sub>, Estas diferentes estructuras cristalinas dan como resultado diversas densidades y estructuras electrónicas.

---

### **Radiación solar en la actividad fotocatalítica del TiO<sub>2</sub>:**

La mayoría de los fotocatalizadores de TiO<sub>2</sub> convencionales solo pueden utilizar alrededor del 5% de la radiación solar debido a su banda de energía estrecha y su incapacidad para absorber luz

la concentración de defectos, el método de síntesis y la pureza de la fase

- TiO<sub>2</sub> dopado con flúor (F-TiO<sub>2</sub>).

- TiO<sub>2</sub> dopado con fósforo (P-TiO<sub>2</sub>).

Los fotocatalizadores basados en TiO<sub>2</sub> que muestran una alta eficiencia fotocatalítica bajo irradiación solar, son el TiO<sub>2</sub> dopado con nitrógeno, el TiO<sub>2</sub> modificado con metales nobles y el TiO<sub>2</sub> combinado con otros semiconductores. En general, la eficiencia fotocatalítica del TiO<sub>2</sub> se puede mejorar mediante la activación con luz visible, que permite una mayor utilización de la radiación solar y una mayor eficiencia fotocatalítica.

visible. Sin embargo, se han desarrollado varias estrategias para activar el TiO<sub>2</sub> con luz visible, lo que permite una mayor utilización de la radiación solar y una mayor eficiencia fotocatalítica.

---

**TiO<sub>2</sub> nanotubes incorporated with CdS for photocatalytic hydrogen production from splitting water under visible light irradiation** (Li et al., 2010).

---

**Resumen:**

-La síntesis y caracterización de nanotubos de titanato (TiO<sub>2</sub>) incorporados con sulfuro de cadmio (CdS) para la producción fotocatalítica de hidrógeno a partir de la división del agua bajo irradiación de luz visible. El estudio muestra que la incorporación de nanopartículas de CdS en los nanotubos de TiO<sub>2</sub> mejora significativamente la producción fotocatalítica de hidrógeno.

**Semiconductores:**

-Se utilizó titanato de sodio (Na<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>7</sub>) como precursor para la síntesis de nanotubos de titanato (TiO<sub>2</sub>) y se incorporaron nanopartículas de sulfuro de cadmio (CdS) en los nanotubos de TiO<sub>2</sub> para mejorar la actividad fotocatalítica.

**Banda de energía:**

-el TiO<sub>2</sub>, su ancho de banda de energía es de aproximadamente 3.2 eV. Por otro lado, el CdS tiene un ancho de banda de energía de alrededor de 2.4 eV. Estas diferencias en los anchos de banda de energía son relevantes para las propiedades fotocatalíticas de los materiales compuestos CdS/TiO<sub>2</sub>.

---

**Eficiencia fotocatalítica:**

-La producción de hidrógeno se ve notablemente mejorada cuando se incorporan las nanopartículas de CdS en los nanotubos de TiO<sub>2</sub>, con un rendimiento cuántico aparente de producción de hidrógeno de alrededor del 43.4% bajo luz visible.

-la cantidad total de hidrógeno

**Proceso de síntesis de compuestos:**

-El proceso de síntesis de los compuestos CdS/TiO<sub>2</sub> utilizando nanotubos de titanato como precursor se llevó a cabo mediante un proceso de cambio iónico simple seguido de un proceso de sulfonación a una temperatura moderada para la incorporación de CdS. Los

**Equipos y procedimientos:**

**-Síntesis de los nanotubos de titanato:** Los nanotubos de titanato se sintetizaron a partir de una solución de ácido sulfúrico y titanato de bario mediante un proceso hidrotérmico a alta temperatura.

**-Síntesis de las nanopartículas de CdS:** Las nanopartículas de CdS se sintetizaron mediante un

---

producido después de 13 horas de reacción continua fue de 5118 mmol utilizando el fotocatalizador CdS/TiO<sub>2</sub>.

nanotubos de titanato se sumergieron en una solución de Cd(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> y se agitaron durante 24 horas. Luego, se sumergieron en una solución de Na<sub>2</sub>S y se agitaron durante otras 24 horas. Finalmente, se lavaron con agua y se secaron a 60°C durante 12 horas.

método de precipitación a partir de una solución de Cd(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub> y NH<sub>2</sub>CSNH<sub>2</sub>.

**-Síntesis del compuesto CdS/TiO<sub>2</sub>:** Los nanotubos de titanato se sumergieron en una solución de Cd(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub> y se intercambiaron los iones de titanio por iones de cadmio. Luego, se sulfidaron los nanotubos de titanato intercambiados con cadmio para formar el compuesto CdS/TiO<sub>2</sub>.

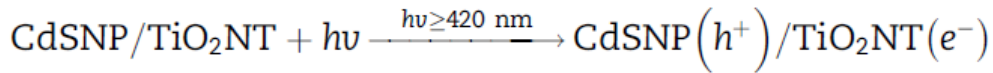
**-Caracterización del compuesto CdS/TiO<sub>2</sub>:** Se caracterizó el compuesto CdS/TiO<sub>2</sub> mediante técnicas como difracción de rayos X (XRD), microscopía electrónica de transmisión (TEM), espectroscopía de fotoelectrones (XPS), espectroscopía de absorción UV-Vis, espectroscopía de fotoluminiscencia (PL) y análisis BET.

**-Evaluación de la eficiencia fotocatalítica:** Se evaluó la eficiencia fotocatalítica del compuesto CdS/TiO<sub>2</sub> para la producción de hidrógeno a partir de la división del agua bajo luz visible. Se midió el rendimiento cuántico aparente para la

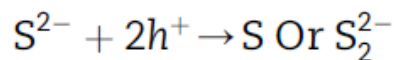
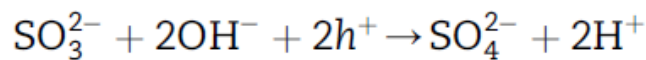
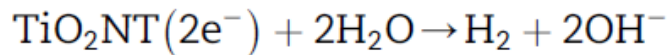
---

producción de hidrógeno y se realizaron pruebas de estabilidad y reutilización del fotocatalizador.

**Reacciones:**



**Reducción:**



**Photocatalytic reforming of aqueous formaldehyde with hydrogen generation over TiO<sub>2</sub> nanotubes loaded with Pt or Au nanoparticles** (Maria Dalcin Fornari et al., 2016b).

**Resumen:**

-la degradación fotocatalítica de soluciones acuosas de formaldehído utilizando nanotubos de dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) cargados con nanopartículas de oro o platino.  
 -Los efectos de la cantidad de nanopartículas de metales nobles en la degradación fotocatalítica del formaldehído bajo irradiación de luz UV y visible, y la producción simultánea de hidrógeno.  
 -Los resultados del estudio tienen implicaciones importantes

**Nanopartículas**

**(catalizadores):**  
 -se utilizaron nanopartículas de metales nobles, específicamente oro (Au) y platino (Pt), como catalizadores para la degradación fotocatalítica del formaldehído.  
 -Estas nanopartículas se depositaron en los nanotubos de dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) para aumentar la eficiencia del proceso fotocatalítico. Las nanopartículas de metales nobles, debido a su alta área superficial y propiedades

**Irradiación de luz visible:**

-se utilizaron fuentes de luz polimórficas UV-Visible para irradiar la mezcla acuosa durante los experimentos de degradación del formaldehído. Se indica que se utilizó una amplia gama espectral de luz, incluyendo luz ultravioleta (UV) y luz visible, para irradiar la mezcla acuosa. Además, se menciona que se utilizaron filtros de paso largo para permitir la entrada de solo luz visible en algunos experimentos.  
 -Se utilizó luz visible para

para el tratamiento de aguas residuales y la producción de hidrógeno a través de la fotocatalísis. catalíticas únicas, pueden facilitar la generación de especies reactivas de oxígeno y la transferencia de electrones durante la fotocatalísis, lo que conduce a una mayor actividad en la degradación de compuestos orgánicos como el formaldehído. irradiar la mezcla acuosa durante los experimentos de degradación del formaldehído. Se indica que se utilizó una amplia gama espectral de luz, incluyendo luz visible, para irradiar la mezcla acuosa. Además, se menciona que se utilizaron filtros de paso largo con una longitud de onda de corte de  $400 \pm 5$  nm o  $450 \pm 5$  nm para permitir la entrada de solo luz visible en algunos experimentos.

<b>Eficiencia fotocatalítica:</b>	<b>Concentración de formaldehído:</b>	<b>de Tasa de producción de hidrogeno:</b>
-La eficiencia fotocatalítica de los nanotubos de TiO <sub>2</sub> cargados con nanopartículas de metales nobles, especialmente oro (Au) y platino (Pt), es significativamente mayor en comparación con los nanotubos de TiO <sub>2</sub> puros. Se observa un aumento en la tasa de producción de hidrógeno y una mayor actividad fotocatalítica visible para la fotodegradación del formaldehído cuando se utilizan los nanotubos de TiO <sub>2</sub> cargados con estas nanopartículas.	-La concentración de formaldehído en la solución se mantuvo constante en un 10% (v/v) en todos los experimentos. Además, se utilizaron diferentes tiempos de sputtering para depositar las nanopartículas de metales nobles en los nanotubos de TiO <sub>2</sub> y se evaluó la tasa de producción de hidrógeno y la eficiencia de la fotodegradación del formaldehído bajo estas condiciones.	-Se observó que la presencia de nanopartículas de metales nobles (Au y Pt) en los nanotubos de TiO <sub>2</sub> mejora significativamente la tasa de producción de hidrógeno en comparación con los nanotubos de TiO <sub>2</sub> puros. Por ejemplo, se observó una tasa de producción de hidrógeno de $0.06 \text{ mmol cm}^{-2} \text{ h}^{-1}$ sobre los nanotubos de TiO <sub>2</sub> cargados con nanopartículas de oro (Au) bajo irradiación de luz UV y visible. Además, se observó que la tasa de producción de hidrógeno aumentó con el aumento de la concentración de formaldehído en la solución.

**Reacciones del proceso:** -Fabricación de los nanotubos Equipos y procedimientos:

-Formación de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) a través de la oxidación del monóxido de carbono (CO) por especies oxidantes fotogeneradas en la interfaz entre las nanopartículas de oro (Au) y los nanotubos de TiO<sub>2</sub>.

-Reducción de protones (H<sup>+</sup>) a átomos de hidrógeno (H) a través de la captura eficiente de electrones en la barrera Schottky formada en la interfaz entre el platino (Pt) y TiO<sub>2</sub>, lo que finalmente produce hidrógeno molecular (H<sub>2</sub>).

-Transferencia de electrones de TiO<sub>2</sub> excitados bajo luz ultravioleta (UV) a las nanopartículas de oro (Au), promoviendo el proceso de producción de H<sub>2</sub>.

-Oxidación de las nanopartículas de oro (Au) depositadas en los nanotubos de TiO<sub>2</sub>, lo que contribuye a la fotodegradación del formaldehído y mejora la tasa de producción de hidrógeno.

**de TiO<sub>2</sub>:** Los nanotubos de TiO<sub>2</sub> utilizados en el estudio fueron fabricados mediante el proceso de anodización de un foil de titanio en un electrolito que contenía etilenglicol, NH<sub>4</sub>F y H<sub>2</sub>O. Después de la anodización, los nanotubos fueron secados y posteriormente tratados térmicamente a 400°C para cristalizar la capa de nanotubos de óxido.

**-Tipo de nanopartículas metales nobles:** Se utilizaron nanopartículas de oro (Au) y platino (Pt) cargadas en los nanotubos de TiO<sub>2</sub>. Estas nanopartículas fueron depositadas mediante el método de deposición por pulverización catódica de corriente continua (DC-magnetron sputtering deposition method).

**-Anodización de Ti foil:** Se utilizó un electrolito que contenía etilenglicol, NH<sub>4</sub>F y H<sub>2</sub>O para anodizar un foil de titanio y producir nanotubos de TiO<sub>2</sub>. La anodización se realizó a temperatura ambiente con una tensión constante de 20 V durante un tiempo determinado. Los nanotubos de TiO<sub>2</sub> se secaron y se trataron térmicamente a 400°C durante 3 horas para cristalizar la capa de nanotubos de óxido.

**-Depósito de nanopartículas de metales nobles:** Las nanopartículas de oro (Au) y platino (Pt) se depositaron en los nanotubos de TiO<sub>2</sub> mediante el método de deposición por pulverización catódica de corriente continua (DC-magnetron sputtering deposition method). Se utilizó un sputter coater MED 020 (Bal-Tech) con un gas de trabajo de argón a una presión de 2.0 Pa. Se mencionan diferentes tiempos de sputtering para depositar las nanopartículas de Au y Pt en los nanotubos de TiO<sub>2</sub>, como 6 segundos y 60 segundos.

**-Fotocatálisis:** Los experimentos de fotocatalisis se

realizaron en un reactor de vidrio con una lámpara de luz UV y visible. Se utilizó una solución de formaldehído en agua con una concentración del 10% v/v como sustrato. Los productos gaseosos de la reacción fotocatalítica se cuantificaron mediante cromatografía de gases en un cromatógrafo Agilent 6820 GC. Se midió la tasa de producción de hidrógeno en diferentes condiciones experimentales.

**-Caracterización de los materiales:** Se utilizaron diversas técnicas para caracterizar los nanotubos de TiO<sub>2</sub> y las nanopartículas de metales nobles, como microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopía de rayos X (XPS) y espectroscopía de absorción de rayos X (XAS)

---

**Recciones y formulas:**

---



**Highly efficient hydrogen production via water splitting using Pt@MWNT/TiO<sub>2</sub> ternary hybrid composite as a catalyst under UV–visible light** (Haldorai et al., 2015).

**Resumen:**

-la síntesis de un compuesto ternario de nanotubos de carbono de pared múltiple (MWNT) soportados en partículas de platino y dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) y su aplicación en la producción de hidrógeno a través de la división fotocatalítica del agua bajo luz visible y UV-visible. El estudio muestra el potencial prometedor de este compuesto como fotocatalizador para la producción de hidrógeno.

**Semiconductores:**

**-Nanotubos de Carbono de Pared Múltiple (MWNT):** Los nanotubos de carbono de pared múltiple son estructuras cilíndricas compuestas por múltiples capas concéntricas de láminas de grafito.  
**-Dióxido de Titanio (TiO<sub>2</sub>):** El dióxido de titanio es un semiconductor ampliamente utilizado en aplicaciones fotocatalíticas debido a su no toxicidad, estabilidad química, estabilidad térmica y resistencia a la radiación ultravioleta. Sin embargo, una desventaja

**Eficiencia fotocatalítica:**

-La eficiencia fotocatalítica del compuesto Pt@MWNT/TiO<sub>2</sub> se menciona en el estudio como una tasa de producción de hidrógeno de 435.9 mmol h<sup>-1</sup>, la cual fue 5.5 y 1.8 veces mayor que la de TiO<sub>2</sub> puro y el compuesto MWNT/TiO<sub>2</sub>, respectivamente.

---

importante es su inactividad bajo luz solar debido a su gran energía de brecha de banda. Por lo tanto, se busca modificar el TiO<sub>2</sub> para mejorar su actividad fotocatalítica bajo luz visible.

**-Nanopartículas de Platino**

**(Pt):** El platino es un metal noble que se utiliza como co-catalizador en aplicaciones fotocatalíticas debido a su capacidad para facilitar la transferencia de carga y mejorar la eficiencia de la reacción. En el estudio, las nanopartículas de platino se cargan en la estructura compuesta para mejorar la eficiencia de producción de hidrógeno.

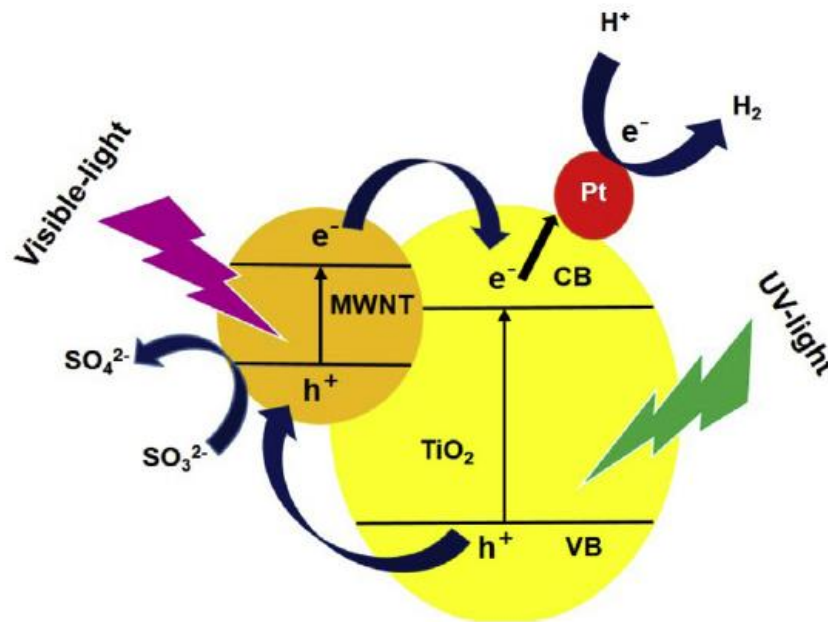
---

<b>Cargas de Pt:</b>	<b>Materiales:</b>	<b>Mecanismos:</b>
- La carga de Pt utilizada en la síntesis del compuesto ternario Pt@MWNT/TiO <sub>2</sub> varió entre 1.0 wt%, 1.5 wt%, y 3.0 wt%. Se observó que la eficiencia de la producción de hidrógeno aumentó con un mayor contenido de Pt, alcanzando su punto máximo con una carga de 1.5 wt%, lo que sugiere un efecto óptimo de la carga de Pt en la mejora de la actividad catalítica.	-Los materiales utilizados en el estudio incluyeron nanotubos de carbono de pared múltiple (MWNT), óxido de titanio (TiO <sub>2</sub> ), isobutoxido de titanio (Ti[OCH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ] <sub>4</sub> ), ácido cloroplátinico (H <sub>2</sub> PtCl <sub>6</sub> ) y nanopartículas de platino (Pt).	-El mecanismo de producción de hidrógeno a través de la división del agua utilizando el compuesto ternario Pt@MWNT/TiO <sub>2</sub> se basa en la absorción de fotones por parte del catalizador, lo que genera pares de electrones y huecos. Los electrones se transfieren al Pt, que actúa como un sitio de reducción para la producción de hidrógeno, mientras que los huecos se transfieren al TiO <sub>2</sub> , que actúa como un sitio de oxidación para

---

la producción de oxígeno.

**Reacciones:**



**Structure-dependent adsorptive or photocatalytic performances of solid and hollow dendritic mesoporous silica & titania nanospheres (Y. Wang et al., 2020).**

<b>Resumen:</b>	<b>Banda de energía:</b>	<b>Estructura electrónica y distribución de portadores de carga:</b>
-El estudio de las performances adsorptivas o fotocatalíticas de las esferas nanométricas de sílice mesoporosa dendrítica sólida y hueca con titanio. Se exploran aplicaciones potenciales como la eliminación de colorantes orgánicos, la división del agua y la reducción del dióxido de carbono. -La fabricación de las nanoesferas híbridas de sílice mesoporosa dendrítica y titanio, así como la evolución estructural	-Los valores de la banda de energía indirecta de los materiales híbridos de sílice y titanio son de 3,30 y 3,27 eV, respectivamente, lo que corresponde a la estructura cristalina de anatasa del titanio. -La energía de los fotones utilizados para excitar los electrones de valencia a la banda de conducción es de 4,60 eV, lo que es mayor que la banda de energía de anatasa TiO <sub>2</sub> (aproximadamente 3,20 eV).	-La emisión de fotoluminiscencia puede proporcionar información sobre la estructura electrónica y la distribución de los portadores de carga de los materiales estudiados. -La emisión de fotoluminiscencia de los materiales híbridos de sílice y titanio muestra una banda de emisión en el rango de 325 a 500

---

desde el estado sólido al estado hueco. -El estudio proporciona una comprensión detallada de las propiedades y aplicaciones potenciales de estas nanoesferas en diversas áreas de la catálisis y la remoción de contaminantes.

-La emisión de nm, que se atribuye a la recombinación de portadores de carga en la banda de energía indirecta y procesos de recombinación en la superficie. -La intensidad de la emisión de fotoluminiscencia de los materiales híbridos de sílice y titanio disminuye ligeramente en comparación con la de las esferas de sílice mesoporosa dendrítica sólida, lo que sugiere que la tasa de recombinación de portadores de carga fotoinducidos es ligeramente mayor en los materiales híbridos.

---

**Producción de hidrogeno:**

-Se realizó una prueba de fotocatalisis en la que se utilizó metanol como agente sacrificial y cloroplatonato de potasio como cocatalizador. Los resultados mostraron que los materiales híbridos de sílice y titanio pueden producir hidrógeno bajo irradiación de luz visible y ultravioleta, y que la cantidad de hidrógeno producido depende de la estructura y composición de los materiales.

**Reducción de dióxido de carbono:**

-La reducción de dióxido de carbono, se realizó una prueba de fotocatalisis en la que se utilizó una mezcla de acetonitrilo y trietanolamina como solvente y dióxido de carbono como reactivo. Los resultados mostraron que los materiales híbridos de sílice y titanio pueden reducir el dióxido de carbono bajo irradiación de luz visible y ultravioleta, y que la cantidad de dióxido de carbono reducido depende de la estructura y composición de los

**Nanoesferas:**

**-Dendritic Mesoporous Silica Nanospheres (DMSNs):** Estas nanoesferas consisten en sílice mesoporosa con una estructura dendrítica. Tienen una alta área superficial y una estructura porosa, lo que las hace adecuadas para aplicaciones de adsorción y fotocatalisis. Se utilizaron como referencia en el estudio.

**-Hybrid Dendritic Mesoporous Silica & Titania Nanospheres (DMSTNs):** Estas nanoesferas fueron preparadas mediante la incorporación de titanio (titanio)

	<p>materiales.</p>	<p>en las DMSNs a través de la incorporación de tetrabutyl ortotitanato (TBOT). La presencia de titania en estas nanoesferas las hace adecuadas para aplicaciones fotocatalíticas.</p> <p><b>-Hollow Dendritic Mesoporous Silica &amp; Titania Nanospheres (HDMSTNs):</b> Estas nanoesferas fueron obtenidas a partir de las DMSTNs mediante un proceso de corrosión alcalina que resultó en la formación de nanoesferas huecas. La estructura hueca de estas nanoesferas puede proporcionar ventajas adicionales para aplicaciones fotocatalíticas y de adsorción.</p>
<p><b>Rendimiento de las nanoesferas:</b></p> <p>-Se evaluó su capacidad para la eliminación de tintes orgánicos, la división del agua y la reducción del dióxido de carbono.</p> <p>-Eliminación de tintes orgánicos, se encontró que las DMSTNs tenían una capacidad de adsorción mejorada en comparación con las DMSNs y el fotocatalizador comercial P25.</p> <p>-La división del agua, se encontró que las DMSTNs tenían una mayor actividad</p>	<p><b>Evolución estructural de las nanoesferas dendríticas mesoporosas de sílice y titanio:</b></p> <p>-Se reveló la evolución estructural de las nanoesferas dendríticas mesoporosas de sílice y titanio desde el estado sólido al estado hueco mediante el uso de microscopía electrónica de barrido (SEM) y microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM).</p> <p>-En primer lugar, se prepararon las nanoesferas híbridas de sílice mesoporosa dendrítica y titania</p>	<p><b>Técnicas de caracterización:</b></p> <p>- Las principales técnicas de caracterización utilizadas para analizar las propiedades estructurales y morfológicas de las nanoesferas dendríticas mesoporosas de sílice y titanio incluyeron:</p> <p><b>-Microscopía Electrónica de Barrido (SEM):</b> Esta técnica se utilizó para obtener imágenes de alta resolución de la morfología superficial de las nanoesferas, lo que permitió observar la estructura dendrítica y la distribución de las</p>

---

fotocatalítica para la producción de hidrógeno bajo irradiación de luz visible y ultravioleta en comparación con las DMSNs y las HDMSTNs.

-La reducción del dióxido de carbono, se encontró que las DMSTNs tenían una mayor actividad fotocatalítica para la producción de monóxido de carbono (CO) en comparación con las DMSNs y las HDMSTNs.

(DMSTN) mediante la incorporación de titanio (titania) en las Dendritic Mesoporous Silica Nanospheres (DMSNs) a través de la incorporación de tetrabutyl ortotitanato (TBOT). Luego, se prepararon las nanoesferas huecas de sílice mesoporosa dendrítica y titania (HDMSTN) mediante un proceso de corrosión alcalina que resultó en la formación de nanoesferas huecas.

-El análisis de SEM y HRTEM reveló que las DMSTNs mantenían la morfología dendrítica con nanopartículas de TiO<sub>2</sub> uniformemente dispersas, mientras que las HDMSTNs no solo mantenían la topología dendrítica, sino que también poseían una textura hueca con nanopartículas de TiO<sub>2</sub> desiguales y agregadas. Además, se encontró que las HDMSTNs tenían una superficie específica y un volumen de poro ligeramente más bajos que las DMSTNs, pero una mayor cantidad de TiO<sub>2</sub>.

la nanopartículas de TiO<sub>2</sub>.

**-Microscopía Electrónica de Transmisión de Alta Resolución (HRTEM):** Esta técnica proporcionó imágenes detalladas de la estructura interna de las nanoesferas, lo que permitió observar la evolución estructural desde el estado sólido al estado hueco, así como la distribución de las nanopartículas de TiO<sub>2</sub> en el interior de las nanoesferas.

**-Difracción de Rayos X (XRD):** La difracción de rayos X se utilizó para determinar la estructura cristalina de las nanoesferas, así como la presencia y distribución de TiO<sub>2</sub> en las muestras.

**-Espectroscopía de Infrarrojo por Transformada de Fourier (FT-IR):** Esta técnica se utilizó para analizar las interacciones químicas y la composición de las nanoesferas, lo que proporcionó información sobre la presencia de grupos funcionales y la formación de enlaces entre los componentes de las nanoesferas.

---

### Equipos y procedimientos:

#### Equipos:

-Microscopio Electrónico de Barrido (SEM): Se utilizó para

---

obtener imágenes de alta resolución de la morfología superficial de las nanoesferas.

-Microscopio Electrónico de Transmisión de Alta Resolución (HRTEM): Proporcionó imágenes detalladas de la estructura interna de las nanoesferas.

3. Difractómetro de Rayos X (XRD): Se empleó para determinar la estructura cristalina de las nanoesferas y la presencia de TiO<sub>2</sub>.

-Espectrómetro de Infrarrojo por Transformada de Fourier (FT-IR): Se utilizó para analizar las interacciones químicas y la composición de las nanoesferas.

Procedimientos:

-Síntesis de las nanoesferas dendríticas mesoporosas de sílice y titanio: Se llevó a cabo mediante la incorporación de tetrabutil ortotitanato (TBOT) en las Dendritic Mesoporous Silica Nanospheres (DMSNs) para formar las nanoesferas híbridas (DMSTNs), seguido por un proceso de corrosión alcalina para formar las nanoesferas huecas (HDMSTNs).

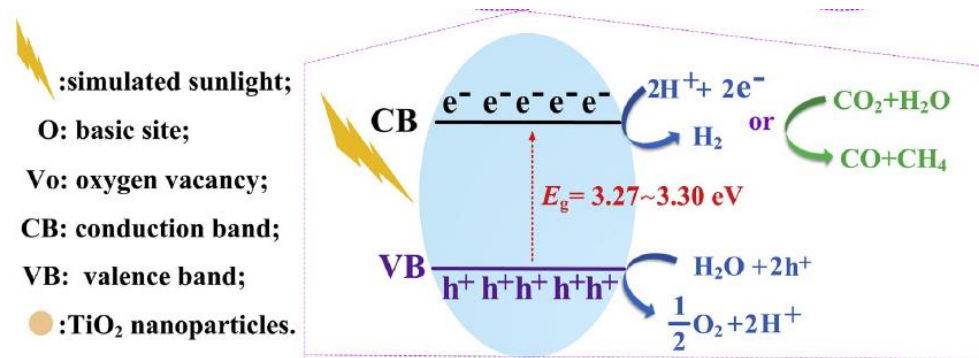
-Caracterización morfológica: Se realizó mediante SEM y

HRTEM para observar la morfología superficial y la estructura interna de las nanoesferas.

3. Análisis estructural: Se llevó a cabo mediante XRD para determinar la estructura cristalina y la presencia de TiO<sub>2</sub> en las muestras.

-Análisis químico: Se realizó mediante FT-IR para analizar las interacciones químicas y la composición de las nanoesferas.

**Reacciones:**



**Titanium–indium oxy(nitride) with and without RuO<sub>2</sub> loading as photocatalysts for hydrogen production under visible light from wáter (Kuo et al., 2013).**

Resumen:	Semiconductores	Carga de nanopartícula
-El uso de materiales compuestos de oxy(nitride) de titanio e indio como fotocatalizadores para la producción de hidrógeno a partir de agua bajo luz visible. El estudio también investiga cómo la carga de RuO <sub>2</sub> afecta la actividad fotocatalítica de estos	-Utiliza materiales compuestos de oxy(nitride) de titanio e indio como fotocatalizadores. Se menciona que los materiales compuestos se modificaron superficialmente con nanopartículas de RuO <sub>2</sub> para mejorar su actividad fotocatalítica.	<b>RuO<sub>2</sub>:</b> - La carga de nanopartículas de RuO <sub>2</sub> en los materiales compuestos de oxy(nitride) de titanio e indio se realizó mediante el uso de Ruthenium(III) acetylacetonate como precursor. La carga de RuO <sub>2</sub> en los materiales

---

materiales compuestos.

compuestos se varió de 1 a 4% en peso. Se encontró que la carga óptima de RuO<sub>2</sub> era del 3% en peso, lo que resultó en la mayor actividad fotocatalítica para la producción de hidrógeno.

---

**Material compuesto:**

-Es necesario mezclar TiO<sub>2</sub> e In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> para producir un material compuesto activo bajo luz visible porque el TiO<sub>2</sub> y el In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> por sí solos no son activos para la producción de hidrógeno bajo luz visible. Sin embargo, cuando se mezclan, se forma un material compuesto de oxo(nitruro) titanio-indio que es activo para la producción de hidrógeno bajo luz visible.

**Eficiencia fotocatalítica:**

-La producción de hidrógeno se midió en 14 μmol/h para el material compuesto de oxo(nitruro) de titanio e indio cargado con 22 μmol de RuO<sub>2</sub> después de 45 horas de irradiación (lámpara de mercurio de alta presión con una potencia de 450 W).  
-La tasa de producción de hidrógeno se puede calcular dividiendo la cantidad de hidrógeno producido por el tiempo de reacción. En este caso, la tasa de producción de hidrógeno sería de aproximadamente 0.31 μmol/h.

**Equipos y procedimientos:**

**-Difracción de rayos X (XRD):** Se utilizó un difractómetro de rayos X para estudiar la estructura cristalina de los materiales compuestos a diferentes temperaturas de amonólisis.

**-Microscopía electrónica de barrido (SEM):** Se empleó un microscopio electrónico de barrido para examinar la morfología de la superficie de los materiales compuestos.

**-Espectroscopía de reflectancia difusa UV-vis (DRS):** Esta técnica se utilizó para estudiar las propiedades de absorción de luz de los materiales compuestos.

**-Espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS):** Se llevó a cabo para analizar la composición química de la superficie de los materiales compuestos.

**-Análisis de área superficial BET:** Se utilizó para determinar

el área superficial de los materiales compuestos.

**Absorbancia:**

- la absorbancia en la región de luz visible variaba con la carga de RuO<sub>2</sub> en los materiales compuestos. Se observó que la carga de RuO<sub>2</sub> en cantidades de 1 a 4% en peso afectaba directamente la actividad de evolución de H<sub>2</sub>, con una absorción óptima en la región de luz visible para una carga de RuO<sub>2</sub> del 3% en peso. Se encontró que un exceso de RuO<sub>2</sub> podría reducir la densidad de sitios activos fotocatalíticos, lo que resultaría en un rendimiento inferior.

**Photocatalytic H<sub>2</sub> production from water splitting under visible light irradiation using Eosin Y-sensitized mesoporous-assembled Pt/TiO<sub>2</sub> nanocrystal photocatalyst (Sreethawong et al., 2009).**

<b>Resumen:</b>	<b>Semiconductores:</b>	<b>Longitud de onda y ancho de banda prohibida (band gap):</b>
-producción de hidrógeno a través de la fotocatálisis de la división del agua utilizando un fotocatalizador de nanocristales de Pt/TiO <sub>2</sub> ensamblados mesoporosos sensibilizados con Eosin Y.	- <b>Mesoporous-assembled TiO<sub>2</sub>:</b> Este semiconductor fue sintetizado mediante el método de sol-gel asistido por microondas y calcinado a diferentes temperaturas. Se caracterizó por su estructura mesoporosa, alta área superficial y tamaño de cristalito anatasa.	la banda prohibida (band gap): longitudes de onda de inicio de absorción para los diferentes semiconductores estudiados:
-El estudio investiga el uso de la irradiación de luz visible para este proceso y proporciona información valiosa sobre el potencial de la producción	<b>-0.6% en peso de Pt-cargado mesoporous-assembled TiO<sub>2</sub>:</b> Este semiconductor fue	-Mesoporous-assembled TiO <sub>2</sub> calcinado a 500°C: 385 nm, Aproximadamente 3.22 eV -Mesoporous-assembled TiO <sub>2</sub> calcinado a 600°C: 390 nm, Aproximadamente 3.18 eV -Mesoporous-assembled TiO <sub>2</sub>

---

sostenible de hidrógeno.	sintetizado mediante la carga de Pt en el mesoporous-assembled TiO <sub>2</sub> . Se caracterizó por su alta dispersión de Pt y su capacidad para absorber luz visible.	calcinado a 700°C: 410 nm, Aproximadamente 3.02 eV - 0.6% en peso de Pt-cargado mesoporous-assembled TiO <sub>2</sub> : 390 nm, Aproximadamente 3.18 eV
	<b>-TiO<sub>2</sub> comercial P-25:</b> Este semiconductor es un polvo de TiO <sub>2</sub> comercialmente disponible que contiene una mezcla de fases anatasa y rutilo. Se caracterizó por su tamaño de cristalito y su capacidad para absorber luz UV.	-TiO <sub>2</sub> comercial P-25: 390 nm, Aproximadamente 3.18 eV -TiO <sub>2</sub> comercial ST-01: 385 nm, Aproximadamente 3.22 eV -TiO <sub>2</sub> comercial JRC-01: 380 nm, Aproximadamente 3.26 eV -TiO <sub>2</sub> comercial JRC-03: 405 nm, Aproximadamente 3.06 eV
	<b>-TiO<sub>2</sub> comercial ST-01:</b> Este semiconductor es un polvo de TiO <sub>2</sub> comercialmente disponible que consiste en una fase anatasa pura. Se caracterizó por su tamaño de cristalito y su capacidad para absorber luz UV.	
	<b>-TiO<sub>2</sub> comercial JRC-01:</b> Este semiconductor es un polvo de TiO <sub>2</sub> comercialmente disponible que consiste en una fase anatasa pura. Se caracterizó por su tamaño de cristalito y su capacidad para absorber luz UV.	
	<b>-TiO<sub>2</sub> comercial JRC-03:</b> Este semiconductor es un polvo de TiO <sub>2</sub> comercialmente disponible que consiste en una fase rutilo pura. Se caracterizó por su tamaño de cristalito y su	

---

capacidad para absorber luz UV.		
<b>Eficiencia fotocatalítica:</b>	<b>Fotocatálisis:</b>	<b>Concentración de dietilamina (DEA):</b>
<p>-Los resultados experimentales mostraron que el TiO<sub>2</sub> mesoporoso ensamblado con carga de Pt (0.6% en peso) calcinado a 500°C exhibió la mayor eficiencia fotocatalítica para la producción de hidrógeno a partir de una solución acuosa de dietilamina (DEA) que contenía 2 mM de Eosina Y (E.Y.) como sensibilizador bajo irradiación de luz visible. La eficiencia fotocatalítica se midió en términos de la cantidad de hidrógeno producido por unidad de tiempo y de la cantidad de fotones absorbidos por el fotocatalizador. La eficiencia fotocatalítica del TiO<sub>2</sub> mesoporoso ensamblado con carga de Pt (0.6% en peso) calcinado a 500°C fue de aproximadamente 0.5 mmol h<sup>-1</sup> g<sup>-1</sup> bajo irradiación de luz visible, lo que fue significativamente mayor que la eficiencia fotocatalítica de los otros fotocatalizadores de TiO<sub>2</sub> estudiados. Estos resultados sugieren que la modificación de la estructura y la composición del TiO<sub>2</sub> puede</p>	<p>-El fotocatalizador de nanocristales de Pt/TiO<sub>2</sub> mesoporoso sensibilizado con Eosina Y se expuso a la irradiación de luz visible, lo que activó la reacción de división del agua. -La Eosina Y, utilizada como sensibilizador, absorbe la luz visible y genera pares electrón-hueco en el fotocatalizador. Estos pares electrón-hueco participan en reacciones redox que conducen a la división del agua en hidrógeno y oxígeno. El Pt cargado en el fotocatalizador actúa como un co-catalizador que facilita la reacción de reducción del agua, promoviendo la evolución de hidrógeno. -La presencia de dietilamina (DEA) como donante de electrones contribuye al proceso al proporcionar electrones para la reducción del agua, lo que favorece la producción de hidrógeno.</p>	<p>-La concentración de dietilamina (DEA) utilizada en el estudio fue del 30 vol.%, la cual se determinó como la concentración óptima para la regeneración del sensibilizador y la prevención de la recombinación de electrones-excited sensitizer, lo que resultó en una producción máxima de hidrógeno a partir de la división del agua utilizando el fotocatalizador de nanocristales de Pt/TiO<sub>2</sub> mesoporoso sensibilizado con Eosina Y.</p>

mejorar significativamente su eficiencia fotocatalítica en aplicaciones de producción de hidrógeno a partir de la división del agua.

<b>Efecto de la carga Pt:</b>	<b>Concentración de Eosina:</b>	<b>Materiales utilizados:</b>
<p>-El efecto de la carga de Pt en la eficacia del proceso fotocatalítico de producción de hidrógeno a partir de la división del agua utilizando un fotocatalizador de nanocristales de Pt/TiO<sub>2</sub> mesoporoso sensibilizado con Eosina Y es significativo.</p> <p>-Se encontró que el fotocatalizador de nanocristales de Pt/TiO<sub>2</sub> mesoporoso sensibilizado con Eosina Y y con carga de Pt (0.6 wt.%) exhibió una tasa de producción de hidrógeno significativamente mayor que el fotocatalizador sin carga de Pt. Esto sugiere que la carga de Pt en el fotocatalizador mejora la eficiencia del proceso fotocatalítico al aumentar la adsorción del sensibilizador y la separación de cargas.</p>	<p>- En cuanto al efecto de la concentración de Eosina Y en la producción de hidrógeno a partir de la división del agua utilizando un fotocatalizador de nanocristales de Pt/TiO<sub>2</sub> mesoporoso sensibilizado con Eosina Y, se encontró que la concentración óptima de Eosina Y fue de 2 mM. Se observó que la producción de hidrógeno aumentó con el aumento de la concentración de Eosina Y, pero solo hasta un cierto punto, después del cual la producción de hidrógeno disminuyó. Esto se debe a que la cantidad de Eosina Y adsorbida en la superficie del fotocatalizador es limitada y, por lo tanto, una concentración más alta de Eosina Y no aumenta la producción de hidrógeno.</p>	<p>-Tetraisopropyl orthotitanate (TIPT) - precursor de titanio para la síntesis del fotocatalizador de TiO<sub>2</sub>.</p> <p>-Laurylamine hydrochloride (LAHC) - surfactante estructurante utilizado como agente de formación de mesoporos y asistente de gelación.</p> <p>-Acetylacetone (ACA) - agente modificador utilizado para modular los pasos de hidrólisis y condensación.</p> <p>-Hydrogen hexachloroplatinate (IV) hexahydrate (H<sub>2</sub>PtCl<sub>6</sub>·6H<sub>2</sub>O) - precursor de platino utilizado como sitios activos de producción de hidrógeno.</p> <p>Diethanolamine (DEA) - donante de electrones utilizado en el sistema de reacción fotocatalítica.</p> <p>-Eosin Y - sensibilizador utilizado en el sistema de reacción fotocatalítica.</p> <p>-TiO<sub>2</sub> comercial - se utilizaron</p>

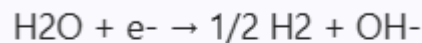
---

varios tipos de TiO<sub>2</sub> comercial (P-25, ST-01, JRC-01, JRC-03) para comparaciones en la producción de hidrógeno.  
-Otros reactivos químicos de grado analítico.

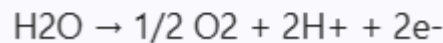
---

**Reacciones:**

1. Reducción del agua:



2. Oxidación del agua:



**Hydrogen production by photocatalytic wáter splitting using poly(allylamine hydrochloride)/poly(acrylic acid)/TiO<sub>2</sub>/copper chlorophyllin selfassembled thin films** (Vebber et al., 2016).

---

**Resumen:**

-Se centra en la fabricación y caracterización de películas delgadas autoensambladas (SATF) mediante una combinación de poli (alilamina clorhidrato), poli (ácido acrílico), nanopartículas de dióxido de titanio y clorofilina de cobre sódico, utilizando la técnica de depósito capa por capa. Estas películas delgadas fueron luego caracterizadas utilizando diversas técnicas, y su actividad fotocatalítica fue evaluada mediante la cuantificación de la producción de hidrógeno al exponer las

**Banda de energía:**

-Se menciona que la clorofilina de cobre sódico y los grupos carboxilato presentes en los polielectrolitos interactúan fuertemente con la banda de conducción 3d orbital del titanio, estableciendo un acoplamiento electrónico que sirve como un camino para la transferencia de carga. También se hace referencia a otros estudios que investigan la ingeniería de la banda de energía en materiales fotocatalíticos, como la codopificación de anatasa TiO<sub>2</sub> con azufre y metales aceptores IIB para la división del agua.

**Longitud de onda:**

-La clorofilina de cobre sódico presenta dos bandas de absorción en la región visible del espectro, con picos a 403 nm y 628 nm.  
-El dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) muestra una única banda de absorción en la región del UV cercano a 271 nm.

---

películas al agua e irradiarlas con un simulador solar. Los resultados muestran que la clorofilina de cobre sódico mejora la actividad catalítica del dióxido de titanio, más que duplicando la tasa de producción de hidrógeno en comparación con las películas delgadas fabricadas solo con los polielectrolitos y el dióxido de titanio

Características de las películas delgadas autoensambladas (STAF):	Equipos y procedimientos:	Reacciones químicas:
<p>- Las SATF se fabricaron mediante la técnica de autoensamblado capa por capa (LbL) utilizando poli (alilamina clorhidrato) (PAH), poli(ácido acrílico) (PAA), nanopartículas de dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) y clorofilina de cobre sódico (Cu-chln).</p> <p>- La estructura de las SATF es granulada y heterogénea, con aglomeraciones esféricas ricas en titanio.</p> <p>- La concentración de titanio en las SATF aumenta con el número de capas depositadas, lo que sugiere que las nanopartículas de TiO<sub>2</sub> actúan como núcleos para el</p>	<p><b>-Espectrofotómetro UV-visible:</b> se utilizó para medir la absorbancia de las soluciones de polielectrolitos y Cu-chln utilizadas en la fabricación de las SATF.</p> <p><b>-Microscopio electrónico de barrido (SEM):</b> se utilizó para caracterizar la morfología y la estructura de las SATF.</p> <p><b>-Espectroscopía de emisión óptica de plasma acoplado inductivamente (ICP-OES):</b> se utilizó para cuantificar las concentraciones de cobre y titanio en las SATF.</p> <p><b>-Gas cromatógrafo (GC):</b> se utilizó para cuantificar la producción de hidrógeno en las SATF.</p> <p><b>-Reactor fotocatalítico:</b> se</p>	<p><b>-Autoensamblado capa por capa:</b> Durante la fabricación de las SATF mediante la técnica de autoensamblado capa por capa, se esperan reacciones de adsorción y electrostáticas entre los polielectrolitos (PAA, PAH) y las nanopartículas de TiO<sub>2</sub> y Cu-chln. Estas reacciones podrían implicar interacciones electrostáticas entre los grupos cargados de los polielectrolitos y las superficies de las nanopartículas, lo que resulta en la formación de capas alternas.</p> <p><b>-Fotocatálisis para la producción de hidrógeno:</b> Durante la evaluación de la actividad fotocatalítica de las SATF, se espera que la reacción de división del agua ocurra en</p>

crecimiento de la película. utilizó para llevar a cabo la presencia de luz solar simulada.

- El grosor de las SATF varía reacción de producción de En el caso del TiO<sub>2</sub>, la reacción con el número de capas hidrógeno en las SATF. general de fotocatalisis para la depositadas, y se estabiliza a **-Técnica de autoensamblado capa por capa (LbL):** se utilizó la generación de pares electrón-hueco bajo la irradiación, medida que se depositan más para fabricar las SATF mediante seguida por la reducción del capas. la inmersión de un sustrato en soluciones alternas de agua para producir hidrógeno y de hidrógeno, más que polielectrolitos y nanopartículas de TiO<sub>2</sub> y Cu-chln. la oxidación de agua para liberar duplicando la tasa de producción **-Espectroscopía de reflectancia difusa (DRS):** se utilizó para medir la absorbancia de las SATF en el rango de de hidrógeno en comparación con las SATF que solo contienen polielectrolitos y TiO<sub>2</sub>. longitud de onda visible.

- Se fabricaron SATF con 21, 81 **-Perfilometría:** se utilizó para medir el espesor de las SATF. y 161 capas, con espesores de 1.54 mm, 2.46 mm y 2.78 mm, respectivamente.

- Las tasas promedio máximas de producción de hidrógeno fueron de 0.16 mmol cm<sup>-2</sup> h<sup>-1</sup> para las SATF con 21 capas, 0.45 mmol cm<sup>-2</sup> h<sup>-1</sup> para las SATF con 81 capas, y 1.26 mmol cm<sup>-2</sup> h<sup>-1</sup> para las SATF con 161 capas.

**Noble metal-free cobalt oxide (CoOx) nanoparticles loaded on titanium dioxide/cadmium sulfide composite for enhanced photocatalytic hydrogen production from water** (Yan et al., 2014).

<b>Resumen:</b>	<b>Semiconductores:</b>	<b>Eficiencia fotocatalítica:</b>
-Se centra en el estudio de nanopartículas de óxido de cobalto (CoOx) como un cocatalizador efectivo en un sistema de producción de	- Dióxido de titanio (TiO <sub>2</sub> ). - Sulfuro de cadmio (CdS): Gab 2.4 e.V - Óxido de cobalto (CoOx). - Cu <sub>2</sub> O.	-Se menciona que la carga óptima de CoOx en el compuesto de dióxido de titanio/sulfuro de cadmio mejora significativamente la actividad

---

hidrógeno fotocatalítico. Se investiga la carga de CoOx en un compuesto de dióxido de titanio/sulfuro de cadmio para mejorar la producción de hidrógeno a partir del agua mediante la fotocatalisis. El estudio incluye la preparación y caracterización detallada del compuesto, así como la evaluación de su actividad fotocatalítica para la producción de hidrógeno. Los resultados muestran que la carga adecuada de CoOx en el compuesto mejora significativamente la actividad fotocatalítica y aumenta la evolución de hidrógeno a partir del agua bajo irradiación de luz visible.

-ZnO.  
-CdSe y CdTe.  
-NaTaO<sub>3</sub>.  
-Graphitic C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>.  
-Nanopartículas de Cu<sub>2</sub>O protegidas por nanopartículas de Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>.  
-Sales inorgánicas de cobalto.

fotocatalítica, con una tasa de evolución de hidrógeno aproximadamente 7 veces mayor que la del compuesto de dióxido de titanio/sulfuro de cadmio puro. Además, se observa una producción lineal de hidrógeno incluso después de 12 horas de irradiación, lo que indica una buena estabilidad del sistema para la producción de hidrógeno fotocatalítico.

-La tasa de evolución de hidrógeno para el compuesto de dióxido de titanio/sulfuro de cadmio cargado con 2.1% en peso de CoOx se informa en el artículo como aproximadamente 660 mmol g<sup>-1</sup> h<sup>-1</sup> en una solución acuosa de 20 mL.

---

<p><b>Banda de energía:</b></p> <p>-Antes de la introducción del CoOx, en la banda de energía del semiconductor compuesto de dióxido de titanio/sulfuro de cadmio, se producen reacciones de absorción de luz para generar pares electrón-hueco. Estos pares electrón-hueco pueden participar en reacciones de reducción y oxidación del agua para producir hidrógeno y oxígeno, respectivamente.</p> <p>-Después de la introducción del</p>	<p><b>Compuesto de TiO<sub>2</sub>/CdS cargado con CoOx:</b></p> <p>- El compuesto de TiO<sub>2</sub>/CdS cargado con CoOx fue preparado mediante un método solvotermal simple, que implica la reacción en fase líquida a alta temperatura en presencia de un solvente. En este proceso, se utilizó una cantidad calculada de nitrato de cobalto hexahidratado (Co(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·6H<sub>2</sub>O) dispersado en etanol, al que se le añadió polvo de Degussa P25 (una</p>	<p><b>Barredores de agujeros:</b></p> <p>- Los barredores de agujeros utilizados en la solución acuosa para la producción fotocatalítica de hidrógeno fueron sulfuro de sodio (Na<sub>2</sub>S) y sulfito de sodio (Na<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>). Estos compuestos actúan como agentes para capturar los huecos generados durante la reacción fotocatalítica, lo que permite que los electrones generados participen en la reducción del agua para producir hidrógeno.</p>
--	---	---

---

CoOx, se observa un cambio en la banda de energía del semiconductor, lo que puede influir en las reacciones que tienen lugar. La presencia de CoOx puede facilitar la transferencia de electrones, reduciendo la recombinación de pares electrón-hueco y mejorando la eficiencia de las reacciones de reducción del agua para la producción de hidrógeno. Además, el CoOx puede actuar como un sitio activo para la reacción de reducción del agua, lo que también puede influir en las reacciones que tienen lugar en la banda de energía del semiconductor.

mezcla de aproximadamente 80% de anatasa y 20% de rutilo de dióxido de titanio) y se sometió a ultrasonido. Después de un período de remojo y secado, los polvos se calcinaron a 673 K para obtener el producto final.

- Este compuesto cargado con CoOx demostró ser altamente activo en la producción fotocatalítica de hidrógeno a partir de agua, especialmente cuando se utilizó en combinación con sulfuro de sodio (Na<sub>2</sub>S) y sulfito de sodio (Na<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>) como agentes de captura de huecos en la solución acuosa. La presencia de CoOx en el compuesto mejoró significativamente la eficiencia de separación de cargas y la transferencia de electrones, lo que resultó en una mayor tasa de evolución de hidrógeno en comparación con el compuesto de TiO<sub>2</sub>/CdS sin carga de CoOx.

---

**Equipos y procedimientos:**

- Síntesis del compuesto: se utilizó un método solvotermal simple que implica la reacción en fase líquida a alta temperatura en presencia de un solvente. Los materiales utilizados incluyeron

**Corriente bajo irradiación:**

-La corriente generada bajo irradiación y en la oscuridad para el compuesto de TiO<sub>2</sub>/CdS sin carga de CoOx fue de alrededor de 0.1  $\mu$ A/cm<sup>2</sup> en ambas condiciones. En cambio,

nitrate de cobalto hexahidratado, la corriente generada bajo polvo de Degussa P25, etanol y irradiación y en la oscuridad otros reactivos químicos. para el compuesto de TiO<sub>2</sub>/CdS

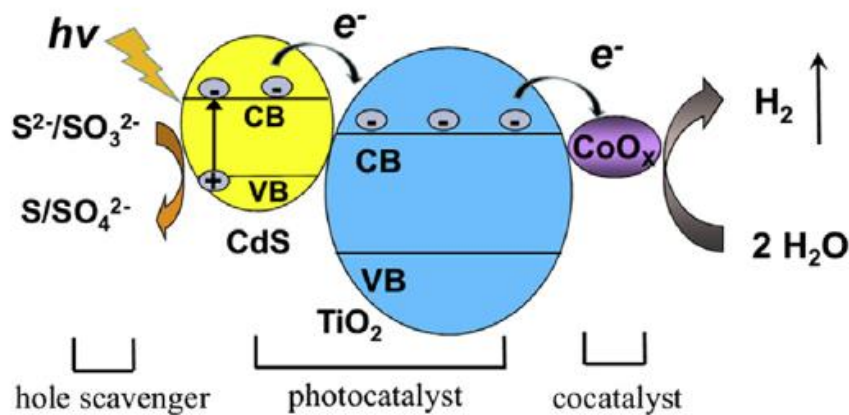
-Caracterización del compuesto: cargado con CoOx fue de se utilizaron diversas técnicas, alrededor de 0.2  $\mu$ A/cm<sup>2</sup> en incluyendo difracción de rayos ambas condiciones. Estos X (XRD) para identificar la resultados indican que la estructura cristalina, microscopía presencia de CoOx en el electrónica de transmisión compuesto de TiO<sub>2</sub>/CdS mejora (TEM) para observar la la corriente fotocatalítica en morfología y el tamaño de comparación con el compuesto partícula, espectroscopía de sin carga de CoOx. Además, la reflectancia difusa ultravioleta- corriente generada en ambas visible (UV-Vis DRS) para condiciones (bajo irradiación y analizar las propiedades de en la oscuridad) es relativamente absorción de luz, y estable, lo que sugiere que el espectroscopía de fotoelectrones compuesto de TiO<sub>2</sub>/CdS de rayos X (XPS) para estudiar cargado con CoOx es más las propiedades de superficie y estable que el compuesto sin la composición química. carga de CoOx.

- Evaluación de la actividad fotocatalítica: se llevaron a cabo experimentos de producción de hidrógeno a partir de agua utilizando el compuesto de TiO<sub>2</sub>/CdS cargado con CoOx como fotocatalizador. Se utilizaron sulfuro de sodio y sulfito de sodio como barredores de agujeros en la solución acuosa. Se midió la tasa de evolución de hidrógeno y se evaluaron otros parámetros, como la cantidad de carga de

CoOx y la concentración de los barredores de agujeros.

- Medición de la corriente fotocatalítica: se midió la corriente fotocatalítica de los compuestos de TiO<sub>2</sub>/CdS cargados con CoOx y sin carga de CoOx utilizando un electrodo fotoelectroquímico. Se midió la corriente generada bajo irradiación y en la oscuridad para evaluar la estabilidad del compuesto.

#### Reacciones:



#### Cu<sub>x</sub>O and carbonmodified TiO<sub>2</sub>based hybrid materials for photocatalytically assisted H<sub>2</sub> generation (Tobaldi et al., 2021).

##### Resumen:

-Se centra en el desarrollo y la caracterización de materiales híbridos de Cu<sub>x</sub>O y TiO<sub>2</sub> modificados con carbono para la generación de H<sub>2</sub> mediante fotocatalisis. Explora la eficiencia de estos materiales en

##### Semiconductores:

-Nanopartículas de dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) como el semiconductor principal para la generación de hidrógeno mediante fotocatalisis.  
-Se modifica la superficie de las nanopartículas de TiO<sub>2</sub> con

##### Tasa de producción:

-El fotocatalizador Cu<sub>0.5</sub>/GNP<sub>0.5</sub> mostró una tasa de producción de hidrógeno dos veces mayor que la del titania no modificado en una mezcla de metanol/agua bajo irradiación UVA. Además, se informa que

---

la producción de hidrógeno, un combustible de emisión cero, y analiza su potencial para la generación de energía verde. Además, el estudio aborda aspectos mecanicistas de la generación de hidrógeno mediante fotocátalisis y proporciona datos experimentales sobre la actividad fotocatalítica de los materiales.

cobre (Cu) y grafeno para formar híbridos nanoestructurados. Estos híbridos se prueban en la generación de hidrógeno mediante la fotocátalisis utilizando metanol como agente sacrificial.

el fotocatalizador Cu<sub>0.5</sub>/GNP1.0 mostró una tasa de producción de hidrógeno cinco veces mayor que la del P25 comercial bajo irradiación visible.

---

<b>Equipos y procedimientos:</b>	<b>Caracterización de los materiales:</b>	<b>Evaluación de la actividad fotocatalítica:</b>
-Síntesis de los fotocatalizadores: El método de síntesis utilizado para preparar los fotocatalizadores Cu <sub>0.5</sub> /GNP0.5 y Cu <sub>0.5</sub> /GNP1.0 involucró la modificación de nanopartículas de TiO <sub>2</sub> con cobre y nanoplátalos de grafeno.	-Se utilizaron diversas técnicas de caracterización, como difracción de rayos X, espectroscopía Raman, microscopía electrónica de transmisión, espectroscopía de pérdida de energía, entre otras, para analizar la estructura, composición y propiedades de los fotocatalizadores.	-La actividad fotocatalítica de los fotocatalizadores se evaluó mediante pruebas de generación de hidrógeno utilizando una solución de metanol como agente sacrificial. Se utilizaron fuentes de luz UVA y visible para irradiar los fotocatalizadores durante las pruebas de actividad.

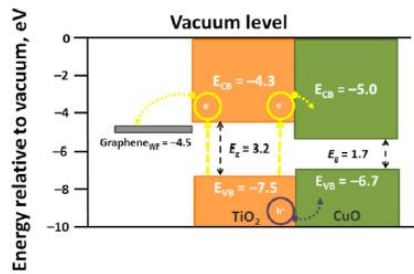
---

**Reacciones:**

- lámpara UVA (365 nm).

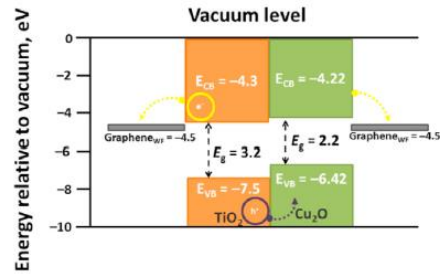
---

Potential Vs AVS



a)

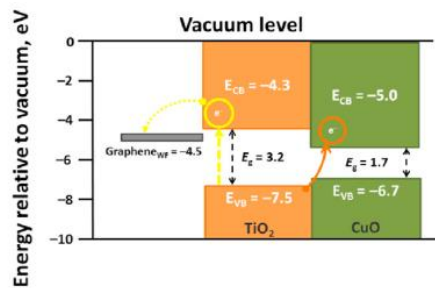
Potential Vs AVS



b)

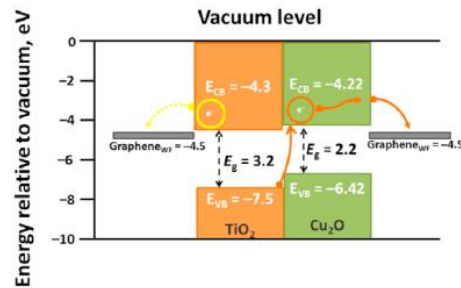
- la lámpara LED de luz visible (405 nm).

Potential Vs AVS



a)

Potential Vs AVS



b)

### CdS-loaded three-dimensional ordered macroporous composite material

**In2O3-TiO2: Construction of type II heterostructure and enhancement of photocatalytic performance** (Huo et al., 2023).

#### Resumen:

-Se centra en la síntesis de un material compuesto tridimensional ordenado macroporoso (3DOM) de CdS/In2O3-TiO2 y su aplicación en la fotocatalisis, incluida la fotólisis del agua para producir hidrógeno. Se discute en detalle la estructura y las propiedades del material compuesto, así como su rendimiento fotocatalítico mejorado. Además, se exploran las

#### Semiconductores:

-CdS: El sulfuro de cadmio (CdS) es un semiconductor con un ancho de banda de energía de 2.4 eV y una buena absorción de luz visible en longitudes de onda más cortas que 516 nm. Además, el CdS tiene buenas capacidades de transporte de portadores, lo que permite que los electrones y huecos generados por la luz se muevan eficazmente, prolongando la vida de los portadores fotogenerados y

#### Reacciones:

- Durante la fotocatalisis, los electrones y huecos son generados en los semiconductores CdS, In2O3 y TiO2 bajo la irradiación de luz. Los huecos en la banda de valencia del TiO2 son transferidos a la banda de valencia del In2O3, y los huecos en la banda de valencia del In2O3 son transferidos a la banda de valencia del CdS. De manera similar, los electrones en

aplicaciones potenciales de este material en la degradación de contaminantes orgánicos y la producción de hidrógeno a partir de fuentes renovables de energía.

conduciendo a una mayor actividad fotocatalítica.

**-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub>:** El ancho de banda de energía es de 3.37 eV. La combinación de óxido de indio (In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) con dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) forma un material compuesto con una estructura tipo II heterounión. Esta combinación permite una absorción efectiva de luz visible y una mayor eficiencia en la separación y transferencia de portadores fotogenerados. Además, la estructura tridimensional ordenada macroporosa de este material compuesto contribuye a la absorción de luz y a la reducción del espacio de banda óptica, mejorando su rendimiento fotocatalítico.

**-TiO<sub>2</sub>:** su respuesta a la luz se limita principalmente a la región de luz ultravioleta. En el estudio, se discute cómo la combinación de TiO<sub>2</sub> con otros semiconductores, como In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, puede ampliar el rango de absorción de luz del material compuesto, mejorando así su rendimiento fotocatalítico.

la banda de conducción del In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> son transferidos a la banda de conducción del CdS y del TiO<sub>2</sub>.

-Durante la fotocatalisis, los electrones y huecos generados en los semiconductores pueden reaccionar con moléculas de agua y oxígeno para producir radicales hidroxilos (•OH) y oxígeno singlete (1O<sub>2</sub>), que son especies altamente reactivas que pueden degradar contaminantes orgánicos.

-Además, el material compuesto CdS/In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> también puede ser utilizado para la producción de hidrógeno a través de la fotólisis del agua. Durante la fotólisis del agua, los electrones generados en los semiconductores pueden reaccionar con protones (H<sup>+</sup>) en el agua para producir hidrógeno (H<sub>2</sub>).

---

<b>Anchos de banda de energía:</b>	<b>Rendimiento fotocatalítico:</b>	<b>Cantidad de hidrogeno producido:</b>
-El ancho de banda de energía	El alto rendimiento fotocatalítico	

---

---

del CdS es de 2.4 eV.	del compuesto 3DOM	- Según el estudio, la cantidad de
-El ancho de banda de energía del In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -TiO <sub>2</sub> es de 3.37 eV.	CdS/In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -TiO <sub>2</sub> se debe a varias razones fundamentales:	hidrógeno producido por el compuesto fue de 529 μmol·g <sup>-1</sup> en un período de 8 horas, lo que es 40.7 veces mayor que la cantidad producida por el material de referencia P25.
-El ancho de banda de energía del 3DOM In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -TiO <sub>2</sub> es de 3.35 eV.	<b>-Estructura tridimensional ordenada macroporosa:</b> La estructura tridimensional ordenada macroporosa del compuesto permite una mayor absorción de luz visible, optimiza la eficiencia de transferencia de carga y prolonga la vida útil de los portadores fotogenerados. Esta estructura proporciona una mayor área superficial y facilita la interacción entre el material y los contaminantes orgánicos o el agua, lo que mejora la eficiencia fotocatalítica.	Además, el estudio también informa que la adición de Pt como co-catalizador mejoró aún más la producción de hidrógeno del compuesto 3DOM CdS/In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -TiO <sub>2</sub> . Con la adición de Pt, la cantidad de hidrógeno producido por el compuesto fue de 3428 μmol·g <sup>-1</sup> en un período de 8 horas, lo que es 6.5 veces mayor que la cantidad producida por el compuesto sin Pt.
El ancho de banda de energía del 3DOM CdS/In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -TiO <sub>2</sub> es de 2.35 eV.	<b>-Amplio rango de absorción de luz:</b> La combinación de CdS, In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> y TiO <sub>2</sub> en el compuesto permite una absorción efectiva de luz visible, lo que amplía el rango de longitudes de onda de luz que pueden ser utilizadas para la fotocatalisis. Esto aumenta la eficiencia del proceso fotocatalítico al aprovechar una mayor cantidad de energía luminosa.	
	<b>Heterouniones y transferencia de carga eficiente:</b> La presencia de heterouniones entre los	

---

diferentes componentes del compuesto facilita la transferencia eficiente de electrones y huecos, lo que reduce la recombinación de portadores y mejora la eficiencia de separación de carga. Esto contribuye a una mayor actividad fotocatalítica en la degradación de contaminantes orgánicos y en la producción de hidrógeno a partir de la fotólisis del agua.

---

#### **Equipos y procedimientos:**

##### **Equipos:**

- Se utilizó un horno de tubo para calcinar los materiales y eliminar la plantilla de microesferas de poliestireno (PS).

-Se empleó un espectrofotómetro UV-Vis para medir la absorbancia de los compuestos y evaluar su capacidad de absorción de luz.

- Se utilizó un microscopio electrónico de barrido (SEM) para caracterizar la morfología y la estructura del compuesto antes y después de los experimentos fotocatalíticos.

-Se empleó un difractómetro de rayos X (XRD) para analizar la estructura cristalina del

---

compuesto 3DOM CdS/In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub>.

- Se utilizó un microscopio electrónico de transmisión de alta resolución (HR-TEM) para estudiar la morfología y la estructura del compuesto a nivel nanométrico.

Procedimientos:

- Se utilizó un método de plantilla de microesferas de poliestireno (PS) para sintetizar el compuesto 3DOM CdS/In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub>.

- Se empleó un método de baño de agua para cargar el CdS en el compuesto 3DOM In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> y obtener el compuesto 3DOM CdS/In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub>.

- Se llevaron a cabo experimentos de fotólisis del agua y de degradación de contaminantes orgánicos bajo condiciones de luz ultravioleta y luz visible, y se midió la cantidad de hidrógeno producido.

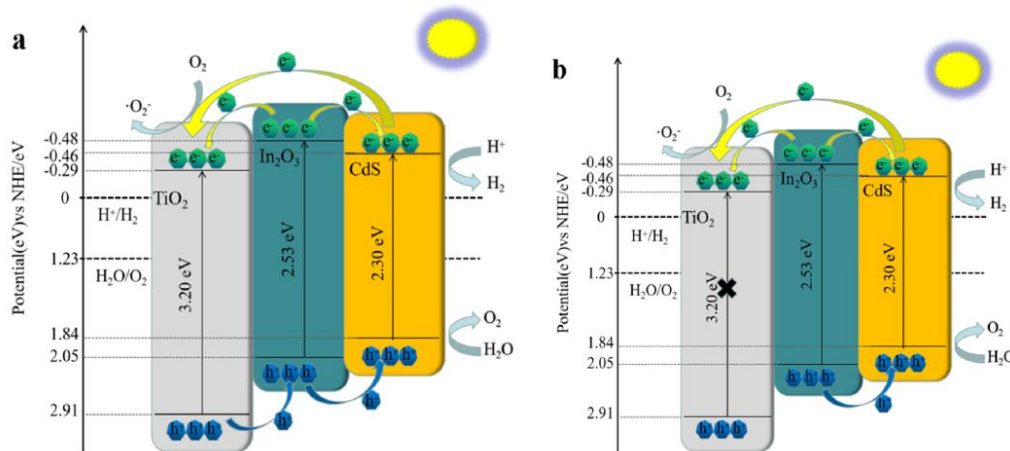
- Se realizó un análisis de espectroscopía de emisión de rayos X (EDS) para determinar la composición del compuesto 3DOM CdS/In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub>.

- Se llevaron a cabo experimentos de ciclo para

---

evaluar la estabilidad y la reutilización del compuesto 3DOM CdS/In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> en la fotólisis del agua.

**Reacciones:**



**Enhanced photoelectrochemical characteristic of TiO<sub>2</sub> nanotubes via surface plasma treatment** (Han et al., 2021).

**Resumen:**

-Se centra en el uso de un tratamiento de plasma para mejorar las características fotoelectroquímicas de nanotubos de TiO<sub>2</sub>. Se describe cómo este tratamiento modifica la estructura superficial y la configuración electrónica de los nanotubos, lo que conduce a una mayor actividad fotocatalítica. Además, se detallan los métodos de caracterización de los materiales y se presentan los resultados experimentales que respaldan la mejora en la

**Banda de energía:**

- La brecha de energía entre la banda de valencia y la banda de conducción del TiO<sub>2</sub> es de alrededor de 3,2 electronvoltios (eV), lo que corresponde a la región del ultravioleta del espectro electromagnético. Esto significa que el TiO<sub>2</sub> solo puede absorber luz en esta región del espectro, lo que limita su eficiencia como fotocatalizador para la producción de hidrógeno a partir de la división del agua.

**Longitud de onda:**

- El TiO<sub>2</sub> tiene una brecha de

**Propiedades estructurales:**

-Se observó que los nanotubos de TiO<sub>2</sub> tratados con plasma tenían una estructura nanoporosa, lo que resultó en un aumento en el área superficial específica. Además, se observó una disminución en la cristalinidad de los nanotubos de TiO<sub>2</sub> después del tratamiento de plasma, lo que sugiere una parcial amorfización en la superficie de los nanotubos de TiO<sub>2</sub>. Estos cambios en la estructura de los nanotubos de TiO<sub>2</sub> después del tratamiento de

---

actividad fotoelectroquímica. energía que corresponde a plasma se asociaron con una longitudes de onda en la región mejora en la absorción de luz y del ultravioleta, alrededor de 387 un aumento en la eficiencia nm. Esto significa que el TiO<sub>2</sub> fotocatalítica. absorbe luz con longitudes de onda cortas, lo que limita su eficiencia para absorber luz visible.

---

<b>Modulaciones electrónicas:</b>	<b>Equipos y procedimientos:</b>	<b>Absorción de luz UV y visible:</b>
-Las modulaciones electrónicas logradas mediante el tratamiento con plasma iónico incluyen la mejora del transporte de carga y la absorción de luz en los nanotubos de TiO <sub>2</sub> . El tratamiento con plasma con iones modifica la configuración electrónica de los nanotubos de TiO <sub>2</sub> , lo que mejora la movilidad de los portadores de carga y promueve la interacción entre los reactivos y la superficie de los nanotubos. Esto facilita la transferencia de carga durante las reacciones fotocatalíticas, lo que a su vez mejora la eficiencia del proceso. Además, la modulación electrónica lograda a través del tratamiento con plasma con iones también mejora la absorción de luz en los nanotubos de TiO <sub>2</sub> , lo que aumenta la eficiencia en la conversión de energía luminosa	<b>-Síntesis de nanotubos de TiO<sub>2</sub>:</b> Los nanotubos de TiO <sub>2</sub> se sintetizaron mediante un proceso de anodización electroquímica. <b>-Tratamiento con plasma de iones:</b> Los nanotubos de TiO <sub>2</sub> se sometieron a un tratamiento con plasma de iones utilizando un sistema de plasma de iones con un suministro de RF de 800 W con Ar (15 sccm) a 15 mTorr durante diferentes tiempos de exposición. <b>-Caracterización de materiales:</b> Se llevaron a cabo diversas caracterizaciones de materiales, incluyendo análisis de difracción de rayos X (XRD), microscopía electrónica de barrido de emisión de campo (FE-SEM), microscopía electrónica de transmisión (TEM) y espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS). <b>-Caracterización</b>	-Después del tratamiento con plasma de iones, se observó un aumento en la absorción de luz UV y visible de los nanotubos de TiO <sub>2</sub> . Este aumento en la absorción de luz UV se atribuyó a un aumento en la superficie específica de los nanotubos de TiO <sub>2</sub> después del tratamiento con plasma de iones. Por otro lado, el aumento en la absorción de luz visible se atribuyó a la formación de una fase amorfa en la superficie de los nanotubos de TiO <sub>2</sub> después del tratamiento con plasma de iones. Estos cambios en la absorción de luz UV y visible se relacionaron directamente con el rendimiento fotoelectroquímico mejorado de los nanotubos de TiO <sub>2</sub> tratados con plasma de iones.

---

en energía química.

**fotoelectroquímica:** Se utilizó un sistema estándar de tres electrodos conectado a un potencióstato (Metrohm, AUTOLAB), con lámparas de xenón como fuente de luz externa. Se realizaron pruebas de cronoamperometría y voltimetría de barrido lineal (LSV), así como espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS).

---

**Copper doped titanium dioxide as a low-cost visible light photocatalyst for water splitting** (Thi Quyen et al., 2021).

---

**Resumen:**

-El uso de dióxido de titanio dopado con cobre como un fotocatalizador de bajo costo para la división del agua mediante la luz visible. El estudio explora las propiedades estructurales, ópticas y fotocatalíticas del dióxido de titanio dopado con cobre y su potencial para la producción de hidrógeno a partir de la división del agua utilizando energía solar. El artículo también discute el mecanismo propuesto para la división del agua y las posibles aplicaciones de este fotocatalizador de bajo costo en la producción de energía solar y tecnologías sostenibles de

**Semiconductores:**

-Se centra en el uso de dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) como semiconductor para aplicaciones fotocatalíticas, específicamente en la división del agua para la producción de hidrógeno. Además, se discute el dopaje de TiO<sub>2</sub> con iones de cobre (Cu) para mejorar sus propiedades fotocatalíticas. En cuanto a las nanopartículas, se menciona el uso de nanomateriales de TiO<sub>2</sub> y Cu-TiO<sub>2</sub> para la generación de hidrógeno mediante la división del agua bajo la irradiación de luz solar.

**Banda de energía:**

-El TiO<sub>2</sub> tiene un ancho de banda de energía (E<sub>g</sub>) de alrededor de 3,2 eV, lo que lo hace adecuado para trabajar bajo la irradiación de luz ultravioleta (UV). Por otro lado, el dopaje de iones de cobre en la estructura de TiO<sub>2</sub> reduce el ancho de banda de energía a alrededor de 2,7 eV, lo que permite una mayor absorción de luz visible y mejora la eficiencia fotocatalítica en la división del agua.

división del agua.

<b>Eficiencia fotocatalítica:</b>	<b>Propiedades:</b>	<b>Mecanismo para la división del agua:</b>
<p>-El dióxido de titanio dopado con cobre (Cu-TiO<sub>2</sub>) exhibió una mayor eficiencia fotocatalítica en la división del agua para la producción de hidrógeno en comparación con el TiO<sub>2</sub> no dopado. Se reportó que la tasa de evolución de hidrógeno utilizando Cu-TiO<sub>2</sub> fue de 45,6 mmol/h, en contraste con los 0,73 mmol/h observados para el TiO<sub>2</sub> no dopado. Esto sugiere que el dopaje de cobre en la estructura de TiO<sub>2</sub> mejoró significativamente la eficiencia fotocatalítica para la producción de hidrógeno a partir de la división del agua.</p>	<p><b>-Propiedades estructurales:</b> El análisis de difracción de rayos X (XRD) mostró que el Cu-TiO<sub>2</sub> tenía una estructura cristalina anatasa, similar al TiO<sub>2</sub> no dopado. Sin embargo, el dopaje de cobre en la estructura de TiO<sub>2</sub> causó una ligera disminución en el tamaño de cristalito y un aumento en la cantidad de defectos cristalinos, como las vacantes de oxígeno.</p> <p><b>-Propiedades ópticas:</b> El análisis de espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS) reveló que el dopaje de cobre en la estructura de TiO<sub>2</sub> redujo el ancho de banda de energía (E<sub>g</sub>). Esto permitió una mayor absorción de luz visible y mejoró la eficiencia fotocatalítica en la división del agua.</p> <p><b>-Propiedades fotocatalíticas:</b> El Cu-TiO<sub>2</sub> exhibió una mayor eficiencia fotocatalítica en la división del agua para la producción de hidrógeno en comparación con el TiO<sub>2</sub> no dopado. Además, el Cu-TiO<sub>2</sub> demostró una alta estabilidad y reutilización después de cinco</p>	<p><b>Absorción de luz para la excitación de electrones y generación de huecos:</b> El Cu-TiO<sub>2</sub> es capaz de absorber luz en el rango visible, lo que resulta en la excitación de electrones y la generación de huecos en la estructura del fotocatalizador.</p> <p><b>-Transferencia de carga y separación:</b> El dopaje de cobre en la estructura de TiO<sub>2</sub> aumenta la separación de electrones y huecos, lo que mejora la actividad fotocatalítica del material.</p> <p><b>Proceso de oxidación y reducción en la superficie:</b> Los huecos generados en la estructura del Cu-TiO<sub>2</sub> pueden reaccionar con el metanol (CH<sub>3</sub>OH) para formar iones de hidrógeno (H<sup>+</sup>), que luego reaccionan para formar gas hidrógeno (H<sub>2</sub>).</p>

ciclos de experimentos de división de agua.

**Equipos y procedimientos:**

- Síntesis de Cu-TiO<sub>2</sub>: El Cu-TiO<sub>2</sub> se sintetizó mediante un método de sol-gel modificado. Los reactivos utilizados incluyeron titanio (IV) isopropóxido, ácido acético, etanol, metanol y nitrato de cobre trihidratado.

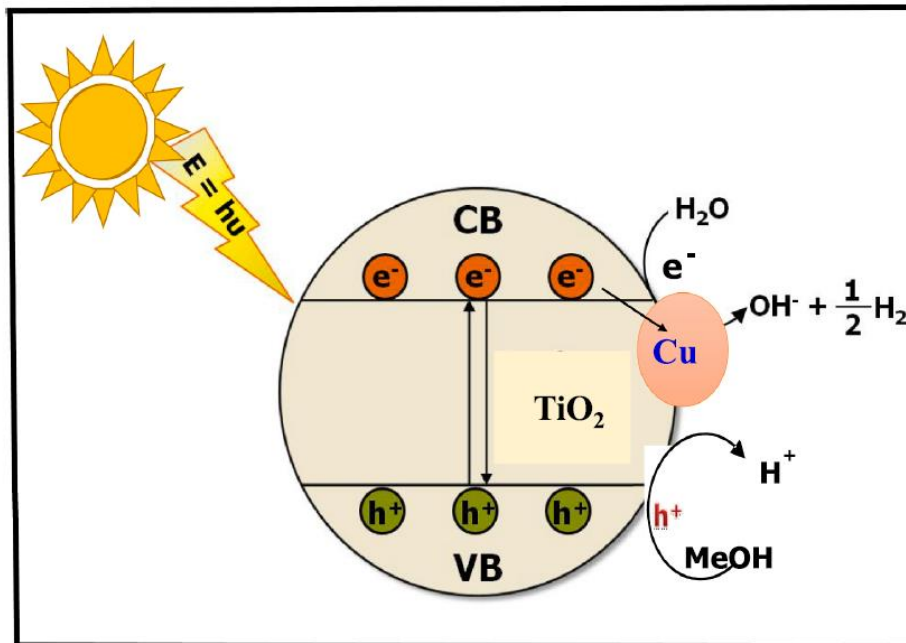
**Caracterización de Cu-TiO<sub>2</sub>:**

-Se utilizaron varias técnicas para caracterizar el Cu-TiO<sub>2</sub>, incluyendo análisis de difracción de rayos X (XRD), espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS), microscopía electrónica de barrido (SEM) y análisis de área superficial específica (BET). Estas técnicas se utilizaron para evaluar la estructura cristalina, la composición química, la morfología y la superficie específica del Cu-TiO<sub>2</sub>.

**Evaluación de la actividad fotocatalítica:**

-La actividad fotocatalítica del Cu-TiO<sub>2</sub> se evaluó mediante la división del agua para la producción de hidrógeno. Se utilizó un reactor de vidrio equipado con una lámpara de luz visible y una solución de metanol como agente de reducción. La tasa de evolución de hidrógeno se midió mediante la cromatografía de gases.

**Reacciones:**



The development of techno-economic assessment models for hydrogen production via

---

**photocatalytic water splitting** (Maurya et al., 2023).

---

<b>Resumen:</b>	<b>Semiconductores y Modelo de evaluación tecnológico- económica para la producción de hidrógeno:</b>
<p>-Se centra en el desarrollo de modelos de evaluación tecnológico-económica para la producción de hidrógeno a través de la división fotoquímica del agua utilizando fotocatalizadores a base de dióxido de titanio y nitruro de carbono. El estudio también analiza las ventajas y desventajas de estos fotocatalizadores y su potencial para la producción de hidrógeno a gran escala. Además, se presenta un marco de evaluación tecnológico-económica detallado para determinar los costos de producción y evaluar la viabilidad comercial de la producción de hidrógeno a través de la división fotoquímica del agua.</p>	<p><b>nanopartículas:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Nanorodillos de dióxido de titanio (TNRs)</li> <li>-Puntos cuánticos de nitruro de carbono dopados con flúor (CNFQDs)</li> <li>-Láminas de nitruro de carbono (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-S)</li> <li>-Láminas de nitruro de carbono dopadas con yodo de bismuto (BiOI/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-S)</li> <li>-Grafeno</li> <li>-Nanoestructuras de TiO<sub>2</sub></li> <li>-Nanobelts de TiO<sub>2</sub></li> <li>-Nanorodillos de TiO<sub>2</sub> decorados con puntos cuánticos de carbono (CQDs).</li> </ul>
	<p><b>Modelo de evaluación tecnológico- económica para la producción de hidrógeno:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Modelo bottom-up para examinar la viabilidad económica de cuatro rutas de producción de hidrógeno utilizando diferentes fotocatalizadores, incluyendo TNR, CNF: TNR, g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-S, y BiOI/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-S</li> <li>-Se basa en la evaluación de los costos asociados con la producción de hidrógeno, incluyendo los costos de capital, los costos de materiales, los costos de mano de obra, los costos de energía y los costos de mantenimiento. El modelo también tiene en cuenta la eficiencia del fotocatalizador, la energía de banda, la estabilidad y la respuesta a la luz visible, entre otros factores.</li> </ul>

---

<b>Propiedades de los fotocatalizadores y costos:</b>	<b>Equipos y procedimientos:</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nanorodillos de titanio (TNRs): Tienen alta actividad debido a su abundancia, estabilidad y alta actividad bajo condiciones normales. Sin embargo, son más responsivos a la radiación ultravioleta y tienen</li> </ul>	<p><b>- Equipos:</b></p> <p><b>-Paneles fotocatalíticos:</b> Se fabrican a partir de celdas fotocatalíticas y se instalan en el campo solar para la producción de hidrógeno a partir de la división del agua.</p> <p><b>-Bombas de agua:</b> Mantienen el</p>

---

una alta recombinación de carga, suministro de agua en los lo que limita su uso. Los TNRs paneles fotocatalíticos. tienen un costo de producción de **-Bombas de vacío y compresores:** Se utilizan para hidrógeno de \$5.7/kg de H<sub>2</sub>. capturar y comprimir los gases producidos (hidrógeno y oxígeno) en compartimentos separados.

-Nanorodillos de titanio dopados con puntos cuánticos de carbono nitrado (CNF: TNRs): **-Tanques de almacenamiento de hidrógeno:** Almacenan el hidrógeno producido antes de su distribución para aplicaciones posteriores. Los CNF: TNRs son una versión modificada de los TNRs en la que se incrustan puntos cuánticos de carbono nitrado. Esto mejora la actividad del fotocatalizador al reducir la recombinación de carga y **-Procedimientos:** permite una respuesta en el **-Fabricación de paneles fotocatalíticos:** Involucra la rango visible de la luz. Los CNF: TNRs tienen el costo de extracción y fabricación de producción de hidrógeno más bajo, de \$4.9/kg de H<sub>2</sub>. componentes y el ensamblaje de celdas fotocatalíticas.

-Láminas de carbono nitrado (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-S): Son fotocatalizadores **-Deionización del agua:** Se no metálicos sintetizados para lleva a cabo en una planta de una respuesta en el rango visible desionización de agua en el de la luz. Tienen alta actividad campo solar antes de alimentarla fotocatalítica y utilizan carbono a los paneles fotocatalíticos. para la formación de láminas de **-Evaluación del rendimiento:** Se establece el rendimiento de carbono nitrado. Sin embargo, los diferentes caminos de producción de hidrógeno a lo tienen una pequeña área largo de la vida útil del campo superficial y una alta solar, y se compara con los recombinación de carga que costos totales para determinar la limita su actividad. Los g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-S tienen un costo de producción de hidrógeno de \$5.8/kg de H<sub>2</sub>. viabilidad económica.

-Láminas de carbono nitrado

---

---

dopadas con yoduro de bismuto (BiOI/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-S): Estos son una versión modificada de las láminas de carbono nitrado que se dopan con yoduro de bismuto. Los BiOI/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-S tienen un costo de producción de hidrógeno de \$7.8/kg de H<sub>2</sub>.

---

**Orbital Occupancy and Spin Polarization: From Mechanistic Study to Rational Design of Transition Metal-Based Electrocatalysts toward Energy Applications (Do & Lee, 2022).**

---

<b>Resumen:</b>	<b>Electrocatalizadores:</b>	<b>Electrocatalizador basado en metal de transición:</b>
-Diseño racional de electrocatalizadores basados en metales de transición para aplicaciones energéticas. Proporciona una revisión exhaustiva de los avances recientes en la adaptación de las propiedades electrónicas de los átomos de metales de transición para mejorar el rendimiento electrocatalítico.	-La evolución de hidrógeno y oxígeno y la reacción de reducción de oxígeno dependen en gran medida de metales nobles, principalmente materiales basados en Pt para la Reacción de Evolución de Hidrógeno (HER) y la reacción de Reducción de Oxígeno (ORR) e Ir/Ru basados en óxidos para la reacción de Evolución de Oxígeno (OER).	-El hidróxido doble laminar de níquel-hierro (NiFe-LDH). Este material ha sido ampliamente estudiado por su excelente actividad catalítica hacia la reacción de evolución de oxígeno (OER), que es una reacción clave en la división del agua para la producción de hidrógeno. -Tiene una estructura laminar con capas de hidróxido de metal cargadas positivamente y aniones intercalados cargados negativamente. -Las capas de hidróxido de metal contienen átomos de Ni y Fe, que proporcionan sitios activos para la OER. Los aniones intercalados pueden intercambiarse con otros

---

aniones, como fosfato o carbonato, para modificar las propiedades electrónicas del material y mejorar su actividad catalítica.

-El NiFe-LDH tiene varias ventajas como electrocatalizador, incluyendo alta actividad, bajo costo y elementos abundantes en la tierra. Sin embargo, su rendimiento puede verse afectado por factores como la estructura cristalina, la composición y el área superficial.

---

**Técnicas utilizadas para ajustar las estructuras electrónicas:**

-Dopaje químico: Esta técnica consiste en introducir átomos o moléculas extranjeras en la red cristalina de un material para modificar sus propiedades electrónicas. El dopaje de óxidos de metales de transición con elementos no metálicos como nitrógeno o azufre puede mejorar su actividad catalítica para la reacción RRO.

-Modificación de superficies: Esta técnica implica alterar la química superficial de un material para mejorar su

**Materiales no preciosos altamente activos y estables (metales no nobles):**

- Los basados en hierro, níquel, cobalto y molibdeno.

**Semiconductor:**

-En comparación con el TiO<sub>2</sub> (semiconductor) puro y el NiO (aislante de Mott típico), con grandes brechas de banda, la densidad de estados (DOS) de una lámina de NiO dopada con VNi sobre soporte de TiO<sub>2</sub> es continua sin ninguna brecha alrededor del nivel de Fermi, lo que sugiere una estructura electrónica favorable con alta conductividad eléctrica, facilitando así la transferencia de electrones en la interfaz electrodo/electrolito y en la fase a granel del ánodo. Además, las vacantes de oxígeno formadas

---

actividad catalítica. Depositar una capa delgada de un metal noble como el platino en la superficie de un material basado en metales de transición puede mejorar su actividad catalítica para la reacción de REH.

-Ingeniería de tensiones: Esta técnica implica aplicar tensión mecánica a un material para modificar sus propiedades electrónicas. La compresión de un material basado en metales de transición puede aumentar su actividad catalítica para la REO al inducir distorsión de la red y redistribución de carga.

-Tratamiento electroquímico: Esta técnica implica someter un material a una reacción electroquímica para modificar sus propiedades electrónicas. La aplicación de un potencial anódico a un material basado en metales de transición puede inducir la formación de óxidos superficiales, lo que puede mejorar su actividad catalítica para la REO.

en la fase de TiO<sub>2</sub> pueden inducir la formación de sitios de Ti<sup>3+</sup> debido a la neutralidad de carga, lo que puede aumentar la densidad de donantes de electrones y servir como centros de adsorción y disociación de agua.

---

**Solvent-Free Mechanochemical Synthesis of Ultrasmall Nickel Phosphide Nanoparticles and Their Application as a Catalyst for the Hydrogen Evolution Reaction (HER)** (Fiss et al., 2020).

---

<b>Resumen:</b>	<b>Mecanoquímica:</b>	<b>Síntesis de nanopartículas como catalizador:</b>
-Método de síntesis mecanoquímica sin solventes	-En lugar de utilizar solventes y altas temperaturas,	la
		-La síntesis de las nanopartículas

---

para producir nanopartículas de fosforo de níquel ultra pequeñas utilizando fosforo de sodio como fuente de fósforo en estado sólido. Estas nanopartículas se utilizaron como catalizadores para la reacción de evolución de hidrógeno, generando hidrógeno a partir de luz de espectro amplio a temperatura ambiente y siendo fácilmente reciclables y reutilizables sin disminución en la reactividad.

mecanoquímica utiliza la energía mecánica para activar las reacciones químicas. Este enfoque tiene varias ventajas, como la reducción del uso de solventes y la disminución de la energía necesaria para llevar a cabo la reacción, lo que lo convierte en un método más respetuoso con el medio ambiente. La mecanoquímica también puede producir compuestos que son difíciles o imposibles de sintetizar mediante métodos convencionales.

de fosforo de níquel ultrapequeñas se logró utilizando un método mecanoquímico en estado sólido, que implica el uso de fuerzas mecánicas para activar reacciones químicas. Se utilizo fosforo de sodio como fuente de fósforo en estado sólido y acetato de níquel tetrahidratado como fuente de níquel, que luego se molieron juntos en un molino de bolas durante un cierto tiempo. El polvo resultante se lavó y secó para obtener las nanopartículas de fosforo de níquel ultrapequeñas. Este método tiene varias ventajas sobre los métodos tradicionales basados en soluciones, incluyendo una menor demanda de energía y una reducción en el uso de disolventes.

<b>Propiedades estructurales de las nanopartículas de fosforo de níquel:</b>	<b>Radiación:</b>	<b>Aproximaciones de las temperaturas utilizadas en diferentes métodos de síntesis para las nanopartículas de fosforo de níquel:</b>
-Tamaño inferior a 3 nm de diámetro, lo cual es un rango de tamaño nunca visto en la síntesis mecanoquímica de fosfuros metálicos.	-El reactor fue irradiado con 100 mW cm <sup>-2</sup> de luz solar simulada utilizando una lámpara de xenón de espectro amplio para evaluar la eficacia de la evolución del hidrógeno del catalizador.	- Descomposición térmica de TOP: 95.54 °C
-Soporte fotocatalítico, (nitruro de carbón gráfico).	-Mecanismo de producción de H <sub>2</sub> fotocatalítico en un fotocatalizador de g-C <sub>3</sub> N <sub>4</sub> soportado en Ni <sub>2</sub> P bajo la	- Inyección en caliente de triphenyl fosfito: 331 °C
-Utilizaron una lámpara de		- Síntesis mecanoquímica con Na <sub>3</sub> P en un molino agitador:

<p>xenón de amplio espectro a temperatura ambiente.</p>	<p>iluminación de la luz.</p> <p>- El papel del nitruro de carbono grafítico en la reacción de evolución de hidrógeno catalizada por estas nanopartículas es actuar como soporte fotocatalítico. Bajo la iluminación de la luz, los electrones y los huecos se separan y se acumulan respectivamente en la banda de conducción (CB) y la banda de valencia (VB) de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, lo que lleva a la producción de gas hidrógeno.</p>	<p>3593 °C</p> <p>- Síntesis mecanoquímica con Na<sub>3</sub>P en un molino planetario: 101 °C</p>
<p><b>Evolución de hidrogeno:</b></p> <p>-La evolución de hidrógeno suspendiendo 50 mg del nanocatalizador híbrido y 5 g de trietanolamina en 100 mL de agua pura en un reactor cerrado sin oxígeno.</p> <p>-Se recolectó el gas hidrógeno evolucionado utilizando un cromatógrafo de gases (GC) equipado con un detector de conductividad térmica (TCD) para evaluar la eficacia de la evolución de hidrógeno del catalizador.</p> <p>-Producción de hidrógeno de 233,9 μmol g<sup>-1</sup> h<sup>-1</sup> después de 3 h.</p>	<p><b>Procedimientos realizados:</b></p> <p>-El análisis de TEM reveló que las nanopartículas de Ni<sub>2</sub>P eran de tamaño ultrapequeño y tenían una forma esférica.</p> <p>-El análisis de XPS mostró una oxidación parcial de las nanopartículas de Ni<sub>2</sub>P, lo que sugiere la presencia de fosfatos de superficie.</p> <p>-El análisis de ATR-FTIR reveló la presencia de grupos funcionales de superficie en las nanopartículas de Ni<sub>2</sub>P soportadas en g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>.</p> <p>-El análisis de TGA reveló que las nanopartículas de Ni<sub>2</sub>P soportadas en g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> eran más estables térmicamente que las</p>	<p><b>Intensidad de masa y uso de energía:</b></p> <p>-La descomposición térmica de TOP o triphenyl fosfito por síntesis de miligramos requiere una demanda de energía de 2.4 a 18.6 veces mayor por gramo de material en comparación con la síntesis mecanoquímica a pequeña escala. Además, la síntesis mecanoquímica con Na<sub>3</sub>P en un molino agitador tiene una intensidad de masa de 9585, mientras que la síntesis mecanoquímica con Na<sub>3</sub>P en un molino planetario tiene una intensidad de masa de 101 después del lavado</p>

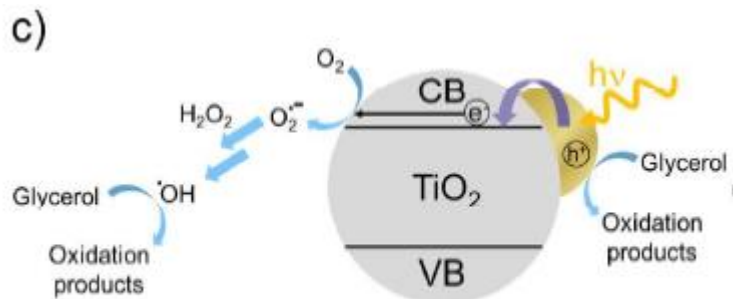
nanopartículas de Ni<sub>2</sub>P libres, lo que sugiere que el soporte de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> mejoró la estabilidad térmica de las nanopartículas.

**Recent Advances in Thermo-, Photo-, and Electro-catalytic Glycerol Oxidation** (Dodekatos et al., 2018).

Resumen:	Estudios:	Estudios:
<p>-Se discuten los avances en el desarrollo de fotocatalizadores para la transformación del glicerol en productos deseados, así como la importancia de comprender los mecanismos de reacción y optimizar los parámetros de actividad y selectividad. Además, se menciona que la vía fotocatalítica ha surgido como un concepto intrigante para transformar varios compuestos orgánicos en productos deseados, y se destaca que, aunque la investigación en el campo del glicerol está en sus inicios, se han obtenido fotocatalizadores con actuaciones catalíticas alentadoras.</p> <p>-La utilización de fotocatalizadores plasmónicos para mejorar el rendimiento catalítico de la oxidación del glicerol en fase acuosa bajo condiciones neutras mediante la</p>	<p>-(Maurino et al., 2008), llevaron a cabo el primer informe sobre la oxidación fotocatalítica del glicerol en condiciones aerobias y ambientales. Utilizaron polvos de P25 y Merck como fotocatalizadores de TiO<sub>2</sub> y exploraron el impacto de la modificación de la superficie mediante aniones de fluoruro. Los principales productos observados fueron dihidroxiacetona y gliceraldehído. Las reacciones fotocatalíticas sobre P25 mostraron un comportamiento distinto a diferentes concentraciones de glicerol, mostrando un aumento en la tasa de reacción inicial a bajas concentraciones, pero una disminución significativa a concentraciones más altas. Este comportamiento se atribuyó a diferentes sitios de reacción en P25, y se descubrió que la fluoración de la superficie del</p>	<p>- (Augugliaro et al., 2012), llevaron a cabo un estudio sobre la oxidación fotocatalítica selectiva del glicerol utilizando muestras comerciales y caseras de TiO<sub>2</sub>. Las reacciones se realizaron en fotoreactores por lotes bajo condiciones aeróbicas e irradiación UV-vis (lámpara de Hg de presión media de 125 W o seis lámparas fluorescentes de 15 W). Los autores demostraron que, bajo ciertas condiciones de reacción, el P25 comercial fue el fotocatalizador superior en comparación con las muestras caseras de anatasa o rutilo o el TiO<sub>2</sub> comercial de Sigma-Aldrich. Los productos observados en la solución de reacción fueron gliceraldehído, dihidroxiacetona y ácido fórmico (selectividad total alrededor del 30%). Los cálculos basados en el contenido total de compuestos orgánicos revelaron que se produjeron cantidades</p>

iluminación adicional de la fotocatalizador bloqueaba estos sitios activos, lo que resultaba en una selectividad del 10 al 30% de CO<sub>2</sub> durante la reacción. Además, se menciona un aumento de cinco veces en la tasa de reacción a altas concentraciones de glicerol. Los autores enfatizaron que el glicerol sirve como una molécula de prueba adecuada para investigar diversos mecanismos de oxidación sobre fotocatalizadores de TiO<sub>2</sub> debido a la diversidad en la formación de productos. Los resultados fotocatalíticos observados se racionalizaron en función de diferentes modos de complejación de superficie de glicerol y el mecanismo predominante para la oxidación de glicerol, ya sea que involucre el radical hidroxilo o la transferencia directa de huecos.

**Reacciones:**



**Nanotechnology in Solar and Biofuels (Ramsurn & Gupta, 2013).**

Resumen:	Tipos de células solares:	Tecnología fotovoltaica:
----------	---------------------------	--------------------------

---

<p>-Avances recientes en el campo de la nanotecnología y cómo se están utilizando los nanomateriales en aplicaciones de energía solar y biocombustibles.</p>	<p><b>-Células solares de unión Schottky:</b> Estas células solares utilizan nanocables de silicio para mejorar la eficiencia de la conversión de energía solar en electricidad. Los nanocables de silicio tienen una gran área superficial, lo que les permite absorber más luz solar y generar más electricidad. Además, la estructura de la unión Schottky permite que los electrones fluyan más fácilmente, lo que mejora la eficiencia de la célula solar.</p>	<p>-Convierte la energía solar directamente en electricidad utilizando células solares. Estas células solares están hechas de materiales semiconductores, como el silicio, que absorben la luz solar y generan electrones libres. Los electrones libres se mueven a través de la célula solar y generan una corriente eléctrica.</p>
<p>-Estudios sobre fotovoltaicos, incluyendo células solares de unión Schottky, células solares orgánicas, células solares sensibilizadas con puntos cuánticos y materiales de Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> abundantes en la tierra, así como la fotosíntesis artificial.</p>	<p><b>-Células solares orgánicas:</b> Estas células solares utilizan materiales orgánicos para absorber la luz solar y convertirla en electricidad. Los materiales orgánicos son más baratos y fáciles de producir que los materiales inorgánicos utilizados en las células solares convencionales. Sin embargo, las células solares orgánicas tienen una eficiencia más baja que las células solares convencionales y son menos estables a largo plazo.</p>	
<p>-Uso de la nanotecnología en la transesterificación, gasificación, pirólisis e hidrogenación, así como en la reforma de compuestos derivados de biomasa.</p>	<p><b>-Células solares sensibilizadas con puntos cuánticos:</b> Estas células solares utilizan nanocristales semiconductores</p>	

---

para absorber la luz solar y generar energía eléctrica. Los puntos cuánticos tienen un tamaño muy pequeño, lo que les permite absorber diferentes longitudes de onda de luz solar y generar más electricidad. Además, los puntos cuánticos son más estables y duraderos que los materiales orgánicos utilizados en las células solares orgánicas.

**-Materiales de Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> abundantes en la tierra:** Estos materiales se están investigando como una alternativa a los materiales de células solares más costosos, como el silicio y el telururo de cadmio. Los materiales de Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> son más abundantes en la tierra y más baratos de producir que los materiales convencionales. Además, tienen una eficiencia de conversión de energía solar comparable a la de los materiales convencionales.

<b>Materiales semiconductores:</b>	<b>Nanopartículas:</b>	<b>Propiedades estructurales de las nanopartículas:</b>
-El silicio: es el material más utilizado en la fabricación de células solares debido a su alta eficiencia y disponibilidad.	<b>-Nanocristales semiconductores:</b> conocidos como puntos cuánticos, son partículas de semiconductores que tienen	<b>-Nanocristales semiconductores:</b> tienen propiedades ópticas y electrónicas únicas debido a su tamaño nanométrico. Su tamaño
-El arseniuro de galio.		
-El seleniuro de cadmio.		

<p>-El telururo de cadmio.</p> <p>-Los otros tres se utilizan en células solares de película delgada, que son más ligeras y flexibles que las células solares de silicio. Además, los materiales semiconductores orgánicos, como el polímero de fullereno y el polímero de tiofeno, se están investigando como una alternativa más barata y flexible a los materiales inorgánicos utilizados en las células solares convencionales.</p>	<p>propiedades ópticas y y forma pueden ser controlados para ajustar su banda de energía y, por lo tanto, su capacidad para absorber y emitir luz. También tienen una alta área superficial, lo que les permite interactuar con otros materiales de manera efectiva.</p> <p><b>-Nanopartículas de oro:</b> el oro es un material interesante para la nanotecnología debido a sus propiedades químicas y ópticas únicas. Las nanopartículas de oro se están estudiando para su uso en células solares y biosensores, entre otras aplicaciones.</p>	<p><b>-Nanopartículas de oro:</b> tienen propiedades ópticas y electrónicas únicas debido a su tamaño nanométrico. Su tamaño y forma pueden ser controlados para ajustar su capacidad para absorber y emitir luz. También son altamente estables y no tóxicos, lo que los hace atractivos para aplicaciones biomédicas.</p>
<p><b>-Puntos cuánticos coloidales:</b> son nanopartículas semiconductoras suspendidas en un líquido. Tienen propiedades ópticas y electrónicas similares a las de los nanocristales semiconductores y se están investigando para su uso en células solares y biosensores.</p>	<p><b>-Puntos cuánticos coloidales:</b> tienen propiedades ópticas y electrónicas similares a las de los nanocristales semiconductores. Su tamaño y forma pueden ser controlados para ajustar su banda de energía y, por lo tanto, su capacidad para absorber y emitir luz. También son altamente estables y pueden ser suspendidos en líquidos para su uso en aplicaciones biológicas.</p>	<p><b>-Puntos cuánticos coloidales:</b> tienen propiedades ópticas y electrónicas similares a las de los nanocristales semiconductores. Su tamaño y forma pueden ser controlados para ajustar su banda de energía y, por lo tanto, su capacidad para absorber y emitir luz. También son altamente estables y pueden ser suspendidos en líquidos para su uso en aplicaciones biológicas.</p>

<p><b>Materiales utilizados:</b></p> <p>-El cobre, el zinc y el estaño se</p>	<p><b>Radiación y luz visible:</b></p> <p>-Uso de filtros para simular el</p>	<p><b>Eficiencia de conversión de energía:</b></p>
---	---	--

---

están investigando para su uso en células solares y otros dispositivos de conversión de energía.

-El compuesto Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> (CZTS) como un absorbente prometedor para células solares de película delgada. CZTS está compuesto de materiales abundantes en la tierra que tienen bajo costo y toxicidad y pueden ser sostenibles para la fabricación de células solares de película delgada

-El uso de catalizadores bimetalicos para la actualización de biomasa a combustibles y productos químicos, lo que puede ayudar a maximizar los rendimientos, minimizar los residuos, disminuir los impactos ambientales y obtener productos a bajo costo.

espectro AM1.5 (390-770 nm), que se encuentra en la región visible, para iluminar un electrodo en un experimento relacionado con la fotosíntesis artificial. El artículo también discute el uso de nanomateriales en la fotovoltaica, que implica la absorción de fotones del espectro solar, incluida la luz visible, para generar electricidad.

-El uso de semiconductores como el Si en células fotovoltaicas, que absorben fotones y generan electricidad cuando la luz golpea un electrón ligado en el semiconductor.

-La eficiencia depende del espectro e intensidad de la luz solar incidente y de la temperatura de la célula solar. Las células solares terrestres se miden en condiciones AM1.5 y a una temperatura de 25 °C.

**-Células solares de alta eficiencia:** Los absorbedores de kesterita con una eficiencia de conversión de energía récord del 10,1% y las células solares de heterounión agotada con una eficiencia de conversión de energía AM1.5 del 5,1%.

---

**Rendimiento de células solares fotovoltaicas:**

-Utilizan un copolímero alternante llamado PCDTBT en combinación con el derivado de fullereno PC70BM. Las células solares lograron una eficiencia de conversión de energía del 6%, lo que es el mejor rendimiento de cualquier sistema de heterounión.

---

**Intensidad de irradiación y factor de desajuste espectral:**

-Las células solares se probaron bajo un simulador solar global de masa de aire 1.5 (AM1.5G) con una intensidad de irradiación de 1000 W m<sup>-2</sup>. El factor de desajuste espectral se calculó comparando el espectro del simulador solar con el espectro AM1.5 a temperatura

---

**Materiales de las células solares de película delgada:**

**-Silicio amorfo:** Es un material semiconductor. A diferencia del silicio cristalino utilizado en las células solares convencionales, el silicio amorfo no tiene una estructura cristalina ordenada, lo que lo hace más flexible y adecuado para aplicaciones de película delgada.

	ambiente.	<p><b>-Telururo de cadmio (CdTe):</b> Es un compuesto semiconductor que se utiliza como material absorbente en células solares de película delgada. El CdTe tiene una alta capacidad para absorber la luz solar y convertirla en electricidad, lo que lo hace adecuado para aplicaciones fotovoltaicas.</p> <p><b>-Seleniuro de cobre indio galio (CIGS):</b> Es otro compuesto semiconductor. El CIGS es conocido por su alta eficiencia de conversión y su capacidad para adaptarse a diferentes sustratos, lo que lo hace atractivo para aplicaciones de película delgada.</p>
<p><b>Células solares de concentración:</b> -Tipo de célula solar que utiliza lentes o espejos para concentrar la luz solar en una pequeña área de célula solar. - Concentradores de Fresnel: Estos concentradores utilizan lentes planas para concentrar la luz solar en una pequeña área de célula solar. Los concentradores de Fresnel son relativamente económicos y fáciles de fabricar, pero tienen una eficiencia de concentración más baja que</p>	<p><b>Materiales utilizados en las células solares de concentración:</b> <b>- Arseniuro de galio (GaAs):</b> El GaAs es un semiconductor compuesto de galio y arsénico que tiene una estructura cristalina de tipo III-V. Tiene una alta eficiencia de conversión de la luz solar en electricidad, lo que lo hace ideal para aplicaciones de células solares de alta eficiencia. El GaAs tiene una banda prohibida directa, lo que</p>	<p><b>Nanotecnología en biocombustibles:</b> -Catálisis heterogénea con nanomateriales. -Nanoestructuración de biocombustibles. -Nanosensores. -Nanomateriales para la separación de productos.</p> <p><b>Nanomateriales utilizados en la producción de biocombustibles:</b> <b>-óxidos metálicos:</b> Los óxidos metálicos como el óxido de hierro, óxido de titanio y óxido</p>

---

otros tipos de concentradores. significa que los electrones de aluminio se utilizan como catalizadores en la producción de biocombustibles. Estos materiales tienen una alta superficie específica y una alta actividad catalítica debido a su tamaño nanométrico.

**-Concentradores parabólicos:** pueden moverse entre los niveles de energía con mayor facilidad, lo que contribuye a su alta eficiencia. Se utiliza en células solares de concentración debido a su capacidad para funcionar a altas concentraciones de luz solar, lo que permite generar más electricidad a partir de la misma cantidad de luz solar.

Estos concentradores utilizan espejos parabólicos para concentrar la luz solar en una línea focal, donde se encuentra la célula solar. Los concentradores parabólicos son más eficientes que los concentradores de Fresnel, pero son más costosos y difíciles de fabricar.

**-Nanotubos de carbono:** Los nanotubos de carbono se utilizan como catalizadores en la producción de hidrógeno a partir de biomasa. Estos materiales tienen una alta superficie específica y una alta actividad catalítica debido a su estructura nanométrica.

**-Concentradores de disco:** Estos concentradores utilizan un disco parabólico para concentrar la luz solar en una pequeña área de célula solar. Los concentradores de disco son muy eficientes y pueden alcanzar concentraciones de hasta 10,000 veces la intensidad de la luz solar, pero son muy costosos y requieren sistemas de seguimiento solar precisos.

**-Germanio (Ge):** El germanio es un semiconductor elemental que también se utiliza en células solares de concentración. Aunque el germanio tiene una eficiencia de conversión de la luz solar ligeramente menor que el GaAs, es más económico y fácil de producir a gran escala. El germanio es conocido por su capacidad para funcionar bien a temperaturas más altas, lo que lo hace adecuado para aplicaciones de células solares de concentración que pueden experimentar un aumento de temperatura debido a la concentración de la luz solar.

**-Nanopartículas de metales nobles:** Las nanopartículas de metales nobles como el oro, la plata y el platino se utilizan como catalizadores en la producción de biocombustibles. Estos materiales tienen una alta actividad catalítica debido a su tamaño nanométrico y su alta superficie específica.

**-Concentradores de torre:** Estos concentradores utilizan una torre central rodeada de espejos para concentrar la luz solar en la parte superior de la torre, donde se encuentra la célula solar. Los concentradores de torre son muy eficientes y pueden alcanzar concentraciones de hasta 1,500 veces la intensidad de la luz

**-Nanocelulosa:** La nanocelulosa se utiliza como aditivo en biocombustibles líquidos para mejorar su estabilidad y eficiencia energética. La nanocelulosa tiene una alta superficie específica y una alta capacidad de absorción de agua,

---

solar, pero son muy costosos y requieren sistemas de seguimiento solar precisos.

lo que puede mejorar la estabilidad de los biocombustibles líquidos.

**-Nanopartículas de sílice:** Las nanopartículas de sílice se utilizan como aditivos en biocombustibles líquidos para mejorar su estabilidad y eficiencia energética. Las nanopartículas de sílice tienen una alta superficie específica y una alta capacidad de absorción de agua, lo que puede mejorar la estabilidad de los biocombustibles líquidos.

---

**Light as trigger for biocatalysis: Photonic wiring of FADdependent glucose dehydrogenase to quantum dotsensitized inverse opal TiO<sub>2</sub> architectures via redox polymers** (Riedel et al., 2018).

---

**Resumen:**

-El uso de la luz como un desencadenante para la biocatálisis.  
 -La conexión fotónica de la glucosa deshidrogenasa dependiente de FAD a arquitecturas de TiO<sub>2</sub> opalino inverso sensibilizadas por puntos cuánticos a través de polímeros redox.

**Banda de energía:**

-Se utilizan dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) como material semiconductor para la construcción de los electrodos. El TiO<sub>2</sub> tiene una banda de energía amplia, lo que significa que requiere una alta energía de excitación para generar pares electrón-hueco. Esto limita su capacidad para absorber la luz visible, lo que es una desventaja para la fotocatalisis. Para superar esta limitación, se utilizan puntos cuánticos de sulfuro de plomo (PbS) como sensibilizadores de luz. Los

**Semiconductor- energía:**

-Se menciona que el TiO<sub>2</sub> solo puede ser excitado por luz con una longitud de onda menor a 400 nm, lo que corresponde a la región del ultravioleta cercano. Esto se debe a que la banda de energía del TiO<sub>2</sub> tiene un ancho de banda de aproximadamente 3,2 eV, lo que significa que se requiere una energía de excitación de al menos 3,2 eV para generar pares electrón-hueco.  
 -Se menciona que los puntos cuánticos de PbS tienen un ancho de banda de

puntos cuánticos de PbS tienen una banda de energía más baja que el TiO<sub>2</sub>, lo que les permite absorber la luz visible y generar pares electrón-hueco con una menor energía de excitación. Para lograr la transferencia de electrones entre los puntos cuánticos de PbS y el TiO<sub>2</sub>, se utilizan un polímero redox para conectar los dos materiales. El polímero redox actúa como un puente para transferir los electrones generados en los puntos cuánticos de PbS al TiO<sub>2</sub>, lo que permite la generación de corriente fotocatalítica.

aproximadamente 1,92 - 1,47 eV, lo que les permite absorber la luz visible con longitudes de onda de hasta 800 nm. Esto significa que los puntos cuánticos de PbS pueden ser excitados por luz visible con una energía de excitación menor que la requerida por el TiO<sub>2</sub>.

<b>Biocatálisis:</b>	<b>Cableado fotónico:</b>	<b>Ventajas de la entidad biocatalítica en un sistema de electrodo fotoelectroquímico:</b>
<p>-Se mencionan varias enzimas y sistemas enzimáticos utilizados en el contexto de la biocatálisis. Algunos de los componentes enzimáticos y sistemas mencionados en el artículo incluyen:</p> <p>-FAD-GDH (glucosa deshidrogenasa de flavina adenina dinucleótido): Esta enzima cataliza la oxidación de la D-glucosa a D-gluconolactona. Se utilizó en el contexto de la integración de la entidad biocatalítica en un</p>	<p>-Se utilizan puntos cuánticos de PbS (PbS QDs) y un polímero redox para crear un sistema de cableado fotónico para la glucosa deshidrogenasa (GDH) de flavina adenina dinucleótido (FAD-GDH) en un sistema de electrodo fotoelectroquímico. El proceso se describe de la siguiente manera:</p> <p><b>1. Crecimiento de PbS QDs:</b> Se utilizan un enfoque SILAR (Successive Ionic Layer Adsorption and Reaction) para el crecimiento de puntos</p>	<p><b>biocatalítica en un sistema de electrodo fotoelectroquímico:</b></p> <p>-La posibilidad de controlar la actividad enzimática mediante la luz</p> <p>-La alta eficiencia de transferencia de electrones entre la enzima y el electrodo,</p> <p>-La capacidad de generar corrientes fotoanódicas en presencia de sustratos específicos.</p>

---

sistema de electrodo cuánticos de PbS directamente fotoelectroquímico. sobre los electrodos de TiO<sub>2</sub>.

-Os(2+/3+)-containing poly(1-vinylimidazole-co-allylamine)-Os(bipy)<sub>2</sub>Cl-redox polymer (POs): Este polímero redox contiene osmio en estados de oxidación +2 y +3, y se utilizó para el cableado de la enzima FAD-GDH en el sistema de electrodo fotoelectroquímico.

Además, el artículo hace referencia a la utilización de nanomateriales, tales como tintes, nanoclusters de oro, polímeros, biomoléculas (e.g., fotosistema I), y puntos cuánticos, para el cableado fotónico de enzimas insensibles a la luz

## **2. Integración de FAD-GDH:**

La enzima FAD-GDH se integra en la arquitectura mediante un polímero redox que contiene osmio en estados de oxidación +2 y +3 (POs). Este polímero permite el cableado eficiente de la enzima a los puntos cuánticos.

## **3. Funcionamiento del sistema:**

Bajo la iluminación con luz visible, el sistema de cableado fotónico se activa, y los electrones generados a partir de la conversión enzimática de la glucosa son transferidos desde la enzima hacia el polímero redox POs, luego hacia los puntos cuánticos de PbS, y finalmente hacia el electrodo de TiO<sub>2</sub>, generando una corriente fotoanódica anódica.

---

### **Equipos y procedimientos:**

#### **Equipos:**

-Electrodo de fluoruro de estaño dopado con flúor (FTO).

-Fuente de luz blanca.

-Sistema de fotoelectroquímica para medidas fotoelectroquímicas.

-Microscopio electrónico de barrido (SEM) para caracterización morfológica.

---

-Espectrofotómetro para caracterización óptica.

Procedimientos:

-Síntesis de electrodos de  $TiO_2$  con estructura de opalo inverso.

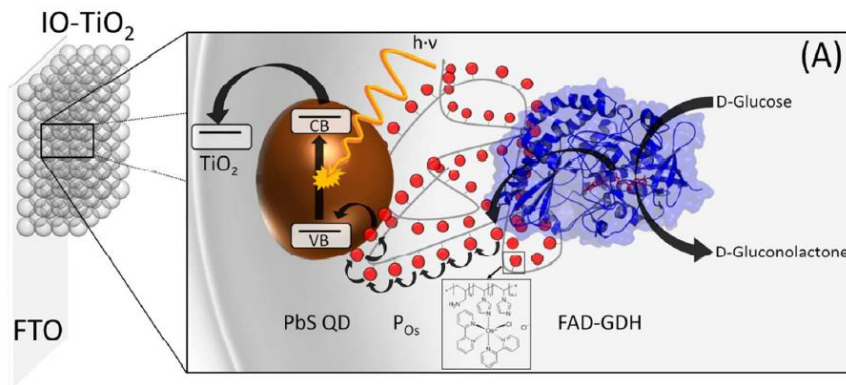
-Depósito de puntos cuánticos de PbS en los electrodos de  $TiO_2$ .

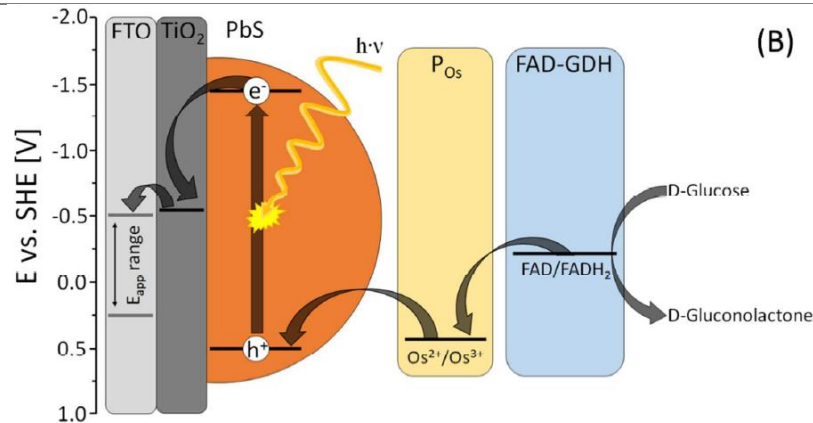
-Preparación de electrodos modificados con enzimas.

-Caracterización morfológica y óptica de los electrodos.

-Realización de medidas fotoelectroquímicas para evaluar la respuesta del electrodo a la luz visible.

**Reacciones en la banda:**





**Solar-Driven Glucose Isomerization into Fructose via Transient Lewis Acid–Base Active Sites (J.**

Wang et al., 2021)

**Resumen:**

-Una nueva estrategia efectiva para convertir la glucosa en fructosa utilizando un carbono nitrado diseñado racionalmente. Este proceso es impulsado por la luz solar y tiene una selectividad de más del 60% para la fructosa.  
 -Describe la síntesis del carbono nitrado, su caracterización y su uso como fotocatalizador para la isomerización de la glucosa en fructosa. También se discute el mecanismo de reacción y se comparan los resultados con los de otros estudios en la literatura.

**Banda de energía:**

-El carbono nitrado cristalino (CN) tiene una banda de energía favorable que le permite una respuesta eficiente a la luz visible. Esta propiedad se debe a su alta cristalinidad en el plano y a una conjugación π extendida, lo que mejora significativamente la absorción de luz visible y la separación de cargas.  
 -El carbono nitrado tiene un borde de absorción de luz desplazado hacia el rojo, lo que indica una energía de brecha de banda más estrecha (2.65 eV) en comparación con otras formas de carbono nitrado. Este estrechamiento de la brecha de banda contribuye a su capacidad para absorber luz visible y participar en reacciones de fotocatalisis.

**Propiedades estructurales:**

-El CN tiene una estructura cristalina altamente ordenada que consiste en una red de tri-s-triazina y triazina unidas por enlaces covalentes.  
 -El CN tiene una alta superficie específica y una porosidad ajustable, lo que lo hace adecuado para su uso en aplicaciones de adsorción y separación.  
 -El CN también tiene una serie de defectos estructurales, como vacantes de nitrógeno y grupos ciano, que pueden actuar como centros de reacción para la fotocatalisis y mejorar la absorción de luz visible. Estos defectos también pueden mejorar la separación de cargas y la movilidad de los portadores de carga en el material.

---

<b>Proceso de isomerización de la glucosa:</b>	<b>Vacantes de nitrógeno superficial y los grupos de ciano:</b>	<b>Eficiencia del proceso de fotocátalisis para la isomerización de la glucosa a fructosa:</b>
<p>-El proceso de isomerización de la glucosa implica la conversión de la glucosa, un monosacárido de seis carbonos, en fructosa, otro monosacárido de seis carbonos, pero con una estructura isométrica. La isomerización de la glucosa a fructosa es un paso importante en la producción de biocombustibles y productos químicos a partir de biomasa.</p> <p>-El proceso de isomerización de la glucosa a fructosa en presencia del CN modificado implica la activación de ciertos grupos funcionales en la molécula de glucosa, seguido de la reorganización de los enlaces químicos para formar la estructura de fructosa. En este proceso, los grupos ciano y las vacantes de nitrógeno superficial en el CN modificado desempeñan un papel crucial al actuar como centros de reacción para aceptar pares de electrones y activar ciertos grupos funcionales en la molécula de glucosa.</p>	<p>- En presencia de luz visible, los electrones y huecos se generan en el CN, y las vacantes de nitrógeno superficial y los grupos ciano actúan como centros de reacción para la fotocátalisis. Los electrones generados en el CN se transfieren a las vacantes de nitrógeno superficial, lo que crea un estado de carga negativa en la superficie del material. Los grupos ciano, por otro lado, actúan como centros de Lewis base y pueden interactuar con los protones en la solución para formar un ácido de Lewis.</p> <p>-En el proceso de isomerización de la glucosa, los grupos ciano y las vacantes de nitrógeno superficial actúan juntos para activar la molécula de glucosa y promover su isomerización a fructosa. Los grupos ciano interactúan con el oxígeno en la posición C2 de la glucosa, lo que permite la formación de un enlace de hidrógeno y la posterior deprotonación del grupo hidroxilo. Al mismo tiempo, las vacantes de</p>	<p>-Logró una conversión de glucosa del 25% y una selectividad de fructosa del 60% en una hora de reacción bajo irradiación solar simulada.</p> <p>-Además, el catalizador de CN modificado mostró una alta estabilidad y reutilización durante tres ciclos de reacción.</p>

---

---

nitrógeno superficial interactúan con el oxígeno en la posición C1 de la glucosa, lo que permite la formación de un ácido de Lewis y la activación del grupo aldehído.

---

**Condiciones de reacción:**

- Concentración de glucosa: 2 g/L
- Catalizador: 10 mg de CN modificado
- Luz: irradiación con una lámpara de xenón de 300 W
- pH: aproximadamente 7
- Temperatura: alrededor de 60 °C

Se realizaron experimentos para evaluar la eficiencia del proceso de fotocátalisis utilizando diferentes concentraciones de glucosa (4, 20, 50 y 100 g/L). Se encontró que la isomerización de la glucosa a fructosa todavía se podía lograr a concentraciones más altas de glucosa, aunque la eficiencia disminuyó ligeramente con concentraciones más altas.

**Equipos y procedimientos:**

**- Síntesis del CN modificado:**

El CN modificado se sintetizó mediante un método de calcinación de una mezcla de melamina y cianuro de hierro (III) a alta temperatura. El CN modificado se caracterizó mediante diversas técnicas, como microscopía electrónica de barrido de emisión de campo (FESEM), espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS) y espectroscopía Raman.

**-Fotocatálisis para la isomerización de la glucosa a fructosa:**

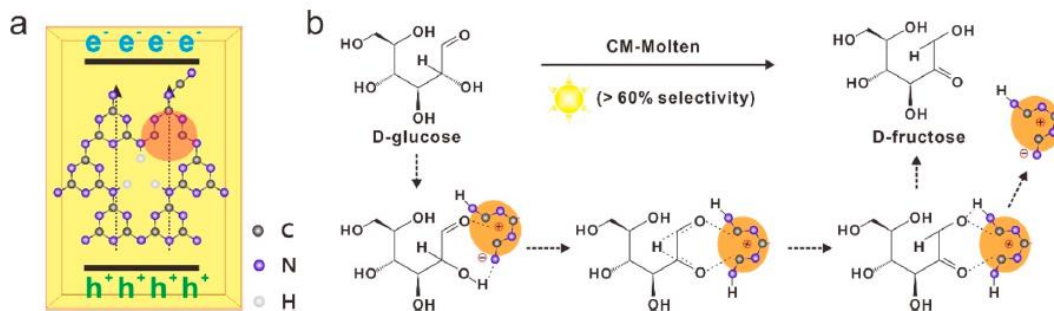
La fotocátalisis se realizó en una vial de vidrio con una solución de glucosa (2 g/L) y 10 mg de CN modificado. La solución se agitó en la oscuridad durante 1 hora antes de la irradiación con una lámpara de xenón de 300 W. La temperatura final de la reacción se midió a alrededor de 60 °C. La conversión de glucosa, la selectividad de fructosa, el

---

rendimiento de fructosa y el balance de carbono se calcularon mediante cromatografía líquida de alta resolución (HPLC).

**-Caracterización de los productos de reacción:** Los productos de reacción se caracterizaron mediante diversas técnicas, como cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC-MS), espectroscopía de resonancia magnética nuclear (NMR) y espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR).

**Reacciones:**



**Tailoring Cadmium Composition on Titanium Dioxide to Achieve Enhanced Photocatalytic Glucose Fuel Cell Anode Performance (Caglar et al., 2021).**

**Resumen:**

- Se centra en la preparación y caracterización de catalizadores de dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) soportados con cadmio (Cd) y su impacto en la actividad de electro-oxidación de glucosa. Se investiga la estructura electrónica y las propiedades de

**Semiconductores:**

-Se enfoca principalmente en el uso de TiO<sub>2</sub> debido a sus propiedades ópticas y electrónicas sobresalientes, su estabilidad química y sus altas actividades fotoelectroquímicas. -Las nanopartículas de cadmio (Cd), se utilizan como aditivos

**Eficiencia fotocatalítica:**

-La eficiencia fotocatalítica se midió mediante la electro-oxidación de glucosa en presencia de luz ultravioleta (UV) utilizando técnicas electroquímicas como la voltametría cíclica (CV), la cronocoulometría (CA) y la

---

la superficie de TiO<sub>2</sub> con la para mejorar la actividad espectroscopía de impedancia  
adición de Cd, así como los fotocatalítica de TiO<sub>2</sub> en la electroquímica (EIS).  
resultados de las mediciones de electro-oxidación de glucosa. El -Se prepararon catalizadores de  
electro-oxidación fotocatalítica estudio se centra en la TiO<sub>2</sub> soportados con diferentes  
de glucosa. El estudio aborda la preparación y caracterización de cargas de Cd (0,05-3%) y se  
síntesis de los catalizadores, su catalizadores de TiO<sub>2</sub> caracterizaron mediante técnicas  
caracterización mediante soportados con Cd, y se como difracción de rayos X  
diversas técnicas de análisis, y la investiga cómo la adición de Cd (XRD), microscopía electrónica  
evaluación de su desempeño en altera la estructura electrónica y de barrido (SEM),  
la actividad de electro-oxidación las propiedades de la superficie espectroscopía de fotoelectrones  
de glucosa. de TiO<sub>2</sub>. de rayos X (XPS) y reducción  
programada de temperatura  
(TPR).

-Se evaluó la actividad fotocatalítica de los catalizadores mediante la electro-oxidación de glucosa en solución de KOH 1M + glucosa 0,5M en presencia de luz UV y en la oscuridad. Se midió la corriente electroquímica generada durante la oxidación de la glucosa y se comparó con la corriente generada en la oscuridad para determinar la eficiencia fotocatalítica de los catalizadores.

- En presencia de luz UV, los catalizadores de TiO<sub>2</sub> soportados con una carga de Cd del 0,1% mostraron una actividad específica de 6 mA/cm<sup>2</sup> y una actividad masiva de 15015,02 mA/mg Cd, lo que

representa una mejora de aproximadamente 6 veces en comparación con los catalizadores sin Cd. Además, se encontró que los catalizadores de TiO<sub>2</sub> soportados con Cd eran estables y resistentes a la intoxicación durante la electro-oxidación de glucosa.

<b>Electro-oxidación de glucosa:</b>	<b>Métodos utilizados:</b>	<b>Estructura electrónica y las propiedades:</b>
<p>-Proceso electroquímico que implica la oxidación de la glucosa en presencia de un catalizador y un electrodo. Durante este proceso, la glucosa se oxida a ácido glucónico y se liberan electrones que fluyen a través del electrodo, generando una corriente eléctrica.</p> <p>-La glucosa es un carbohidrato que se encuentra en muchos materiales biológicos, como la biomasa y los residuos orgánicos. La electro-oxidación de glucosa puede ser una forma de convertir estos materiales en energía eléctrica sin emitir gases de efecto invernadero como el dióxido de carbono.</p>	<p><b>-Método de impregnación húmeda:</b> se utilizó para cargar nanopartículas de Cd en el soporte de TiO<sub>2</sub>.</p> <p><b>-Difracción de rayos X (XRD):</b> se utilizó para determinar la estructura cristalina de los catalizadores.</p> <p><b>-Microscopía electrónica de barrido (SEM) y microscopía electrónica de transmisión (TEM):</b> se utilizaron para observar la morfología y la distribución de tamaño de partícula de los catalizadores.</p> <p><b>-Espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS):</b> se utilizó para analizar la composición química y la estructura electrónica de los catalizadores.</p> <p><b>-Análisis de reducción programada de temperatura (TPR) y análisis de oxidación</b></p>	<p>-Según los resultados de los análisis de XPS y TPR, la adición de Cd cambia la estructura electrónica de la superficie del TiO<sub>2</sub>, lo que se refleja en un cambio en los picos de energía de enlace de los elementos presentes en los catalizadores. Además, la adición de Cd aumenta la cantidad de sitios ácidos en la superficie del catalizador, lo que puede influir en su actividad catalítica.</p> <p>-Las propiedades de la superficie, la adición de Cd conduce a cambios en la morfología y la distribución del tamaño de partícula de los catalizadores de TiO<sub>2</sub>, como se observó en los análisis de SEM y TEM. Estos cambios en la morfología y la distribución del</p>

**programada de temperatura (TPO):** se utilizaron para estudiar la reducción y oxidación de los catalizadores y para determinar la cantidad de Cd presente en los catalizadores.

**-Análisis de espectroscopía de desorción programada de temperatura (TPD):** se utilizó para caracterizar los sitios de adsorción en la superficie de los catalizadores.

---

**Atomic Layer Deposited Corrosion Protection: A Path to Stable and Efficient Photoelectrochemical Cells (Scheuermann & McIntyre, 2016).**

---

<b>Resumen:</b>	<b>Semiconductores:</b>	<b>Banda de energía:</b>
-Se centra en el uso de la deposición de capas atómicas (ALD) como una técnica para proteger contra la corrosión y mejorar la eficiencia de las celdas fotoelectroquímicas. Se discute cómo esta técnica puede ser aplicada en la producción de combustibles solares y productos químicos solares, lo que la convierte en un componente crucial para una economía de energía sostenible. Además, se explora el potencial de la ALD para controlar defectos en superficies, lo que podría generalizar esta tecnología de protección a una amplia gama de materiales necesarios para	<b>-MoS<sub>2</sub> (Disulfuro de Molibdeno):</b> Es un material bidimensional con una estructura de capas de átomos de molibdeno y azufre. La deposición por ALD puede producir capas uniformes de MoS <sub>2</sub> con excelente control sobre el grosor.	<b>-MoS<sub>2</sub>:</b> El ancho de banda prohibida de MoS <sub>2</sub> es de aproximadamente 1.2 eV, lo que corresponde a una longitud de onda de alrededor de 1033 nm en el espectro electromagnético.
	<b>-Silicio (Si):</b> Es un semiconductor ampliamente utilizado en dispositivos electrónicos y celdas solares. En el contexto de la protección contra la corrosión, se ha investigado la deposición de capas delgadas de óxido de silicio (SiO <sub>2</sub> ) por ALD para proteger los fotoanodos de	<b>-Silicio (Si):</b> El ancho de banda prohibida del silicio es de aproximadamente 1.1 eV, lo que corresponde a una longitud de onda de alrededor de 1127 nm en el espectro electromagnético.
		<b>-TiO<sub>2</sub>:</b> El ancho de banda prohibida del dióxido de titanio varía dependiendo de la fase cristalina, se encuentra alrededor de 3.0 eV, lo que corresponde a una longitud de onda de alrededor de 413 nm en el

---

---

realizar completamente la silicio. espectro electromagnético.

tecnología de celdas fotoelectroquímicas para la fotosíntesis artificial.

**-TiO<sub>2</sub> (Dióxido de Titanio):**  
Las capas de TiO<sub>2</sub> depositadas por ALD han demostrado estabilizar fotoanodos de silicio, galio y fosfuro de galio para la oxidación del agua.

**-Nanopartículas de Platino (Pt):** El platino es un catalizador ampliamente utilizado en aplicaciones electroquímicas y fotocatalíticas. La deposición de nanopartículas de platino sobre una matriz de nanocables de silicio utilizando ALD.

**-Catalizadores de Níquel (Ni) e Iridio (Ir)/IrOx:** Estos materiales se han estudiado como capas de protección y como catalizadores para la oxidación del agua en celdas fotoelectroquímicas. Se ha informado sobre la deposición de capas delgadas de Ni e Ir/IrOx por ALD para proteger fotoanodos de silicio.

---

**Proceso de deposición de capas atómicas:** **Eficacia de la capa de producción:**

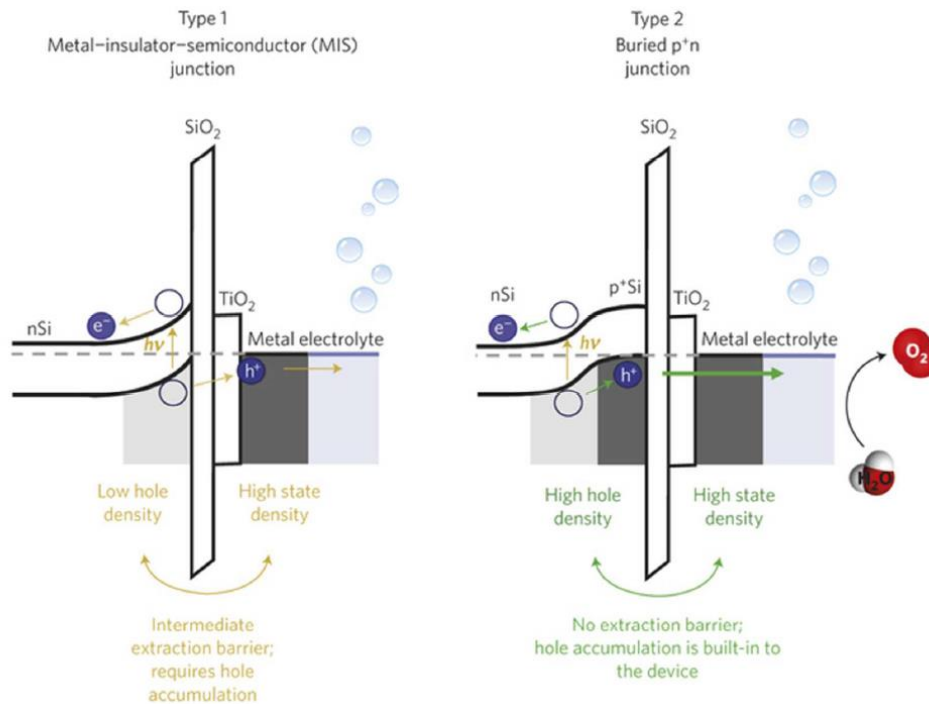
-Es una técnica de deposición de películas delgadas que se lleva a cabo capa por capa, de manera secuencial y controlada. Consiste en la alternancia de pulsos de precursores gaseosos

-El fotovoltaje de 550 mV representa la cantidad de voltaje generado por la celda fotoelectroquímica cuando está expuesta a la luz solar. Este valor es significativo, ya que

que reaccionan con la superficie del sustrato para formar una capa atómica, seguidos de purgas para eliminar los subproductos y residuos. Este proceso se repite hasta alcanzar el grosor deseado de la película. La ALD ofrece un control preciso del grosor de la película, una cobertura uniforme y una conformidad excepcional, lo que la hace ideal para recubrir superficies complejas y proteger contra la corrosión

indica la capacidad de la capa de protección ALD-TiO<sub>2</sub> para facilitar la separación de cargas y la generación de una corriente eléctrica a partir de la luz solar. -La densidad de corriente de saturación de 30 mA/cm<sup>2</sup> representa la máxima corriente que puede ser generada por la celda fotoelectroquímica cuando está expuesta a una intensidad de luz suficientemente alta. Este valor indica la eficiencia de la capa de protección ALD-TiO<sub>2</sub> para facilitar la transferencia de electrones y la generación de corriente eléctrica.

**Reacciones:**



**Molecular-Modified Photocathodes for Applications in Artificial Photosynthesis and Solar-to-**

---

**Fuel Technologies** (Reyes Cruz et al., 2022).

---

**Resumen:**

-Se centra en el desarrollo de fotocátodos híbridos que utilizan catalizadores moleculares para llevar a cabo reacciones de formación de combustible mediante la conversión de energía solar en combustibles químicos. Se discuten los avances en la interfaz de catalizadores moleculares con semiconductores que absorben luz visible, con el objetivo de comprender y mejorar la eficiencia de estos sistemas para la fotosíntesis artificial y las tecnologías solares para la producción de combustibles. El enfoque principal del artículo es la síntesis y caracterización de catalizadores para la reducción de dióxido de carbono, así como la producción de hidrógeno a partir de la división del agua, utilizando sistemas híbridos de semiconductores y catalizadores moleculares.

**Semiconductores:**

**-BiVO<sub>4</sub>:** Este semiconductor ha sido estudiado por su capacidad para absorber luz visible y promover la oxidación del agua en la fotosíntesis artificial.

**-Cu<sub>2</sub>O:** El óxido de cobre (I) es un semiconductor con una banda prohibida estrecha que lo hace adecuado para la absorción de luz solar. Se ha investigado su uso en la producción de hidrógeno a partir de la división del agua.

**-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:** El óxido de hierro (III) es otro semiconductor que se ha estudiado para la producción de hidrógeno a partir de la división del agua mediante la absorción de luz solar.

**Banda de energía:**

**-BiVO<sub>4</sub>:** El ancho de banda prohibida es de aproximadamente 2.4 eV, y una longitud de onda de absorción alrededor de 516 nm en el rango del verde azulado.

**-Cu<sub>2</sub>O:** El ancho de banda prohibida es de alrededor de 2.0 eV, y una longitud de onda de absorción de 620 nm en el rango del rojo.

**-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:** El ancho de banda prohibida es de aproximadamente 2.2 eV, y una longitud de onda de absorción de alrededor de 560 nm en el rango del verde.

**-TiO<sub>2</sub>:** El ancho de banda prohibida es de aproximadamente 3.2 eV, y a una longitud de onda de absorción alrededor de 387 nm en el rango del ultravioleta.

**-CdS:** El ancho de banda prohibida es de alrededor de 2.4 eV, lo que corresponde a una longitud de onda de absorción de 516 nm en el rango del verde azulado.

**-ZnO:** El ancho de banda prohibida del óxido de zinc (ZnO) es de aproximadamente

3.3 eV, lo que corresponde a una longitud de onda de absorción de alrededor de 375 nm en el rango del ultravioleta.

<b>Nanopartículas:</b>	<b>Fotocatalizadores:</b>	<b>Eficiencia fotocatalítica:</b>
<p>-TiO<sub>2</sub>: El dióxido de titanio es un semiconductor ampliamente utilizado en la producción de combustibles solares debido a su alta estabilidad química y su capacidad para absorber luz UV. Las nanopartículas de TiO<sub>2</sub> se han utilizado en la producción de hidrógeno a partir de la división del agua y en la reducción de dióxido de carbono.</p>	<p>- <b>Cobaloxime:</b> Este complejo de cobalto ha sido estudiado por su capacidad para catalizar la reducción de protones en la producción de hidrógeno a partir de la energía solar. Se ha utilizado como fotocatalizador en combinación con semiconductores para promover la reacción de reducción del agua.</p>	<p>-Los fotocátodos resultantes de la funcionalización de la superficie con un compuesto de [Fe<sub>2</sub>S<sub>2</sub>(CO)<sub>6</sub>] lograron una eficiencia de evolución de H<sub>2</sub> del 60% y una corriente de alrededor de 0.1 μA cm<sup>-2</sup> durante al menos 1 hora sin degradación detectable.</p>
<p>- CdS: El sulfuro de cadmio es otro semiconductor que se ha utilizado en la producción de combustibles solares debido a su alta eficiencia de absorción de luz y su capacidad para promover la reducción de dióxido de carbono. Las nanopartículas de CdS se han modificado con catalizadores moleculares para mejorar su eficiencia en la producción de combustibles solares.</p>	<p>- <b>Complejos de rutenio:</b> Los complejos de rutenio han sido investigados por su capacidad para catalizar reacciones de transferencia de electrones en sistemas fotoelectroquímicos. Se han utilizado como fotocatalizadores para mejorar la eficiencia de los semiconductores en la producción de combustibles solares.</p>	<p>-Un sistema de CdS:CaI con un fotocatalizador de nitrato reductasa (NR) y ácido ascórbico (AA) logró una tasa de producción de H<sub>2</sub> de aproximadamente 350 s<sup>-1</sup> a una intensidad de luz de 3000 μE m<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>, y una TON de 10<sup>6</sup> por CdS:CaI.</p>
<p>-ZnO: El óxido de zinc es otro semiconductor que se ha utilizado en la producción de combustibles solares debido a su</p>	<p>- <b>Complejos de iridio:</b> Los complejos de iridio también han sido estudiados por su capacidad para catalizar reacciones de transferencia de electrones en sistemas fotoelectroquímicos. Se</p>	

alta estabilidad química y su capacidad para absorber luz UV. Las nanopartículas de ZnO se han utilizado en la producción de hidrógeno a partir de la división del agua y en la reducción de dióxido de carbono.

han utilizado como fotocatalizadores para mejorar la eficiencia de los semiconductores en la producción de combustibles solares.

---

**Solar Panel Technologies for Light-to-Chemical Conversion** (Andrei et al., 2022).

---

**Resumen:**

-Se enfoca en las tecnologías de paneles solares para la conversión de luz en productos químicos, incluyendo la producción de combustibles solares. Se exploran diferentes enfoques y avances en la producción de combustibles solares, incluyendo paneles compactos integrados y tecnologías de películas delgadas. El artículo también compara diferentes enfoques en términos de su estructura, principio de operación y alcance de productos/reacciones.

**Semiconductores:**

**-BiVO<sub>4</sub> (Vanadato de Bismuto):** Es un material semiconductor que ha demostrado ser efectivo en la producción de combustibles solares a partir de agua y dióxido de carbono. Tiene propiedades de absorción de luz que lo hacen adecuado para la conversión de energía solar en productos químicos.

**-SrTiO<sub>3</sub> (Estroncio Titanato):** Este material también tiene propiedades fotocatalíticas que lo hacen útil para la conversión de energía solar en productos químicos.

**-Perovskitas:** Los perovskitas son un tipo de material con una estructura cristalina específica que se ha investigado para su uso en celdas solares y otros dispositivos fotovoltaicos. Pueden ser utilizadas como

**Oxidación de agua y reducción**

**de CO<sub>2</sub>:**

-El potencial de oxidación del agua, también conocido como el potencial de reducción del par H<sup>+</sup>/H<sub>2</sub>O, es fundamental en la conversión de energía solar en productos químicos, ya que está asociado con la reacción de oxidación del agua para producir oxígeno y protones. El potencial de reducción del par H<sup>+</sup>/H<sub>2</sub>O a pH neutro es aproximadamente +1.23 V vs el electrodo normal de hidrógeno (NHE).

- El potencial de reducción del CO<sub>2</sub> es alto, lo que significa que se requiere una gran cantidad de energía para reducir el CO<sub>2</sub> a compuestos orgánicos. El potencial de reducción del CO<sub>2</sub> a metano (CH<sub>4</sub>) es de aproximadamente -0.24 V vs el electrodo normal de hidrógeno (NHE) a pH neutro

---

fotocátodos en la producción de combustibles solares.

**Nanopartículas:** En cuanto a las nanopartículas de carbono y carbon nitride, estas son materiales con propiedades semiconductoras que se han estudiado para su uso en la producción de combustibles solares a partir de biomasa, plásticos y residuos. Tienen propiedades de absorción de luz y actividad catalítica que los hacen adecuados para la conversión de energía solar en productos químicos.

<b>Banda de energía:</b>	<b>Eficiencia fotocatalítica:</b>	<b>Propiedades estructurales de los semiconductores:</b>
-El BiVO <sub>4</sub> tiene una banda prohibida de aproximadamente 2,4 eV, lo que significa que se requiere una energía de al menos 2,4 eV para excitar un electrón desde el nivel de energía de valencia al nivel de energía de conducción.	-El BiVO <sub>4</sub> ha demostrado una eficiencia fotocatalítica para la oxidación del agua con una eficiencia cuántica de fotooxidación de aproximadamente 1.2% a 420 nm.	<b>-Estructura cristalina:</b> -BiVO <sub>4</sub> tiene una estructura cristalina ortorrómbica, con parámetros de red específicos que determinan su disposición atómica y su comportamiento fotocatalítico.
-El SrTiO <sub>3</sub> tiene una banda prohibida de aproximadamente 3,2 eV.	- Los perovskitas de haluro de plomo (como CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> ) han demostrado una eficiencia fotocatalítica para la reducción del agua de hasta el 12,3%.	-SrTiO <sub>3</sub> tiene una estructura cristalina perovskita, que es cúbica a temperatura ambiente. La disposición atómica en la estructura perovskita es fundamental para sus propiedades fotocatalíticas.
-Los perovskitas tienen bandas prohibidas que varían entre 1,5 y 2,5 eV dependiendo de su composición y estructura.	- Los perovskitas de haluro de plomo también han demostrado una eficiencia fotocatalítica para la oxidación del agua de hasta el 1,6%.	-La estructura cristalina de los perovskitas es una estructura
Longitud de onda: -El BiVO <sub>4</sub> tiene una absorción		

---

máxima en el rango de 400-500 nm. -El SrTiO<sub>3</sub> tiene una absorción máxima en el rango de 300-400 nm.

-Los perovskitas tienen una absorción máxima en el rango de 400-800 nm.

- El SrTiO<sub>3</sub> dopado con niobio (Nb) ha demostrado una eficiencia fotocatalítica para la reducción del agua de hasta el 0,5%.

- El SrTiO<sub>3</sub> dopado con lantano (La) y rodio (Rh) ha demostrado una eficiencia fotocatalítica para la oxidación del agua de hasta el 0,76%.

---

**Diferencias hojas artificiales y las láminas de PC:**

**Eficiencia de conversión solar a combustible:**

-Micro y nanoestructura:

- Hojas artificiales: Las hojas artificiales suelen estar compuestas por múltiples capas delgadas de materiales, como semiconductores, catalizadores y membranas, que están diseñadas para realizar reacciones fotoelectroquímicas. Estas capas pueden tener estructuras micro y nanoescala para maximizar la absorción de luz y la eficiencia de la reacción.

-Hojas artificiales: En estudios recientes, se han reportado eficiencias de conversión solar a combustible de hasta el 10% para hojas artificiales que utilizan una combinación de perovskita y BiVO<sub>4</sub> como absorbedores de luz. Sin embargo, las eficiencias típicas de conversión solar a combustible para hojas artificiales suelen estar en el rango del 1-2%.

-Láminas de PC: Las láminas de PC consisten en partículas fotocatalíticas dispersas o fijadas en un sustrato, como un electrodo, para llevar a cabo reacciones de fotocatalisis. La estructura a nivel micro y nanoescala de las partículas y su distribución en el sustrato son

**-Láminas de PC:** Las eficiencias de conversión solar a combustible para láminas de PC también varían ampliamente en función de los materiales utilizados y las condiciones de operación. En estudios previos, se han reportado eficiencias de conversión solar a combustible

---

importantes para la eficiencia de la reacción. de hasta el 5% para láminas de PC que utilizan BiVO<sub>4</sub> como

-Principio de funcionamiento: absorbedor de luz. Sin embargo,

- Hojas artificiales: Las hojas artificiales funcionan mediante la absorción de luz solar por parte de los materiales semiconductores, generando pares electrón-hueco que participan en reacciones fotoelectroquímicas, como la fotólisis del agua o la reducción de CO<sub>2</sub>. las eficiencias típicas de conversión solar a combustible para láminas de PC suelen estar en el rango del 0,1-1%.

generando pares electrón-hueco que participan en reacciones fotoelectroquímicas, como la fotólisis del agua o la reducción de CO<sub>2</sub>.

-Láminas de PC: Las láminas de PC utilizan partículas fotocatalíticas para llevar a cabo reacciones de fotocatalisis, donde la luz solar activa los catalizadores superficiales para promover reacciones de oxidación-reducción, como la fotólisis del agua o la reducción de CO<sub>2</sub>.

-Alcance del producto/reacción:

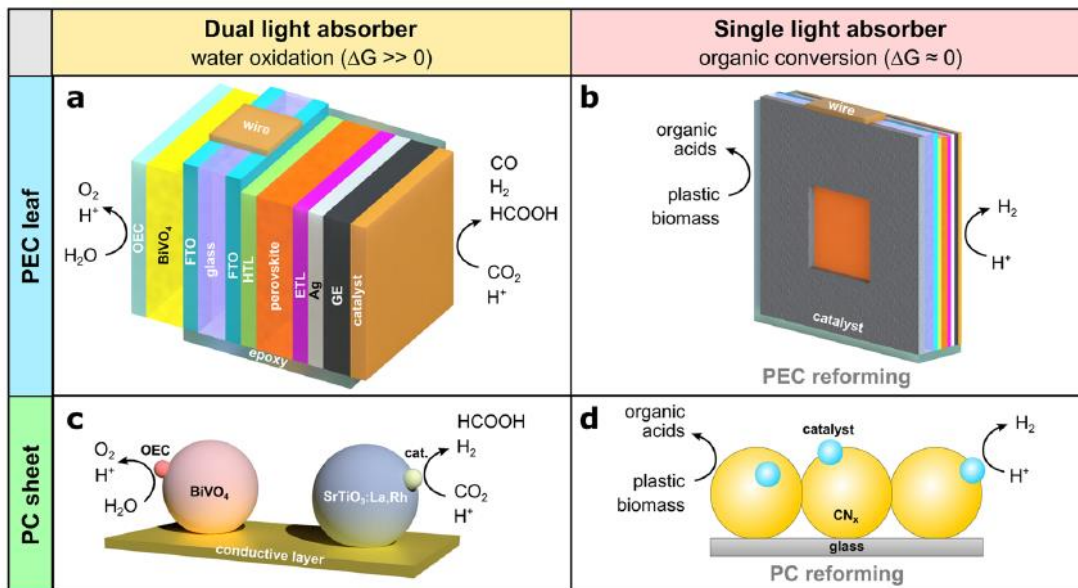
-Hojas artificiales: Las hojas artificiales están diseñadas para realizar reacciones fotoelectroquímicas más complejas, como la producción de hidrógeno a partir de la fotólisis del agua, la reducción de CO<sub>2</sub> y la síntesis de productos químicos complejos.

-Láminas de PC: Las láminas

---

de PC se utilizan principalmente para reacciones de fotocatalisis, como la fotólisis del agua, la reducción de CO<sub>2</sub> y la síntesis de productos químicos simples a partir de reacciones de oxidación-reducción.

**Reacciones:**





**Anexo B.** Nombre del anexo