

# Fotocatálisis: nanomateriales para combatir la contaminación y obtener energía

## Photocatalysis: nanomaterials for pollution abatement and energy production

M. Faraldos Izquierdo

Instituto de Catálisis y Petroleoquímica (ICP- CSIC).

**Resumen:** El proceso fotocatalítico, basado en la generación, separación y migración de pares electrón-hueco cuando se irradia un semiconductor, tiene múltiples aplicaciones para tratamientos de descontaminación del medio ambiente (aguas, aire urbano, suelos), síntesis de compuestos de alto valor añadido u obtención de energía mediante celdas solares. Todo ello de forma sostenible al utilizar la radiación solar.

**Abstract:** The photocatalytic process, based on the electron-hole pairs generation, separation and migration when a semiconductor is irradiated, has multiple sustainable applications for environmental (water, urban air, soil) depollution treatment, synthesis of added-value compounds or energy production, using solar radiation.

### 1. Fotocatálisis

El proceso fotocatalítico heterogéneo está basado en la excitación de un sólido (fotocatalizador), normalmente un semiconductor de banda ancha como el  $\text{TiO}_2$ , mediante la irradiación con luz de una energía igual o superior a su *band-gap*, produciendo la transición de un electrón de la banda de valencia (BV) a la banda de conducción (BC) y formando pares electrón-hueco ( $e^-/h^+$ ). Estos pares

$e^-/h^+$  fotogenerados pueden migrar a la superficie del catalizador y reaccionar con especies adsorbidas o próximas a la superficie, pero también pueden sufrir procesos de recombinación, que disminuirían la eficiencia de la reacción fotocatalítica. Los huecos ( $h^+$ ) formados en la banda de valencia del semiconductor, pueden reaccionar con especies dadoras de electrones, como son las moléculas de agua adsorbidas, generando radicales hidroxilo ( $\cdot\text{OH}$ ), muy reactivos, capaces de degradar la materia orgánica. Mientras que los electrones pueden reaccionar con especiesceptoras de electrones, como el  $\text{O}_2$ , dando lugar a radicales  $\text{O}_2^{\cdot-}$  [1].

Con el fin de minimizar los procesos de recombinación e incrementar al máximo el aprovechamiento de la radiación incidente, sobre todo cuando se trata de luz solar, uno de los principales retos actuales es el desarrollo de materiales fotocatalíticos nuevos o modificados (dopajes aniónico y/o catiónico, composites, deposición de nanopartículas metálicas, acoplamiento de semiconductores, etc.) que mejoren su eficiencia operando con un mayor intervalo de longitudes de onda.

Las aplicaciones de la fotocatalisis heterogénea se extienden desde la descontaminación de aguas,

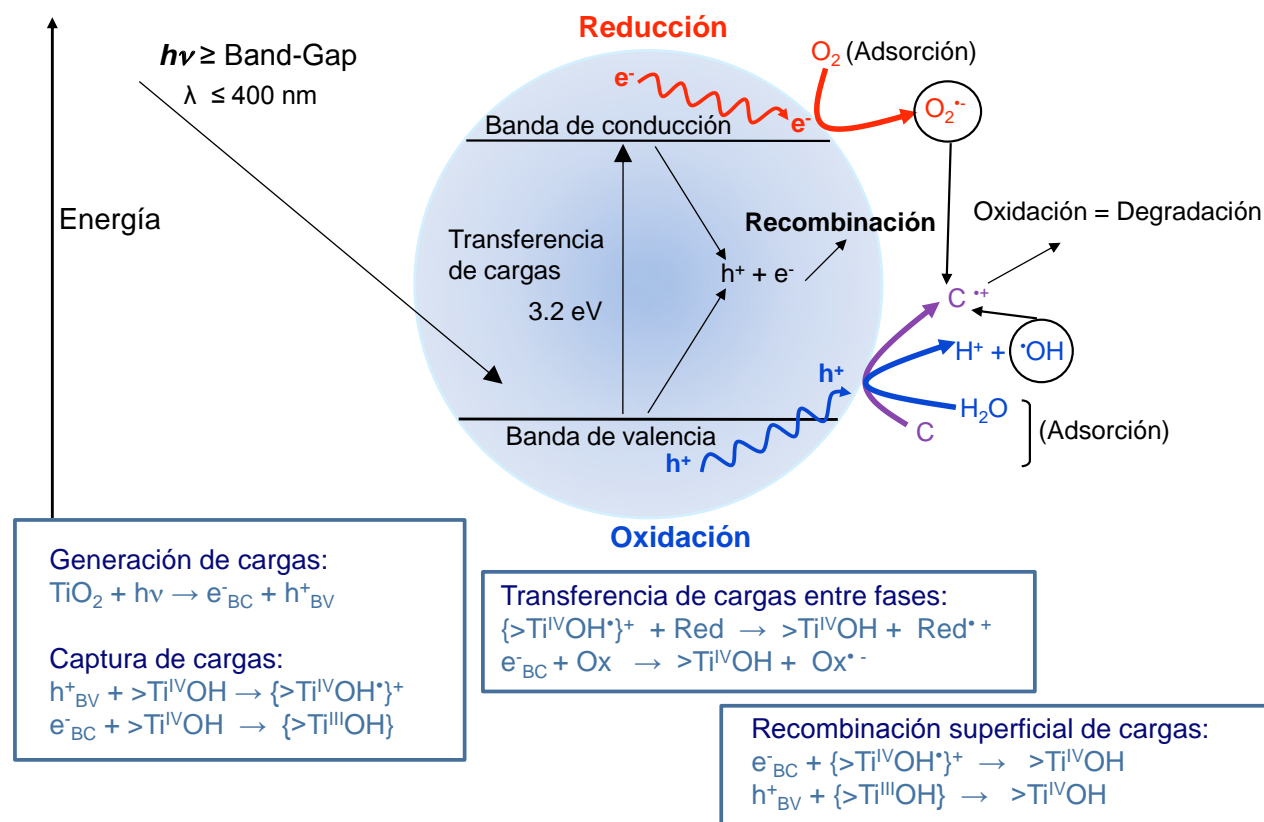


Figura 1. Esquema del proceso fotocatalítico en una partícula de semiconductor

Figure 1. Scheme of photocatalytic process in a semiconductor particle

purificación de aire interior, efecto biocida-fungicida-bactericida, hasta descontaminación de aire urbano, propiedades autolimpiantes.

**2. Tratamiento fotocatalítico para la eliminación de contaminantes orgánicos en efluentes acuosos.**

La conversión durante el proceso fotocatalítico depende de muchas variables propias del catalizador (superficie específica, punto isoeléctrico, propiedades ópticas, tamaño de partícula hidrodinámico, etc.) o del proceso (optimización de concentración de catalizador, pH, caudal de oxidante, carga inicial de contaminante, etc.) que es necesario optimizar, y frecuentemente resulta específico del sistema que se estudia [2][3].

El estudio de los sistemas catalíticos implica determinar el proceso por el que se produce la fotooxidación: mecanismo directo, por transferencia directa de los huecos fotogenerados o indirecto, mediante la formación de radicales hidroxilo. Mientras que el mecanismo directo requiere, en general, de una fuerte adsorción del contaminante a la superficie del catalizador y presenta, generalmente, una cinética de primer orden, el mecanismo indirecto no precisa de adsorción, una presencia del contaminante en la interfase próxima a la superficie del catalizador parece ser suficiente, y presenta una cinética de orden cero a partir de moderadas cargas de TOC.

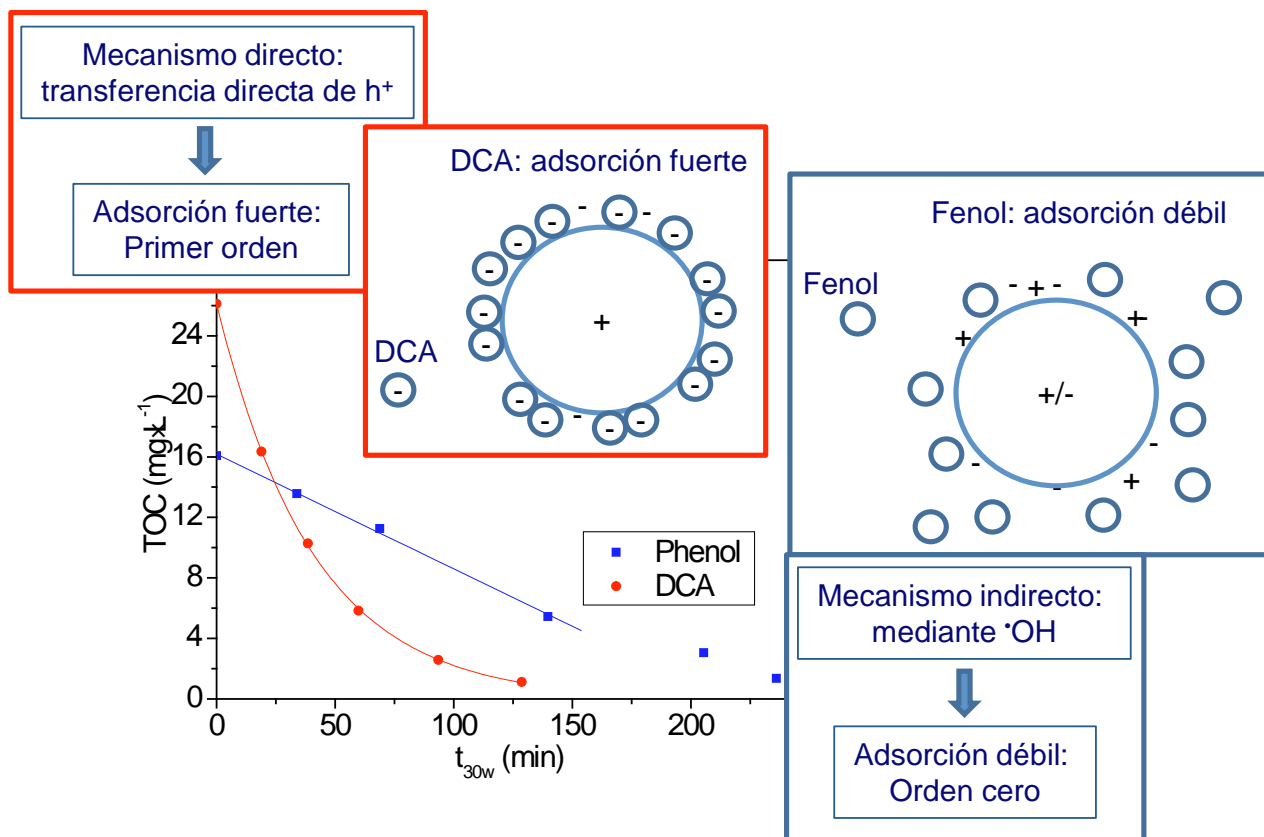
El tratamiento de efluentes naturales puede modificar el comportamiento del sistema fotocatalítico debido a la presencia fundamentalmente de iones en el medio de reacción, que originan cambios del pH, fuerza iónica, equilibrios de adsorción-desorción de contaminantes, agregación del fotocatalizador, etc. [4].

La aplicación tecnológica de la fotocatalisis heterogénea al tratamiento de efluentes acuosos contaminados se ha visto retrasada por la etapa de recuperación del catalizador para su utilización en ciclos sucesivos. Si bien, una buena dispersión del fotocatalizador en el medio acuoso garantiza un óptimo aprovechamiento de la radiación solar incidente, un material fácilmente recuperable y reusable favorece la reducción de costes asociados a la utilización en escala real. Por este motivo se trabaja activamente en el desarrollo de sistemas fotocatalíticos inmovilizados en diferentes soportes sin que presenten pérdida de actividad en la fotodegradación de contaminantes, pero hasta la actualidad no se ha conseguido soportar fotocatalizadores manteniendo una eficacia y durabilidad suficiente.

**3. Tratamiento fotocatalítico para reducir la contaminación ambiental**

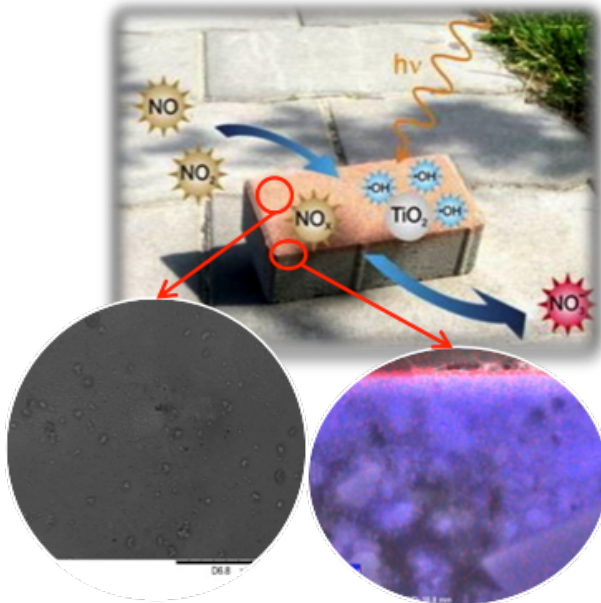
La contaminación ambiental se concentra en las zonas urbanas de grandes ciudades, caracterizándose por la presencia de NOx, SOx, CO<sub>2</sub>, VOC's, partículas en suspensión, etc. y en los entornos cerrados, donde pueden encontrarse compuestos químicos, biológicos, patógenos, etc. En ambos casos la aplicación de recubrimientos fotocatalíticos sobre las distintas infraestructuras urbanas puede ayudar a reducir las concentraciones de materias contaminantes complementada con la acción biocida, mitigando el efecto de estas sustancias nocivas para la salud humana [5][6].

Existen diferentes formas de incorporación del fotocatalizador (mezclas físicas con el material base, aplicación de una capa superficial, percolación de lechadas fotocatalíticas, *sprays* fotocatalíticos



**Figura 2.** Características del mecanismo directo e indirecto en fotocatalisis  
**Figure 2.** Characteristics of direct and indirect mechanism on photocatalysis

sobre superficies, *dip-coating*, *PVD-coating*, etc.) con el fin de conseguir un recubrimiento homogéneo, pero sobre todo bien adherido al soporte (pavimento, pintura, azulejo, baldosa, cubiertas, tejidos, polímeros, vidrio, superficies metálicas, conductos de aire acondicionado, etc.). La radiación viene proporcionada por el sol cuando las aplicaciones son en exterior o lámparas de radiación adecuada, generalmente UVA, cuando se trata de usos en interior.

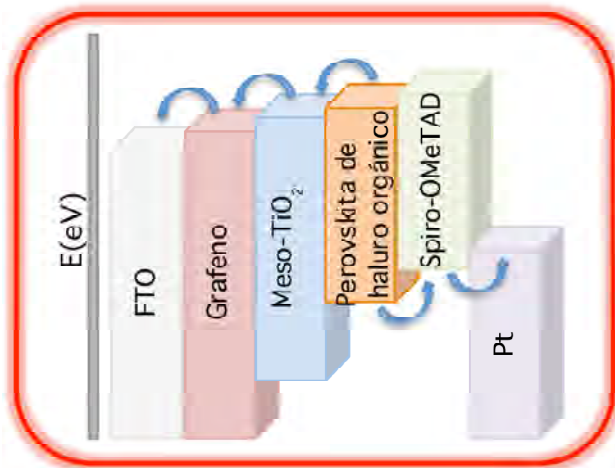


**Figura 3.** Recubrimiento fotocatalítico en infraestructuras urbanas  
**Figure 3.** Photocatalytic coating in urban infrastructures

Además de las propiedades descontaminantes y desinfectantes de los recubrimientos fotocatalíticos presentan la característica de mantenerse limpios durante períodos de tiempo prolongados al evitar la adherencia de las partículas de suciedad en su superficie o degradarla [7]. Debido a sus múltiples propiedades, estos recubrimientos están adquiriendo relevancia socio-económica al asociarse a productos de calidad, con fácil mantenimiento y alto valor añadido, por lo que comienzan a aprobarse nuevas normativas administrativas para fomentar su aplicación en la licitación de futuros proyectos en infraestructuras urbanas.

#### 4. Celdas fotocatalíticas para obtención de energía

La exploración de fuentes de energía alternativas ha encontrado en la energía solar un gran potencial todavía poco explotado. Actualmente se aplican con éxito las células fotovoltaicas basadas en silicio para transformar energía solar en electricidad, que, con un 40% aproximadamente de eficiencia, parecen haber alcanzado su límite de madurez. La búsqueda de alternativas más eficientes, económicas, versátiles y duraderas, actualmente apuesta por una tecnología basada en generaciones emergentes de celdas solares con diferentes composiciones [8][9], que ha llevado a desarrollar celdas flexibles que incorporan grafeno, óxido de titanio, perovskitas orgánicas y polímeros conductores siguiendo el esquema de la figura, que, aunque todavía no ha alcanzado la eficiencia de las células solares comercializadas, el incremento obtenido desde su primer desarrollo ha sido tan espectacular (> 20% en 2015) que no se duda de su éxito futuro.



**Figura 4.** Esquema de una celda solar de nueva generación  
**Figure 4.** Scheme of a new generation solar cell

#### 5. Bibliografía

- [1] Ashimoto KH, Rie HI, Fujishima A. TiO<sub>2</sub> Photocatalysis: A Historical Overview and Future Prospects. *Japanese Journal of Applied Physics* 2005;44(12):8269–8285
- [2] Ryu J, Choi W. Substrate-Specific Photocatalytic Activities of TiO<sub>2</sub> and Multiactivity test for water treatment application. *Environ. Sci. Technol.* 2008;42:194-300
- [3] Prieto-Mahoney OO, Murakami N, Ahe R, Ohtani B. Correlation between photocatalytic activities and structural and physical properties of Titanium (IV) oxide powders. *Chemistry Letters* 2009;38(3):238-239
- [4] Carbajo J, García-Muñoz P, Tolosana-Moranchel A, Faraldos M, Bahamonde A. Effect of water composition on the photocatalytic removal of pesticides with different TiO<sub>2</sub> catalysts. *Environ Sci Pollut Res* 2014;21:12233–12240
- [5] Chen J, Poon CS. Photocatalytic construction and building materials: From fundamentals to Applications. *Building and Environment* 2009;44:1899–1906
- [6] Wang S, Ang HM, Tade MO. Volatile organic compounds in indoor environment and photocatalytic oxidation: State of the art. *Environment International* 2007;33:694–705
- [7] Mendoza C, Valle A, Castellote M, Bahamonde A, Faraldos M. TiO<sub>2</sub> and TiO<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub> coated cement: Comparison of mechanic and photocatalytic properties. *Appl. Catal. B: Environmental* 2015;178:155-164
- [8] Peter LM. The Gratzel Cell: Where Next? *J. Phys. Chem. Lett.* 2011;2:1861–1867
- [9] Hagfeldt A, Boschloo G, Sun L, Kloo L, Pettersson H. Dye-Sensitized Solar Cells. *Chem. Rev.* 2010; 110:6595–6663