

Tabla de contenido

| | |
|---|--|
| Resumen | ii |
| Dedicatoria | iii |
| Agradecimientos | iv |
| Tabla de Contenido | vi |
| Índice de ilustraciones | xi |
| Capítulo 1..... | Introducción |
| 16 | |
| 1.1 | Motivación |
| 16 | |
| 1.2 | Sinopsis |
| 18 | |
| Capítulo 2..... | Estado del Arte, Propuesta y Objetivos |
| 20 | |
| 2.1 | Dióxido de titanio, TiO ₂ . |
| 20 | |
| 2.1.1 Antecedentes generales..... | 20 |
| 2.1.2 Estructura cristalina del TiO ₂ | 21 |
| 2.1.3 El TiO ₂ como semiconductor, interacción TiO ₂ -luz | 23 |
| 2.1.4 Principales aplicaciones de la interacción TiO ₂ -luz. | 26 |
| 2.2 . Mejoramiento de las propiedades fotoactivas del TiO ₂ mediante la inserción de defectos, autodopaje..... | 32 |
| 2.3 | Hidrogenación <i>in-situ</i> mediante <i>Sputtering</i> Reactivo |
| 37 | |
| 2.4 | Propuesta e Hipótesis: |
| 39 | |

| | | |
|---|---|----|
| 2.5 | Objetivos | |
| 41 | | |
| 2.5.1 Objetivo Principal: | | 41 |
| 2.5.2 Objetivos Específicos: | | 41 |
| Capítulo 3..... | Métodos Experimentales para el crecimiento y caracterización de los electrodos de TiO ₂ | 42 |
| 3.1 | Crecimiento de una película delgada | 42 |
| 3.1.1 Llegada de los átomos a la superficie, adsorción/desorción: | | 43 |
| 3.1.2 Difusión superficial: | | 43 |
| 3.1.3 Nucleación: | | 44 |
| 3.1.4 Desarrollo de la Microestructura en el crecimiento de la película..... | | 46 |
| 3.2 | Pulverización Catódica, <i>Sputtering</i> | 49 |
| 3.2.1 Tipo de descarga, <i>Diode Sputtering</i> v/s <i>Magnetron Sputtering</i> : | | 51 |
| 3.2.2 <i>Sputtering</i> reactivo: | | 52 |
| 3.2.3 Optimización del proceso de <i>Sputtering</i> reactivo: | | 56 |
| 3.2.4 Ventajas de la técnica de <i>sputtering</i> | | 58 |
| 3.3 | Técnicas de caracterización estructurales y morfológicas. | 59 |
| 3.3.1 Difracción de rayos X: | | 59 |
| 3.3.2 Espectroscopia Raman: | | 62 |
| 3.3.3 Espectroscopia de absorción óptica en el rango UV/Vis: | | 65 |

| | |
|--|----|
| 3.3.4 Espectroscopia de fotoelectrones emitidos por rayos X, XPS: | 67 |
| 3.3.5 Microscopía de barrido de electrones de emisión de campo, FE-SEM: | 69 |
| 3.4 Caracterización fotoelectroquímica | 70 |
| 3.4.1 Fotorreducción del agua: | 71 |
| 3.4.2 Eficiencia de conversión fotón-corriente, IPCE: | 72 |
| 3.5 Descripción del sistema de <i>Sputtering</i> reactivo a utilizar..... | 74 |
| Capítulo 4..... Resultados | 77 |
| 4.1Control de la estequiometría en el proceso reactivo | 77 |
| 4.1.1 Introducción | 77 |
| 4.1.2 Metodología: | 78 |
| 4.1.3 Caracterización estructural: | 82 |
| 4.1.4. Caracterización morfológica: | 89 |
| 4.1.5. Conclusiones sección 4.1: | 94 |
| Finalmente, la obtención de Ti ₂ O ₃ resulta de gran importancia para el desarrollo de esta tesis, debido a que será el subóxido utilizado para generar la capa defectuosa sobre el TiO ₂ , como primera vía para la formación de defectos en este material. | 94 |
| 4.2 Generación de electrodos TiO ₂ -anatasa y TiO ₂ /Ti ₂ O ₃ | 95 |
| 4.2.1. Introducción | 95 |
| 4.2.2 Fabricación de electrodos de TiO ₂ en fase anatasa | 95 |
| 4.2.3 Fabricación electrodos bicapa TiO ₂ /Ti ₂ O ₃ | 99 |

| | |
|--|-----|
| 4.2.4 Caracterización fotoelectroquímica..... | 108 |
| 4.2.5 Conclusiones sección 4.2: | 110 |
| 4.3 Modificación estructural del TiO ₂ mediante la adición de hidrógeno como segundo gas reactivo | 111 |
| 4.3.1 Introducción | 111 |
| 4.3.2 Metodología para fabricación de electrodos H:TiO ₂ :..... | 111 |
| 4.3.3 Caracterización estructural: | 112 |
| 4.3.4 Caracterización morfológica: | 125 |
| 4.3.5 Caracterización Fotoelectroquímica | 126 |
| 4.3.6. Conclusiones sección 4.3: | 130 |
| Capítulo 5. Discusión | 132 |
| 5.1 Control de la atmósfera reactiva: | 132 |
| 5.2 Generación de defectos por deficiencia de oxígeno: | 133 |
| 5.3 Generación de defectos por hidrogenación "in-situ": | 135 |
| Capítulo 6 Conclusiones finales..... | 138 |
| Bibliografía | 140 |
| Anexo I: Difracción de rayos X y textura. | 151 |
| I.I Estudio de la textura por XRD. | 151 |
| Anexo II: Cálculo espesores Ti ₂ O ₃ por elipsometría | 154 |
| Anexo III. Formación de rutilo a mayores %H ₂ | 156 |
| III.I: Difractograma: | 156 |
| III.II. Espectros Raman y de absorción:..... | 156 |
| Anexo IV: Producción científica | 158 |

| | | |
|--|--------------------|-----|
| IV.I..... | Publicaciones (1): | |
| 158 | | |
| IV.II Participación en conferencias (6): | | 158 |
| IV.III Otros: | | 160 |