

## Alineación de bandas en la interfaz $\text{SrTaO}_2\text{N} / \text{H}_2\text{O}$ , para la disociación de la molécula de agua mediante cálculos de primeros principios

- Ruby Bastidas Briceño,<sup>1,2</sup> Victoria Fernández,<sup>2,3</sup> Roberto Alonso<sup>1,2,4</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*

<sup>2</sup>*Instituto de Física de La Plata, CONICET*

<sup>3</sup>*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*

<sup>4</sup>*Instituto de Ingeniería y Agronomía, Universidad Nacional Arturo Jauretche*

La disociación fotocatalítica de la molécula de agua atrajo en las últimas dos décadas un enorme interés en la industria de la producción de hidrógeno. En este trabajo se estudia el alineamiento de las bandas de valencia y de conducción de la interfaz (001)  $\text{SrTaO}_2\text{N}/\text{H}_2\text{O}$ , el cual resulta clave para el funcionamiento de las celdas fotoelectroquímicas. Los cálculos se realizaron con métodos de primeros principios y, en vista de que los métodos convencionales (LDA, GGAs, etc.) no dan buenos resultados para la energía de los estados excitados, claves en esta problemática, se ha usado el potencial de Becke-Johnson (BJ), obteniendo resultados en muy buen acuerdo con los datos experimentales del lado semiconductor. Asimismo, en virtud de la complejidad de cálculo dada por la gran cantidad de átomos necesarios para representar esta interfaz, se realizó el estudio para diferentes espesores de la estructura en dirección z, lo que permite observar la convergencia del modelo utilizado.