

UNIVERSIDAD NACIONAL JORGE BASADRE GROHMANN

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA APLICADA

**SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ÓPTICA DE NANOPARTÍCULAS DE TITANATO DE
NIQUEL DOPADO CON CROMO Y DETERMINACIÓN DE LA EFICIENCIA EN LA
GENERACIÓN DE HIDRÓGENO VERDE**

TESIS

Presentada por:

Bach. Riquelme Rodrigo Pilco Cruz

Para optar el Título Profesional de:

LICENCIADO EN FÍSICA

TACNA - PERÚ

2025



ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS

En la ciudad de Tacna, en el auditorio de la Facultad de Ciencias de la Universidad Nacional Jorge Basadre Grohmann, siendo los 11:15 horas del día 11 de abril de 2025, estando presente el jurado calificador nominado por Resolución de Facultad N° 11239-2025-FACI-UNJBG, conformado por los siguientes doctores:

Dr. Hugo Alfredo Torres Muro Presidente

Msc. Carlos Armando Polo Bravo Secretario

Dr. Jovanetty Choque Aquino Vocal

Acto seguido, se dió lectura a la Resolución correspondiente, y del mismo modo se dió lectura al artículo 22° del Reglamento de Grupos y Títulos de la Facultad de Ciencias.

A continuación, el Presidente del Jurado invitó a el Bachiller Riquelme Rodrigo Pilco Cruz, a exponer la tesis titulada: "SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ÓPTICA de NANOPARTÍCULAS DE TITANATO DE NIQUEL DOPADO CON CROMO Y DETERMINACIÓN DE LA EFICIENCIA EN LA GENERACIÓN DE HIDRÓGENO VERDE para optar el título profesional de licenciado en Física. Siendo las 11:45 h, el tesisista conduye su exposición, luego se procedió a la formulación de las preguntas por partes de los miembros del jurado calificador. Terminado este proceso, se invitó a que los miembros del jurado emitan su calificación de acuerdo a reglamento. El promedio de la calificación dió el siguiente resultado: aprobó por unanimidad con la nota de diecisiete (17), de acuerdo al Reglamento de Grupos y Títulos de la Universidad Nacional Jorge Basadre Grohmann - Tacna.

Siendo las 12:10 horas, se dió por concluido el acto de sustentación de la tesis, firmando los señores miembros del jurado calificador, en señal de conformidad



[Handwritten signature]

Dr. Hugo A. Torres Muvo

[Handwritten signature]

Msc. CARLOS A. POLO BRAVO

[Handwritten signature]

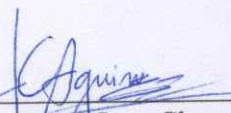

Dr. JOUANETTY J. CHOQUE AQUINO

CONSTANCIA DE SIMILITUD

Yo, JOVANETTY IVAN CHOQUE AQUINO, docente adscrito al Departamento Académico de Física de la Facultad de Ciencias, en mi condición de asesor acreditado por Resolución de Facultad N° 11108-2024-FACI-UN/JBG de la tesis titulada: " SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ÓPTICA DE NANOPARTÍCULAS DE TITANATO DE NIQUEL DOPADO CON CROMO Y DETERMINACIÓN DE LA EFICIENCIA EN LA GENERACIÓN DE HIDRÓGENO VERDE ", realizada por el Bachiller Riquelme Rodrigo Pilco Cruz, según la revisión del software de TURNITIN al informe de tesis este tiene una SIMILITUD DEL 5%, por lo que se deja constancia que la tesis esté de acuerdo al nivel PERMITIDO.

Se expide la presente constancia, a solicitud del interesado para los fines que considera conveniente.

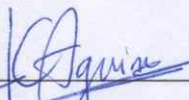
Tacna, 17 de Junio del 2025



Dr. Jovanetty Ivan Choque Aquino
Asesor de Tesis



Bach. Riquelme Rodrigo Pilco Cruz
Autor de Tesis

"SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ÓPTICA DE NANOPARTÍCULAS DE TITANATO DE NIQUEL DOPADO CON CROMO Y DETERMINACIÓN DE LA EFICIENCIA EN LA GENERACIÓN DE HIDRÓGENO VERDE"



Dr. Jovanetty Ivan Choque Aquino

Asesor de Tesis



Bach. Riquelme Rodrigo Pilco Cruz

Autor de Tesis

Agradecimientos

A mi familia por el apoyo constante en mis estudios de pregrado.

Al Dr. Jovanetty Ivan Choque Aquino, por su invaluable guía, paciencia y apoyo continuo durante todo el proceso de investigación.

Al proyecto de investigación: "Análisis morfológico de películas delgadas de $NiTiO_3$ mediante microscopía interferencial para mejorar su eficiencia en la generación de hidrogeno", dirigido por el Dr. Alberto Quispe, con contrato N°PE501079762-2022-PROCIENCIA , por el soporte académico necesario para desarrollo de la presente tesis.

Al proyecto de investigación "Generación fotocatalítica y foto-electrocatalítica de hidrógeno en la región Tacna empleando nanopartículas de $NiTiO_3$ puras y dopadas", dirigido por el Dr. Alberto Quispe, con Resolución Rectoral N° 9155-2021-UNJBG, por el uso del laboratorio y equipos para la síntesis y caracterización.

Índice

Portada	I
Hoja de jurados firmada	I
Certificado de similitud	IV
Agradecimientos	VII
Glosario de Abreviaturas	XV
Resumen	XVI
Abstract	XVIII
I Descripción de la Investigación	1
1.1 Antecedentes del Problema	1
1.2 Planteamiento del Problema	5
1.3 Descripción del Problema	8
1.4 Formulación del Problema	9
1.5 Problemas Específicos	9
1.6 Justificación e Importancia de la Investigación	9
1.6.1 Justificación social	9
1.6.2 Justificación económica	10
1.7 Objetivos	11
1.7.1 Objetivo General	11
1.7.2 Objetivos Específicos	11
1.8 Hipótesis de la Investigación	11

1.8.1	Hipótesis General	11
1.8.2	Hipótesis Específicas	12
1.9	Operacionalización de variables	12
1.9.1	Variable Independiente	12
1.9.2	Variable Dependiente	12
1.10	Limitación de investigación	13
II	Marco Teórico	15
2.1	Antecedentes de investigación	15
2.2	Titanato de Niquel	16
2.3	Hidrógeno	20
2.3.1	Propiedades fisicoquímicas del hidrógeno	20
2.3.2	Clasificación del hidrógeno	21
2.3.2.1	Hidrógeno gris	21
2.3.2.2	Hidrógeno azul	22
2.3.2.3	Hidrógeno verde	22
2.4	Vector energético	23
2.5	Generación de hidrógeno	24
2.5.1	Sensor de Hidrógeno	24
2.5.2	Fotocatálisis	25
2.6	Técnica Sol-gel	26
2.7	Teoría de bandas	27
2.7.1	Banda de valencia	28
2.7.2	Banda de conducción	28
2.7.3	Banda prohibida	28
2.8	Técnicas de caracterización	29

2.8.1	Difracción de rayos X (XRD)	29
2.8.1.1	Principio de rayos X en materiales cristalinos . . .	31
2.8.2	Espectroscopía UV-vis	32
2.8.3	Espectroscopía infrarroja por transformada de fourier(FT-IR)	33
2.9	Ecuación de Scherrer	34
2.9.1	Ecuación de Kubelka-Munk (K-M)	34
III Metodología		37
3.1	Lista de reactivos, materiales y/o equipos	37
3.1.1	Lista de reactivos	37
3.1.2	Lista de materiales	37
3.1.3	Lista de equipos	37
3.1.4	Lista de software	38
3.2	Proceso de desarrollo de investigación	39
3.2.1	Síntesis de nanopartículas	39
3.2.1.1	Titanato de níquel ($NiTiO_3$)	39
3.2.1.2	Titanato de níquel dopado con cromo ($NiTiO_3/Cr$)	44
3.2.2	Caracterización óptica	47
3.2.2.1	Difracción de rayos X (XRD)	47
3.2.2.2	Espectroscopía UV-Vis	49
3.2.2.3	Espectroscopía FTIR	49
3.2.3	Generación de hidrógeno	50
3.3	Procesamiento y análisis de datos	52
3.4	Técnicas e instrumentos de recolección de datos	53
3.5	Métodos y técnicas de procesamiento y análisis de resultados	54
IV Resultados y discusión		55

	X
4.1 Propiedades ópticas	55
4.1.1 Caracterización XRD	55
4.1.1.1 Estructura cristalina	55
4.1.1.2 Determinación del tamaño del cristalito	57
4.1.2 Caracterización UV-Vis	59
4.1.2.1 Cálculo de la banda prohibida	60
4.1.3 Caracterización FTIR	62
4.2 Eficiencia en la generación de hidrógeno verde	63
V Conclusiones	65
Referencias	78
Anexos	79

Índice de Figuras

Figura 1.	Estructura del Titanato de Niquel, (More <i>et al.</i> , 2024)	17
Figura 2.	Categoría de hidrógeno, sus materias primas y tecnologías, (Sarker, Azad, Rasul, y Doppalapudi, 2023)	23
Figura 3.	Mecanismo fotocatalítico de un semiconductor, (Nevárez- Martínez, 2017)	26
Figura 4.	Técnica Sol-Gel	27
Figura 5.	Gráfico sobre la energía prohibida directa e indirecta (Abedin, 2015)	29
Figura 6.	Difractograma y parámetros de pico de difracción (Epp, 2016)	30
Figura 7.	Calculo del band gap del óxido de zinc mediante la ecuación de Kubelka-Munk (Abdullahi <i>et al.</i> , 2016)	36
Figura 8.	Ruta para elaboración del $NiTiO_3$	39
Figura 9.	a) Nitrato de niquel	40
Figura 10.	b) Ácido cítrico	40
Figura 11.	c) Isopropóxido de titanio	40
Figura 12.	d) 2-propanol	40
Figura 13.	a) Pesaje del ácido cítrico y b) Pesaje del nitrato de niquel . .	41
Figura 14.	a) Solución 1	42
Figura 15.	b) Solución 2	42
Figura 16.	Obtención del gel	42
Figura 17.	Calcinación de 700°C	43
Figura 18.	a) Molienda del $NiTiO_3$ por 2 horas	43
Figura 19.	b) Nanopartículas de $NiTiO_3$	43

Figura 20. Ruta para elaboración del $NiTiO_3/Cr$	44
Figura 21. Nitrato de Cromo	45
Figura 22. Pesaje de nitrato de Cromo	46
Figura 23. Nanopartículas de $NiTiO_3$ a diferentes concentraciones	47
Figura 24. Portamuestra sin $NiTiO_3$	48
Figura 25. Unión del portamuestra	48
Figura 26. Portamuestra con $NiTiO_3$	48
Figura 27. Caracterización en el difractómetro	48
Figura 28. Caracterización en el espectrómetro UV-vis	49
Figura 29. Medición del ph de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$	50
Figura 30. Generación de hidrógeno mediante fotocatalisis con lámpara de 300 W	51
Figura 31. Medición de la producción de hidrógeno mediante un sensor de hidrógeno	52
Figura 32. Procesamiento de datos en OrigiLab	53
Figura 33. Difractograma de las nanopartículas de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$	55
Figura 34. Influencia del dopante sobre el tamaño del cristalito y banda prohibida	58
Figura 35. Espectro de reflectancia difusa UV-visible de nanopartículas de $NiTiO_3$ puro y $NiTiO_3/Cr$	59
Figura 36. Gráfico para el cálculo de la banda prohibida del $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$ mediante el móddelo de Kubelka-Munk	60
Figura 37. Espectro FTIR del $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$	62
Figura 38. Tasa de producción de hidrógeno verde	63

- Figura 39.** (a) Difractograma de $NiTiO_3/1\%Cr$, (b) Difractograma de $NiTiO_3/3\%Cr$, (c) Difractograma de $NiTiO_3/5\%Cr$ y (d) Difractograma de $NiTiO_3/10\%Cr$ 79
- Figura 40.** (a) Espectro UV-vis de $NiTiO_3/1\%Cr$, (b) Espectro UV-vis de $NiTiO_3/3\%Cr$, (c) Espectro UV-vis de $NiTiO_3/5\%Cr$ y (d) Espectro UV-vis de $NiTiO_3/10\%Cr$ 80
- Figura 41.** (a) FTIR de $NiTiO_3/1\%Cr$, (b) FTIR de $NiTiO_3/3\%Cr$, (c) FTIR de $NiTiO_3/5\%Cr$ y (d) FTIR de $NiTiO_3/10\%Cr$. . . 81
- Figura 42.** (a) Tasa de producción de hidrógeno para el $NiTiO_3/1\%Cr$, (b) Tasa de producción de hidrógeno para el $NiTiO_3/3\%Cr$, (c) Tasa de producción de hidrógeno para el $NiTiO_3/5\%Cr$ y (d) Tasa de producción de hidrógeno para el $NiTiO_3/10\%Cr$ 82
- Figura 43.** (a) Band Gap de $NiTiO_3/1\%Cr$, (b) Band Gap de $NiTiO_3/3\%Cr$, (c) Band Gap de $NiTiO_3/5\%Cr$ y (d) Band Gap de $NiTiO_3/10\%Cr$ 83
- Figura 44.** Gráfico de barras de la tasa de producción del $NiTiO_3/Cr$. . 84

Índice de Tablas

Tabla 1.	Operacionalización de la variable independiente	12
Tabla 2.	Operacionalización de la variable dependiente	13
Tabla 3.	Producción de hidrógeno del <i>NiTiO₃</i> basado en nanocompuestos(Lakhera et al., 2018)	19
Tabla 4.	Tabla de cantidades usadas en la síntesis del <i>NiTiO₃</i> y <i>NiTiO₃/Cr</i>	44
Tabla 5.	pH de las muestras de <i>NiTiO₃</i> y <i>NiTiO₃/Cr</i>	51
Tabla 6.	Parámetros estructurales del <i>NiTiO₃</i> puro y <i>NiTiO₃/Cr</i> . . .	56
Tabla 7.	Características estructurales y cristalográficas, para determinar el tamaño de cristalito de <i>NiTiO₃</i> puro y dopados con Cr . . .	57
Tabla 8.	Band gap de <i>NiTiO₃</i> puro y <i>NiTiO₃/Cr</i>	61
Tabla 9.	Tasa de producción de hidrógeno del <i>NiTiO₃</i> y <i>NiTiO₃/Cr</i>	64

Glosario de Términos

Cr : Cromo

D : Tamaño de cristalito

eV : Electronvoltio

Eg : Banda prohibida (del inglés Energy Gap)

FTIR : Espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (del inglés Fourier Transform Infrared Spectroscopy)

FWHM : Ancho completo a la mitad del máximo (del inglés Full Width at Half Maximum)

K : Constante de Scherrer

$NiTiO_3$: Titanato de Niquel

$NiTiO_3/Cr$: Titanato de Niquel dopado con Cromo

nm : nanometro

UV-vis : Ultravioleta-visible

XRD : Difracción de rayos X (del inglés X-Ray Diffraction)

λ : Longitud de onda

Resumen

Esta investigación se realizó con el objetivo de sintetizar y caracterizar ópticamente las nanopartículas de titanato de níquel dopado con cromo ($NiTiO_3/Cr$) y determinar su eficiencia en la generación de hidrógeno verde, utilizando la técnica sol-gel en la síntesis del $NiTiO_3/Cr$. Para la síntesis se realizó el dopado con cromo a diferentes concentraciones (1 %, 3 %, 5 % y 10 %) mediante un cálculo estequiométrico, logrando obtener nanopartículas de $NiTiO_3/Cr$. La caracterización óptica se realizó mediante 3 técnicas: mediante DRX, se estudió la estructura del material, obteniendo una estructura ilmenita, por otro lado mediante la ecuación de Scherrer se obtuvo un tamaño de cristalito de 32.23 nm para el $NiTiO_3$ puro, a medida que se aumenta la concentración de cromo este disminuye su tamaño hasta 28.58 nm; mediante espectroscopía UV-vis se estudió las propiedades de reflectancia en el espectro visible, obteniendo altos picos cerca a 600 nm con un 75 % de reflectancia, a medida que se aumenta la concentración de cromo este disminuye su pico de intensidad hasta un 30 %, además, se determinó la energía prohibida (E_g), obteniendo 2.16 eV para el $NiTiO_3$ puro, a medida que se aumenta la concentración de cromo este disminuye su ancho de banda hasta 1.6 eV; y mediante espectroscopía FTIR se estudió la transmitancia, presentando el $NiTiO_3$ bandas características de transmitancia alrededor de 487 cm^{-1} .

La hidrógeno verde fue producido a través el proceso de la fotocatalisis con una lampara de 300 W durante 1 hora, donde la tasa producción de hidrógeno verde para el $NiTiO_3$ fue de $952.45228\ \mu\text{molh}^{-1}\text{L}^{-1}$, a medida que se aumenta la concentración de cromo este disminuye su tasa hasta $742.97319\ \mu\text{molh}^{-1}\text{L}^{-1}$.

Palabras clave: Difracción de rayos X, Espectroscopía, Fotocatalisis, Nanopartículas, $NiTiO_3/Cr$

Abstract

This research was carried out with the objective of synthesizing and optically characterizing chromium-doped nickel titanate nanoparticles ($NiTiO_3/Cr$) and determining their efficiency in green hydrogen generation, using the sol-gel technique in the synthesis of $NiTiO_3/Cr$. For the synthesis, chromium doping was performed at different concentrations (1 %, 3 %, 5 %, and 10 %) through stoichiometric calculation, successfully obtaining $NiTiO_3/Cr$ nanoparticles. Optical characterization was conducted using three techniques: by XRD, the material structure was studied, obtaining an ilmenite structure; additionally, using the Scherrer equation, a crystallite size of 32.23 nm was obtained for pure $NiTiO_3$, which decreases to 28.58 nm as the chromium concentration increases; UV-Vis spectroscopy was used to study reflectance properties in the visible spectrum, obtaining high peaks near 600 nm with 75 % reflectance, which decrease to 30 % in intensity peak as the chromium concentration increases; furthermore, the band gap energy (E_g) was determined, obtaining 2.16 eV for pure $NiTiO_3$, which decreases to 1.6 eV as the chromium concentration increases; and by FTIR spectroscopy, the transmittance was studied, showing characteristic transmittance bands around 487 cm^{-1} for $NiTiO_3/Cr$.

Green hydrogen was produced through the photocatalysis process using a 300 W lamp for 1 hour, where the green hydrogen production rate for $NiTiO_3$ was $952.45228\ \mu\text{mol h}^{-1}\text{L}^{-1}$, which decreases to $742.97319\ \mu\text{mol h}^{-1}\text{L}^{-1}$ as the chromium concentration increases.

Keywords: X-Ray Diffraction, Spectroscopy, Photocatalysis, Nanoparticles, $NiTiO_3/Cr$

I. Descripción de la Investigación

1.1. Antecedentes del Problema

Desde hace mucho tiempo que se promueve un futuro con bajas emisiones de carbono. Hasta hace 100 años la producción de energía era en su mayor parte proveniente de energías no renovables. Según John McNeill argumenta que como causa principal de los grandes cambios ambientales que se dieron durante el siglo XX se destaca, en primer lugar, el sistema energético; posteriormente menciona tres razones. En primer lugar, desde 1890 destaca que este sistema depende en su mayoría de los combustibles fósiles, donde su combustión genera impactos a diferentes niveles, locales como globales, como la contaminación y el cambio climático. En segundo lugar, se atribuye a uso de combustibles fósiles que facilitó el surgimiento de nuevas tecnologías como el carbón, petróleo y gas natural que impulsaron la maquinaria, transporte y producción a gran escala, gracias a los combustibles fósiles surgieron nuevas tecnologías, que progresivamente fueron aumentando de manera ostensiva el impacto ambiental de actividades como minería, agricultura y silvicultura. (Bravo et al., 2017). Entre todas las aplicaciones hoy en día destaca la aplicación en energías renovables, tales es el caso de las nanopartículas en la generación de hidrógeno verde. En la actualidad se viene desarrollando trabajos con TiO_2 (Candal, et al. 2001) , $NiTiO_3/Ln$, donde se consigue mejoras en su eficiencia al generar hidrógeno, siendo el titanato de níquel uno de los recientes materiales de estudio.

Además, fuentes alternativas como la energía hidroeléctrica y la nuclear también han generado efectos considerables sobre el medio ambiente. Sin embargo, en las últimas décadas se ha generado un mayor consumo energético debido al aumento de la población, utilizándose combustibles fósiles (carbón y petróleo) como agentes, estos han contribuido al aumento de gases de efecto invernadero en la

atmósfera, como el dióxido de carbono (GEI) en la atmósfera entre ellos el dióxido de carbono (CO_2). Actualmente se busca fuentes de energía que sean sostenibles a través del tiempo, entre las cuales, fuentes de energía renovable son la solar, la hidráulica, la eólica, la biomasa y el biogás, son las que no se agotan y no causan efectos ambientales dañinos a largo plazo (Angulo, 2024).

Por otro lado, existen fuentes de energía renovable que destacan, llamando la atención debido a su potencial energético es el hidrógeno como posible combustible a futuro. Puede utilizarse para diferentes fines, por ejemplo, como portador de energía o medio de almacenamiento. Ofrece alternativas libres de carbono a los combustibles convencionales. Además el hidrógeno es un combustible inflamable y seguro, que produce agua y una cantidad insignificante de óxidos de nitrógeno al reaccionar, en otras palabras prácticamente una nula emisión de contaminantes. Como combustible, el hidrógeno tiene propiedades únicas, entre ellas, una velocidad de combustión rápida y no es tóxico ni tiene capacidad para formar ozono. Por tales motivos se han desarrollado estudios sobre el hidrógeno como fuente de energía, siendo sostenible y muy abundante (Zainal *et al.*, 2024).

Dependiendo del proceso de producción y la fuente de energía, la clasificación del hidrógeno generado está clasificado en hidrógeno verde, azul y gris. Siendo el hidrógeno verde la que presenta menor emisión de gases de efecto invernadero comparado con el gris y azul, por tal razón se le considera como prometedor combustible a futuro (Sarker, *et al.* 2023). Tradicionalmente, el hidrógeno se ha producido principalmente a partir de combustibles fósiles (hidrógeno gris), un proceso que libera CO_2 a la atmósfera, por tanto, a pesar que se genera hidrógeno gris y azul, estos representan un gran problema para el medio ambiente debido a que su producción involucra el uso de carbón, puesto que la producción de hidrógeno, es casi el 99 % de los casos provenientes de fuentes fósiles como el gas natural y carbón, esto

representa una fuente considerable de emisiones de dióxido de carbono (CO_2). Esto se suma al impacto ambiental de otras fuentes energéticas, como la hidroeléctrica y la nuclear. (Cancino Silva, 2021). Con el aumento de la conciencia ambiental y ante el potencial de fuentes de energía sostenibles, el hidrógeno verde, se presenta como una alternativa prometedora, esto ha sido de gran impacto y llamado bastante la atención. Por ejemplo, el potencial del hidrógeno verde para la descarbonización en la UE (Unión Europea) abre nuevas vías de acción indispensables para enfrentar los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), donde se revisa, en primer lugar, el papel que juega la UE en la transición energética global y el estado del arte respecto al hidrógeno verde como vector energético. En segundo lugar, se estudia el estado de desarrollo de la industria del hidrógeno verde en la Unión, así como de las iniciativas comunitarias puestas en marcha dentro de este campo. En tercer lugar, se analizan las oportunidades y desafíos a los que se enfrenta esta apuesta energética. Por lo tanto, la generación de hidrógeno verde surge como respuesta a la necesidad de evolucionar positivamente el sector energético para que sea libre de carbono y reducir los gases que agravan el calentamiento global. (Antoranz, 2021).

El hidrógeno verde es producido al separar el agua en sus componentes usando electricidad que viene de fuentes renovables, como la energía solar o eólica. La última década resalta puesto que cada vez más personas y sectores, en esa medida el hidrógeno verde se posiciona como un vector energético clave en el almacenamiento y aprovechamiento de energía, así como para su uso en industrias que requieren altas temperaturas o en el transporte pesado (Benjumea Cervera, 2021). Por tal motivo, la investigación sobre el hidrógeno verde y materiales que sean óptimos para su generación es una necesidad debido al drástico cambio climático, puesto que representa un gran problema para el cuidado y protección de la vida en la tierra, en particular la emisión de CO_2 (Gross et al., 2003). Por otro lado, se ha

mostrado que el hidrógeno verde puede generar de forma segura la misma energía que los combustibles convencionales, y puede hacerlo sin producir las emisiones de carbono o los residuos radiactivos que dañan el medio ambiente (Wangong y Daniel, 2010).

Sin embargo la producción de hidrógeno verde presenta algunos problemas a tratar. Algunos de los problemas más relevantes: Costos de producción, la producción de hidrógeno verde a partir de electrólisis es actualmente más cara que la producción de hidrógeno a partir de combustibles fósiles. Aunque los costos están disminuyendo, la inversión inicial en tecnologías renovables y electrolizadores sigue siendo alta (Ma et al., 2023). Métodos de almacenamiento, falta de infraestructura adecuada para la producción, almacenamiento y distribución de hidrógeno es un gran obstáculo. Las instalaciones actuales están diseñadas principalmente para hidrógeno gris (producido a partir de combustibles fósiles). Eficiencia energética, donde la generación de hidrógeno a partir de electricidad conlleva pérdidas de energía en el proceso de electrólisis, y la conversión de hidrógeno de nuevo a electricidad también puede ser ineficiente. Esto plantea interrogantes sobre la viabilidad energética en comparación con otras tecnologías de almacenamiento (Oliveira, Beswick, y Yan, 2021). Escalabilidad, a pesar que existen proyectos piloto, la escalabilidad de la producción de hidrógeno verde para satisfacer la demanda global es un desafío, específicamente en términos de acceso a recursos renovables y materias primas (Council, 2020). Impacto ambiental, aunque el hidrógeno verde se caracteriza por ser limpio comparado con el hidrógeno azul y gris, su producción puede tener impactos ambientales relacionados con el uso del agua en el proceso de electrólisis, especialmente en regiones áridas.

Por lo tanto, es necesario llevar a cabo un análisis más exhaustivo e investigar con mayor detalle los procesos de producción de hidrógeno verde para una mejor solución a los problemas que presenta y así pueda cumplir su promesa como una

pieza clave para avanzar hacia una economía con menos carbono.

1.2. Planteamiento del Problema

Para conseguir una mejor eficiencia en la generación de hidrógeno verde se usa semiconductores, materiales dopados, nanomateriales y materiales híbridos. En la actualidad para la generación de hidrógeno verde existen diversos procesos como pirólisis, craqueo térmico, electrólisis, fotocátalisis, entre otros, donde destaca la electrólisis y fotocátalisis por emitir nula emisión de dióxido de carbono (CO_2) comparado con los demás procesos (Sarker *et al.*, 2023). Además de una nula emisión de CO_2 que sean eficientes en la generación de hidrógeno verde, es decir, materiales que posean un gran potencial energético. En el presente trabajo de investigación se centra en la generación de hidrógeno verde mediante fotocátalisis donde se obtendrá nula emisión de CO_2 y se espera una buena cantidad de hidrógeno verde generado.

Para desarrollar la fotocátalisis se usan materiales que posean propiedades físicas y químicas adecuadas para la generación de hidrógeno verde, donde destacan el titanato de níquel ($NiTiO_3$), óxido de titanio (TiO_2), óxido de zinc (ZnO) y sulfuro de cadmio (CdS). Para una mejor eficiencia en la generación de hidrógeno verde se usan materiales dopados y materiales híbridos, estos forman la base de la investigación en fotocátalisis para la producción de hidrógeno, buscando aumentar la eficiencia y la viabilidad económica de esta tecnología (Augustin *et al.*, 2022).

Uno de los materiales que cumple estas características de producir nulas emisiones de CO_2 y con gran potencial energético es el titanato de níquel ($NiTiO_3$). Actualmente se hace investigaciones sobre el $NiTiO_3$ buscando una mejora en su eficiencia para la generación de hidrógeno verde. Justamente el desafío en la actualidad está en estudiar las propiedades físicas y químicas de distintos materiales para conseguir una mejor eficiencia en la generación de hidrógeno verde. Para

conseguir esta mejora en el $NiTiO_3$ se realiza un dopaje con materiales metálicos y no metálicos que puede aumentar el rendimiento del fotocatalizador ajustando cuidadosamente la banda prohibida de los nanomateriales. Además, se debe emplear una cantidad óptima de fotocatalizador para lograr la máxima actividad porque una alta concentración de fotocatalizador puede reducir la eficiencia del fotocatalizador, mientras que una baja concentración puede producir baja eficiencia (Diab *et al.*, 2018).

Se han realizado investigaciones con otros materiales como el óxido de titanio (TiO_2) en la producción de hidrógeno verde, especialmente usando la fotocatálisis, que es un proceso donde la energía del sol ayuda a separar el agua en hidrógeno y oxígeno, y el TiO_2 se utiliza como fotocatalizador. Además se han evaluado las principales características y limitaciones de los fotocatalizadores de TiO_2 . También se han revisado fotocatalizadores basados en TiO_2 modificados con un metal de transición, óxido de metal de transición, metal noble, nitruro de carbono gráfico, grafeno, entre otros, con la idea de mejorar su eficiencia en la generación de hidrógeno verde (Rafique *et al.*, 2023).

En un estudio se ha usado nanotubos heteroestructurales de $NiTiO_3 / TiO_2$, se prepararon mediante un método de reacción 'in situ' y se utilizaron como fotocatalizadores para la generación de hidrógeno a partir de la división del agua. La morfología nanotubular del compuesto y la heteroarquitectura estable, muestran una excelente actividad fotocatalítica y una alta estabilidad para un uso repetido. Según los resultados, hay un contenido óptimo de $NiTiO_3$ de 1,77 mol %, lo que da una alta tasa de evolución H_2 y estable de aproximadamente $680 \mu mol/g^{-1}h^{-1}$, que supera la de los nanotubos de TiO_2 puros y las nanopartículas de TiO_2 de dimensión cero en aproximadamente 15 veces y 55 veces, respectivamente (Huang, Jiang, Li, Xue, y Guo, 2017).

En una investigación sobre el sulfuro de cadmio (CdS) en la generación de hidrógeno verde, especialmente en el contexto de la fotocatalisis y celdas fotoelectroquímicas. El CdS al ser un semiconductor que puede absorber luz solar y generar electrones libres y huecos, representa una gran ventaja para generar hidrógeno verde. Los electrones pueden utilizarse para reducir protones y producir hidrógeno a partir de agua. La eficiencia del CdS en este proceso depende de su estructura, tamaño de partícula y condiciones de reacción. A pesar que el CdS tiene potencial en la generación de hidrógeno, su toxicidad y los impactos ambientales asociados con el cadmio son preocupaciones importantes. Esto ha obligado a investigadores a la búsqueda de alternativas más seguras y sostenibles (Yuan et al., 2018).

En un estudio sobre el desempeño de varias estructuras de nanocables de ZnO para la producción fotocatalítica de hidrógeno a partir de la reacción de división del agua. Se sintetizaron nanocables de ZnO de diferentes diámetros que van desde 57 a 85 nm utilizando el mecanismo de crecimiento VLS (sólido-líquido-vapor). Además, se realizaron experimentos de evolución de hidrógeno fotocatalítico y se descubrió que todos los materiales actúan como catalizadores en la existencia de un reactivo de sacrificio bajo iluminación de banda ancha (Galdaméz et al., 2020).

Por lo tanto, es necesario hacer un análisis más a profundidad e investigar con mayor detalle las propiedades físicas y químicas de materiales que sean adecuados para la producción de hidrógeno verde, obteniendo buena cantidad generada y nula emisión de contaminantes. En el presente trabajo de investigación se estudia el titanato de níquel dopado con cromo ($NiTiO_3/Cr$), donde se busca una mejora en la eficiencia para la generación de hidrógeno verde y con nula emisión de carbono en el proceso de elaboración (Galdaméz et al., 2020).

1.3. Descripción del Problema

El desafío en este estudio es la síntesis y caracterización de un compuesto que presente propiedades ópticas que sean eficiente en la generación de hidrógeno verde y no emita contaminantes en su elaboración. A pesar de que se han realizado estudios previos sobre otros compuestos con características similares ($NiTiO_3$, TiO_2 , ZnO , CdS), existen desafíos en la optimización de eficiencia, cantidad generada, relación costo-producción, y adopción de tecnología (Ma *et al.*, 2023). Muchas de las técnicas más comunes para producir hidrógeno provienen principalmente de procesos petroquímicos. Entre ellos destacan el reformado con vapor aplicado al gas natural y a diferentes fracciones del petróleo, así como la pirólisis catalítica de hidrocarburos con cadenas largas. Otro método importante se basa en la gasificación del carbón, que está estrechamente relacionado con los procesos de Fischer-Tropsch. (CO_2) (Bedoya Olarte y Hernández, 2021).

Investigaciones recientes destacan el potencial de la captura y almacenamiento de carbono (CAC) durante el proceso de producción del hidrógeno gris. Se estima que con tecnologías de CAC, las emisiones de CO_2 pueden reducirse en un 90 %, lo que haría que el hidrógeno gris fuera más aceptable ambientalmente. Los resultados del estudio muestran que usar tecnologías que capturen y almacenen carbono puede afectar significativamente el desarrollo futuro del mercado energético mundial (Matyushok *et al.*, 2024).

Otro proceso mediante el cual se produce hidrógeno es el reformado con vapor que proviene de procesos que generan cantidades significativas de gases de efecto invernadero, en particular cuando se emplea gas natural como materia prima. En términos globales, aproximadamente el 50 % del hidrógeno se obtiene mediante el reformado con vapor de gas natural. A esto se suma un 30 % que proviene del

reformado de subproductos de la industria química y de refinerías de petróleo, un 18 % que se genera a partir de la gasificación del carbón, mientras que solo un 3,9 % se produce mediante electrólisis del agua, y apenas un 0,1 % proviene de otras fuentes alternativas. (Dincer, 2012).

Por tanto, la mayoría de estudios mencionados anteriormente presentan elevados costos en su elaboración y alta producción de hidrógeno verde. El objetivo principal de este estudio es sintetizar y caracterizar un compuesto de nanopartículas de titanato de níquel dopado con cromo ($NiTiO_3/Cr$) que presente eficiencia para la generación de hidrógeno verde, ello contribuirá a la disminución en la emisión de carbono y abordar la necesidad actual de encontrar materiales eficientes para la generación de hidrógeno verde.

1.4. Formulación del Problema

¿Cómo influye la concentración de cromo en la eficiencia de las nanopartículas de titanato de níquel para la generación de hidrógeno verde?

1.5. Problemas Específicos

- ¿Cómo varían las propiedades ópticas de las nanopartículas de titanato de níquel ($NiTiO_3$) y titanato de níquel dopado con cromo $NiTiO_3/Cr$?
- ¿Cuál es la eficiencia en la generación de hidrógeno verde de las nanopartículas de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$?

1.6. Justificación e Importancia de la Investigación

1.6.1. Justificación social

A nivel mundial diversas industrias generan hidrógeno con elevadas emisiones de CO_2 , buscando reducir la emisión de estos. Abordar este problema mediante

técnicas convencionales presenta serias dificultades, ya que suele implicar gastos elevados y el riesgo de utilizar compuestos que podrían intensificar el impacto ambiental y poner en peligro la salud de los seres vivos. Frente a esto, el presente estudio propone una alternativa más eficaz y sustentable, basada en el uso de recursos accesibles para lograr la producción de hidrógeno verde.

De acuerdo con proyecciones publicadas por la Agencia Internacional de la Energía a fines de 2019, se espera que la demanda mundial de energía crezca entre un 25 % y un 30 % para el año 2040. Si este aumento ocurre en un modelo económico que todavía depende en gran medida del carbón y el petróleo, las emisiones de CO_2 también se intensificarán, lo que agravaría aún más los efectos del cambio climático.

1.6.2. *Justificación económica*

El avance logrador mediante la industria del hidrógeno verde fomenta la innovación tecnológica y puede generar nuevos empleos en sectores relacionados con la producción, almacenamiento y distribución de hidrógeno. Este crecimiento en el empleo puede ser significativo en áreas donde se establecen instalaciones de producción de hidrógeno y en la cadena de suministro asociada (Council, 2017).

Según estimaciones recientes de la Agencia Internacional de la Energía, se prevé que para el año 2040 la demanda global de energía aumente entre un 25

En este contexto, el hidrógeno verde se presenta como una alternativa clave para avanzar hacia una economía con menor huella de carbono. Este tipo de hidrógeno se produce a partir de la fotocátalisis del agua utilizando electricidad generada por fuentes renovables como la solar, la eólica o la hidráulica. A diferencia del hidrógeno gris que se obtiene a partir de gas natural y libera grandes volúmenes de CO_2 el hidrógeno verde no genera gases de efecto invernadero durante su producción. Por ello, desempeña un papel fundamental en el cumplimiento de los compromisos

internacionales para reducir las emisiones y frenar el calentamiento global (Bianco y Blanco, 2020).

Por otro lado, este trabajo referido a la generación de hidrógeno verde mediante la síntesis y caracterización del titanato de níquel dopado con cromo ($NiTiO_3/Cr$) tiene como objetivo promover la conciencia sobre la relevancia de impulsar proyectos de energías renovables, los cuales, en un futuro cercano, puede convertirse en pilares fundamentales para la generación de electricidad y en alternativas viables frente a los combustibles fósiles que predominan en la actualidad.

1.7. Objetivos

1.7.1. Objetivo General

Sintetizar y caracterizar ópticamente un compuesto de nanopartículas de titanato de níquel dopado con Cromo ($NiTiO_3/Cr$) y determinar su eficiencia en la generación de hidrógeno verde.

1.7.2. Objetivos Específicos

- Caracterizar ópticamente las nanopartículas de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$ mediante técnicas de difracción de rayos X (XRD), espectroscopia UV-Vis y espectroscopia FTIR.
- Determinar la eficiencia en la generación de hidrógeno verde de las nanopartículas de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$.

1.8. Hipótesis de la Investigación

1.8.1. Hipótesis General

La concentración del cromo influye en las propiedades ópticas y eficiencia de las nanopartículas de titanato de níquel en la generación hidrógeno verde.

1.8.2. Hipótesis Específicas

- Las nanopartículas de NiTiO_3 y NiTiO_3/Cr pueden presentar propiedades ópticas adecuadas para la generación de hidrógeno verde.
- Las nanopartículas de NiTiO_3 y NiTiO_3/Cr presenta eficiencia en la generación de hidrógeno verde.

1.9. Operacionalización de variables

1.9.1. Variable Independiente

- Concentración del compuesto NiTiO_3/Cr

1.9.2. Variable Dependiente

- Propiedades ópticas de las nanopartículas de NiTiO_3/Cr
- Eficiencia de la generación de hidrógeno verde

Tabla 1

Operacionalización de la variable independiente

Variable independiente	Indicador	Escala de medición
Concentración del compuesto NiTiO_3/Cr	Concentración de NiTiO_3/Cr	mg/L
	Proporción NiTiO_3/Cr	%
	Morfología	forma

Tabla 2*Operacionalización de la variable dependiente*

Variable dependiente	Indicadores	Escala de medición
Propiedades ópticas de las nanopartículas de $NiTiO_3/Cr$	Tamaño	nm
	Ancho de banda prohibida	eV
	Transmitancia	UA
	Reflectancia	UA
Eficiencia de la generación de hidrógeno verde	Tasa de producción	$\mu mol g^{-1} h^{-1}$
	Eficiencia	%
	pH	-

1.10. Limitación de investigación

- La síntesis de las nanopartículas de $NiTiO_3/Cr$ representan de alto costo, además, producirlo en pequeñas cantidades suele ser caro, ya que los reactivos utilizados tienen un costo elevado. Pero a medida que la producción aumenta, esos costos se reducen, haciendo que el proceso sea más rentable y sostenible a largo plazo.. Los resultados que se obtendrán son a nivel de laboratorio y el uso de reactivos será financiado por el proyecto de investigación "Análisis morfológico de películas delgadas de $NiTiO_3$ mediante microscopía interferencial para mejorar su eficiencia en la generación de hidrogeno".
- La investigación estará limitada a los equipos que se usarán para la caracterización de las nanopartículas de Titanato de Niquel dopado con cromo($NiTiO_3/Cr$). La elección de técnicas (como espectroscopia UV-VIS, espectroscopia raman y difracción de rayos X) puede influir en la comprensión completa de las propiedades del material. Algunas propiedades pueden ser difíciles de medir.

- Aunque el titanato de níquel se muestra prometedor, su eficiencia en la producción de hidrógeno puede no ser competitiva comparado con otros materiales más establecidos, dicha comparación servirá para identificar ventajas y desventajas.

II. Marco Teórico

2.1. Antecedentes de investigación

Desde hace varios años la nanociencia y la nanotecnología han despertado un gran interés en el desarrollo de la ciencia. El prefijo “**nano**” significa 10^{-9} unidades de metro y por tanto la nanotecnología se basa en el estudio y aplicaciones de materiales con tamaño en el rango de los nanómetros (Guierrez, 2016). Cuando un material es reducido a escala nanométrica, su superficie disponible en relación con su volumen crece considerablemente, lo que permite que una mayor parte del material quede expuesta y activa para interactuar con su entorno. Por ejemplo, al disminuir el tamaño de un material, la proporción entre su superficie y volumen se incrementa, lo que provoca cambios en sus propiedades superficiales. Esto puede aumentar la tensión superficial y la reactividad química. Además, algunos materiales opacos pueden volverse transparentes, como ocurre con el cobre; sustancias que normalmente son inertes pueden actuar como catalizadores, como el platino; otros que son estables pueden transformarse en combustibles, como el aluminio; incluso algunos sólidos pueden pasar a estado líquido a temperatura ambiente, como el oro; y materiales aislantes pueden comenzar a conducir electricidad. (Ramesh, 2009). La nanotecnología presentan ventajas como económica, rápida y segura en la síntesis de nanopartículas estables y de tamaños uniformes. En los últimos tiempos, se han logrado crear diversas nanopartículas que han encontrado aplicaciones en múltiples campos (Palacios et al., 2016).

En la presente investigación se hace énfasis en los nanomateriales para el desarrollo de energías limpias, siendo el titanato de níquel dopado ($NiTiO_3$) con cromo objeto de estudio. Siendo las energías renovables de gran impacto en la actualidad es una necesidad ante el drástico cambio climático y el exceso de

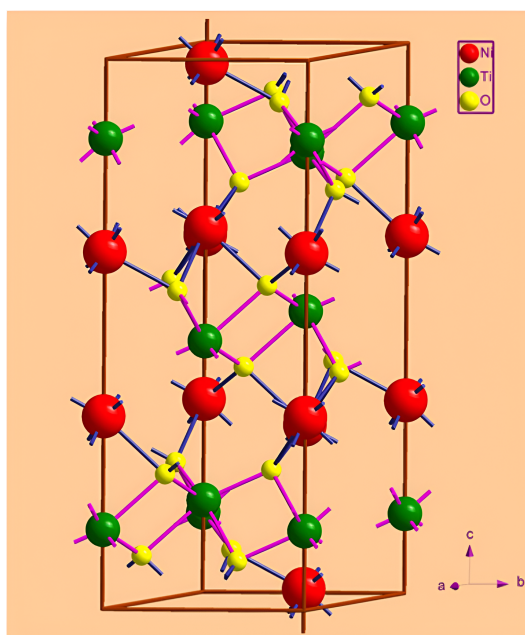
combustibles fósiles. Una alternativa a los combustibles fósiles es el hidrógeno “verde”, siempre que la fuente de energía utilizada para impulsar el proceso proceda enteramente de energías renovables (Amokrane et al., 2018).

2.2. Titanato de Níquel

El titanato de níquel es un compuesto químico cuya fórmula química es $NiTiO_3$. Es un semiconductor de tipo P que se cristaliza en una estructura ilmenita con un ancho de banda de 2,2 eV. Además es un óxido de metal de transición doble donde su estructura de ilmenita presenta a los átomos de Níquel (Ni) y Titanio (Ti) en coordinación octaédrica con capas catiónicas alternas ocupadas exclusivamente por Ni^{+2} o Ti^{+4} , tal como se muestra en la figura 1, donde los átomos en color rojo presentan al Níquel, las verde al Titanio y amarillas al oxígeno (Jiang et al., 2018). El $NiTiO_3$ pertenece a la familia de los titanatos, asimismo de las aplicaciones que se presenta en diversos campos como la fotocatalisis de luz visible, pilas de combustible de óxido sólido o gas, sensores, dispositivos electrónicos con efectos magneto-electricos, y pigmentos de pintura (Hung et al., 2018). Por otro lado, es considerado un prometedor material para la fotocatalisis impulsada por luz visible debido a su estrecha banda prohibida, donde los electrones del material pueden excitarse en la banda conducción bajo irradiación de luz visible (Tong et al., 2016). El titanato de níquel en su forma pura es de color amarillo. Además, la elaboración de películas de $NiTiO_3$ con estructura de ilmenita es un material de perovskita antiferromagnético y paraeléctrico (C. Chen et al., 2020). El $NiTiO_3$, es parte de un proyecto donde se han trabajado con diferentes dopantes, algunos de ellos son $NiTiO_3/Ln$ y $NiTiO_3/Ce$.

Figura 1

Estructura del Titanato de Niquel, (More et al., 2024)



En investigaciones recientes se ha estudiado el $NiTiO_3$ por sus diversas aplicaciones, siendo uno de estas la generación de hidrógeno verde (Hung et al., 2018).

En un estudio, la capacidad de partículas de $NiTiO_3$ dopadas con lantano para degradar colorantes en agua sintética bajo luz ultravioleta. Los resultados mostraron que la solución con $NiTiO_3$ dopado con 0,1 % de lantano logró degradar el azul de metileno en un 98,39 % tras aproximadamente 21 horas. Por otro lado, el anaranjado de metilo alcanzó una degradación del 95,95 % utilizando $NiTiO_3$ con 3 % de lantano en alrededor de 22 horas, mientras que la rodamina B presentó una degradación del 99,26 % en condiciones similares y un tiempo cercano a las 22 horas. (Machicado Flores, 2024).

En un estudio realizado sobre producción de hidrógeno se usó como fotocatalizador el óxido de titanio (TiO_2) dopado con plata (Ag), se obtuvo una tasa de producción

de $23,5 \text{ mol g}^{-1} \text{ h}^{-1}$ con un rendimiento cuántico aparente del 19 % . La actividad eficiente observada se atribuyó a la aparición de vacantes de oxígeno que mejoraron la tasa de separación de carga de TiO_2 , responsable de la mayor tasa de producción de hidrógeno (Gogoi et al., 2020).

En laboratorio de la universidad de Assiut en Egipto, se realizó investigación sobre la producción de hidrógeno, para ello se fabricó un nanocompuesto $\text{Ce}_3\text{O}_4 @ \text{C}/\text{TiO}_2$ (óxido de cerio y carbono) utilizando un método de impregnación húmeda incipiente para la producción fotocatalítica de hidrógeno. El fotocatalizador fabricado a base de TiO_2 exhibió una tasa de producción de hidrógeno de $11\,400 \mu\text{mol g}^{-1} \text{ h}^{-1}$ (El-Bery y Abdelhamid, 2021).

Se fabricaron pigmentos nano amarillados NiTiO_3 y $\text{NiTiO}_3/\text{TiO}_2$ altamente dispersos. Que no contienen elementos metálicos tóxicos, y se reconocen como opciones prometedoras para emplearse en recubrimientos superficiales, especialmente como colorantes que mantienen bajas temperaturas.

(J.-L et all, 2013) .

En un estudio sobre las soluciones de precursores de titanato de níquel y las muestras de polvo se sintetizaron mediante el proceso sol-gel. El tetrahidrato de acetato de níquel fue el precursor del óxido de níquel, mientras que isopropóxido de titanio fue la fuente de titania. Fabricando monolitos de titanato de níquel mediante el procesamiento tradicional de polvo y se caracterizaron por difracción de rayos X, medidas de elipsometría, dilatometría y microdureza. Estos datos ayudaron a la caracterización del sol-gel de materiales derivados. Demostrando que el NiTiO_3 es un óxido estable a temperaturas elevadas y exhibió lubricidad bajo ciertas condiciones (Taylor et al., 2002).

En diversos estudios se muestra la producción de hidrógeno usando diferentes fotocatalizadores basados en titanato de níquel (NiTiO_3) con un diferente cocatalizador

para acelerar el proceso de reacción (Lakhera et al., 2018), ver tabla 3.

Tabla 3

Producción de hidrógeno del NiTiO₃ basado en nanocompuestos (Lakhera et al., 2018)

Fotocatalizador	Cocatalizador	Tasa de producción de H ₂	Referencias
NiTiO ₃	Pt	194 μmol h ⁻¹	Li et al., 2013
NiTiO ₃	Pt	20 μmol h ⁻¹	Liu et al., 2014
NiTiO ₃	g - C ₃ N ₄ /Pt	835 μmol h ⁻¹	Zeng et al., 2016
TiO ₂	NiTiO ₃	680 μmol h ⁻¹ g ⁻¹	Z. Wang et al., 2017
NiTiO ₃	CdS/CoS	476 μmol h ⁻¹	Huang et al., 2017
NiTiO ₃	TiO ₂	87 μmol h ⁻¹ g ⁻¹	Lakhera et al., 2018

Se prepararon polvos de estructura de ilmenita NiTiO₃ mediante un método simple basado en el proceso de Pechini modificado. El Análisis Térmico Diferencial (DTA) muestra picos exotérmicos solo alrededor de 300-350 °C y 600 °C, que corresponden a la descomposición del compuesto orgánico y cristalización de la fase ilmenita. Además, se ha analizado el NiTiO₃ mediante espectros de reflectancia difusa UV-Visible muestran brechas de banda óptica de 3.02 eV (Lin et al., 2006).

Se desarrolló un compuesto con nanopartículas de NiTiO₃ diseñado para reflejar la radiación infrarroja, con el objetivo de mejorar el confort térmico dentro de los contenedores. Para esto, se emplearon técnicas de difracción de rayos X para analizar las estructuras, así como espectroscopía UV-visible para evaluar la reflectancia de las superficies y de la pintura aplicada con diferentes concentraciones de NiTiO₃. Finalmente, se identificó la combinación óptima entre los tipos de muestra (aluminio, acero inoxidable 304 y acero A36), la pintura y las nanopartículas, logrando así mejorar significativamente el confort térmico en los contenedores. (Calisaya Pinto, 2021).

2.3. Hidrógeno

El hidrógeno es un gas inodoro, incoloro, insípido y no venenoso bajo condiciones normales. Es el elemento más simple de la tabla periódica. Un átomo de hidrógeno está compuesto únicamente por un protón y un electrón. En condiciones normales, se encuentra formando moléculas diatómicas. Además, es el elemento más abundante en el universo y el tercero en abundancia en la Tierra (Cancino Silva, 2021). El hidrógeno renovable, conocido como hidrógeno verde, se obtiene mediante diferentes técnicas, puede obtener hidrógeno a partir de la electrólisis del agua usando la energía restante de fuentes renovables. Cuando este hidrógeno se reacciona con el oxígeno del aire, libera energía genera solo vapor de agua como residuo, lo que lo convierte en una opción limpia y eficiente.

(Zuriaga, 2021).

2.3.1. *Propiedades fisicoquímicas del hidrógeno*

El elemento químico Hidrógeno se cataloga como un no metal, pero logra llegar a ser metálico cuando es sometido a presiones muy altas. El hidrógeno es un elemento químico que, aunque normalmente se considera un no metal, puede comportarse como un metal si se encuentra bajo presiones extremadamente altas. En su forma molecular más común, el hidrógeno existe como H_2 , y su masa molecular es de aproximadamente 2,0159 unidades de masa atómica. Una de sus características más notables es su ligereza: es el gas más liviano que se conoce, con una densidad de apenas 0,071 g/L en condiciones normales de temperatura y presión (TPN), lo que lo hace unas 14 veces menos denso que el aire. Aunque no es muy soluble en agua, sí lo es en mayor medida en algunos disolventes orgánicos. A temperatura ambiente, el hidrógeno no reacciona fácilmente, a menos que se le active, por ejemplo, utilizando un catalizador. Sin embargo, cuando se somete a temperaturas

elevadas, su reactividad aumenta considerablemente, lo que lo convierte en una de las sustancias más inflamables conocidas (Suárez, 2021). Además, tiene la cualidad de reaccionar con óxidos y cloruros de diversos metales, como la plata, el cobre, el plomo, el bismuto y el mercurio, generando los metales respectivos mediante un proceso de reducción. También puede transformar en su forma metálica a los cationes presentes en ciertas sales, como los nitratos, nitritos y cianuros de sodio y potasio

Como podemos ver, el hidrógeno, al igual que el oxígeno, tiene la capacidad de formar una gran variedad de compuestos. Entre los más importantes se encuentran el agua, los ácidos, las bases, la mayoría de los compuestos orgánicos y muchos minerales (Salcedo Rodriguez, 2009).

2.3.2. *Clasificación del hidrógeno*

2.3.2.1. Hidrógeno gris. El hidrógeno gris es una forma de hidrógeno, este se produce a partir de combustibles fósiles, principalmente gas natural, a través de un proceso llamado reformado de metano o pirólisis. Este tipo de hidrógeno se obtiene a partir de combustibles fósiles, especialmente del gas natural, mediante un proceso conocido como *reformado de metano* o *pirólisis*. En este proceso el metano reacciona con vapor de agua a altas temperaturas, lo que da como resultado la producción de hidrógeno y dióxido de carbono como subproductos. . Pero por lo expuesto, su principal desventaja debido a la emisión de contaminantes (CO_2) en la reacción, contribuyendo al cambio climático. Por eso, en la transición hacia una economía más sostenible, se está prestando mucha atención al desarrollo de hidrógeno más limpio, como el hidrógeno azul (que captura y almacena las emisiones de CO_2) y el hidrógeno verde (producido a partir de fuentes renovables mediante procesos como electrólisis o fotocatalisis).

2.3.2.2. Hidrógeno azul. El hidrógeno azul es un tipo de hidrógeno que se obtiene a partir de combustibles fósiles, como el gas natural, empleando un proceso similar al que se usa para producir el hidrógeno gris (reformado de metano), pero con una diferencia clave: en la producción de hidrógeno azul, se captura y almacena el dióxido de carbono (CO_2) que se genera como residuo. Algunas características del hidrógeno azul son:

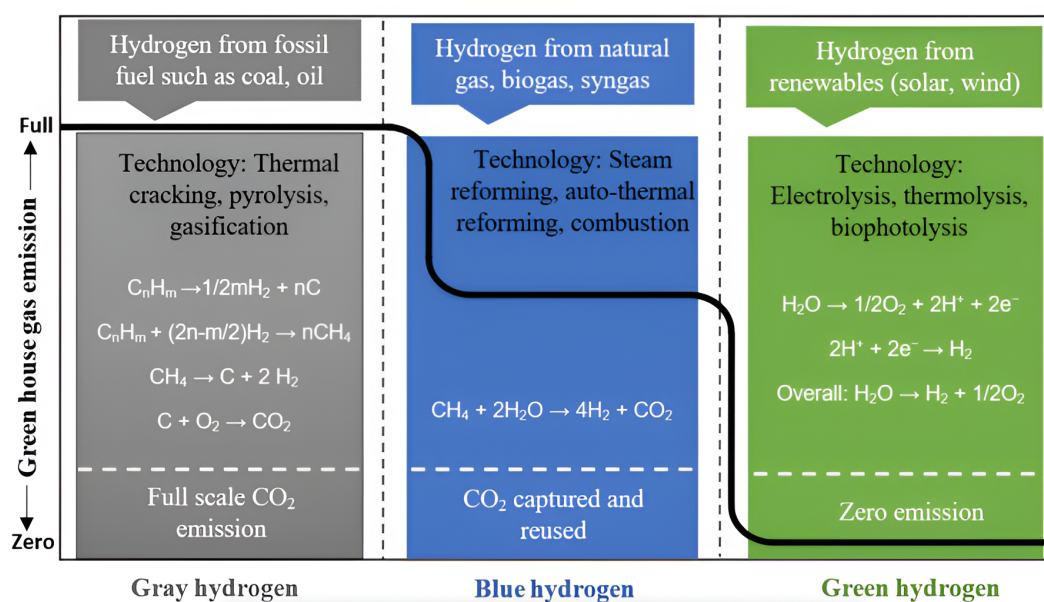
- Reducción de emisiones: Aunque se usan combustibles fósiles para producir hidrógeno, la captura de CO_2 contribuye a disminuir las emisiones de gases de efecto invernadero en comparación con el hidrógeno gris
- Transición energética: Se considera una opción intermedia en la transición hacia un futuro con energías limpias, ya que permite aprovechar la infraestructura existente de Igas natural mientras se desarrolla una economía del hidrógeno más limpia.
- El hidrógeno azul es visto como una solución potencial para ayudar a reducir las emisiones mientras se trabaja en el desarrollo y la expansión de fuentes de hidrógeno más sostenibles, como el hidrógeno verde.

2.3.2.3. Hidrógeno verde. Conocido también como hidrógeno renovable, el hidrógeno verde, es un tipo de hidrógeno que se obtiene mediante diferentes técnicas, siendo una de estas por electrólisis del agua a partir de excedentes de energía renovable. Dependiendo del proceso de producción y la fuente de energía, el hidrógeno obtenido se clasifica en gris, azul y verde, como se representa en la figura 2, por otro lado el reformado con vapor de metano se producen grandes cantidades de CO_2 , pero estos vapores de CO_2 se recogen en contenedores y se almacenan en lugares seguros. El hidrógeno producido a partir de gas natural, biogás y gas de síntesis se clasifica como hidrógeno azul, donde los gases de CO_2 formados no se pueden almacenar y se enviarán a la atmósfera. A diferencia del hidrógeno

gris, el hidrógeno azul, que se produce a partir de gas natural, puede reducir significativamente las emisiones de CO_2 al capturar y reutilizar el carbono. Además, tanto los procesos de producción de hidrógeno gris como azul generan CO_2 como subproducto, pero en el caso de las tecnologías que producen hidrógeno verde, se observan cero emisiones de carbono. Principalmente, se utilizan tecnologías solares y eólicas para producir hidrógeno verde, mayormente se dan en países europeos.

Figura 2

Categoría de hidrógeno, sus materias primas y tecnologías, (Sarker et al., 2023)



2.4. Vector energético

Se conoce como vector energético a aquellas sustancias o sistemas capaces de almacenar energía para liberarla más adelante. Esta liberación se lleva a cabo en un momento y lugar específicos, de manera controlada y eficiente. En las últimas décadas se ha investigado a bastante profundidad en cuanto a los materiales para el ahorro de energía, su importancia aumento a medida que la demanda energética

mundial sigue creciendo. Según el informe 'World Energy Outlook' de la Agencia Internacional de Energía, se estima que para 2030 la demanda global podría subir un 55 %, y posiblemente duplicarse para 2050. La necesidad del suministro de energía son inevitables (Ares, 2019). También existe otros dilemas, como el cambio climático, la crisis energética y los beneficios económicos que se enfocan en la gran importancia del ahorro de energía. Por otro lado, William Robert Grove (1811–1896), un científico galés, fue el primero en reconocer el potencial energético del hidrógeno. Además, inventó una pila eléctrica que hizo posible el funcionamiento del telégrafo británico. Entre 1839 y 1842, Grove desarrolló la idea de que el hidrógeno y el oxígeno podían generar electricidad y agua, un concepto relacionado con los hallazgos de Friedrich Schönbein (1799–1868), quien descubrió el ozono. La pila de Grove funcionaba haciendo pasar una corriente eléctrica a través del agua, separándola en hidrógeno y oxígeno, un proceso conocido como electrólisis del agua, que fue descubierto en 1800 por Nicholson y Carlisle (1768–1842) (Ayqui Chuctaya, 2023).

2.5. Generación de hidrógeno

2.5.1. Sensor de Hidrógeno

Se utilizan para medir la concentración o tasa de producción de hidrógeno en la salida del electrolizador. Permitiendo conocer la cantidad de hidrógeno que se ha generado en un determinado período de tiempo, lo cual es necesario para determinar la eficiencia de producción de hidrógeno. La tasa de producción se mide en $\text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$, para ello el material a evaluar su eficiencia se conocer como fotocatalizador y un cocatalizador para acelerar el proceso de generación, en la tabla 3 se muestran la tasa de producción de hidrógeno verde usando diferentes fotocatalizadores y cocatalizadores. Los sensores de hidrógeno pueden detectar el hidrógeno en el gas producido por el proceso de electrólisis, fotocátalisis o en el

punto de salida de un sistema de almacenamiento.

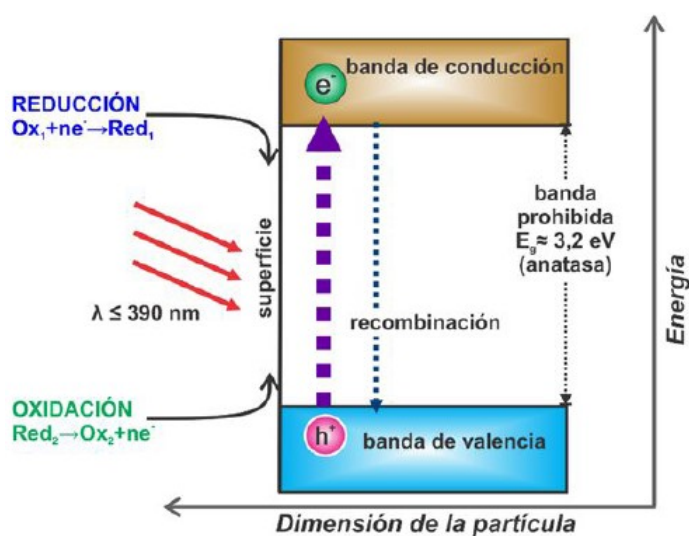
2.5.2. Fotocatálisis

La fotocatálisis forma parte del mecanismo natural que la naturaleza utiliza para limpiarse y eliminar contaminantes. Podría decirse que es un proceso análogo a la fotosíntesis de superficies planas, aunque cabe resaltar que intervienen diversas variables en el proceso. Al igual que la fotosíntesis utiliza la luz del sol para crear materia orgánica mientras elimina ciertos elementos, la fotocatálisis aprovecha la energía solar para eliminar contaminantes comunes del aire, como los óxidos de nitrógeno, óxidos de azufre y compuestos orgánicos volátiles, mediante un proceso de oxidación.

La actividad fotocatalítica es la propiedad de un material sólido inducida por la irradiación de fotones con energía igual o superior a la energía de la banda prohibida (band gap) del material en su superficie, lo que provoca que los e^- de la banda de valencia (BV) se exciten hacia la banda de conducción (BC) y dejen huecos en la primera, generando pares $e^- - h^+$ llamados excitones, que pueden aprovecharse para llevar a cabo reacciones redox, tal como se muestra en la figura 3. Un estudio muestra que los fotocatalizadores como el TiO_2 , en combinación con distintos materiales como grafeno o cobre, pueden reducir el dióxido de carbono a productos útiles, ayudando a mitigar los efectos del cambio climático (Habisreutinger, Schmidt-Mende, y Stolarczyk, 2013).

Figura 3

Mecanismo fotocatalítico de un semiconductor, (Nevárez-Martínez, 2017)



2.6. Técnica Sol-gel

El método sol-gel es un método relativamente nuevo para producir polvos finos, películas delgadas o grumos de óxidos a bajas temperaturas, vidrios y cerámicas. Además, dado que es posible fabricar a baja temperatura usando una reacción química, es posible formar un compuesto de una sustancia orgánica y una sustancia inorgánica (Liza et al., 2018). En términos generales, se inicia preparando la solución con los precursores, formando el sol, posteriormente pasan por un proceso de reacción química hasta formar el gel deseado. Finalmente pasa por un proceso de secado para obtener el polvo fino, figura 4.

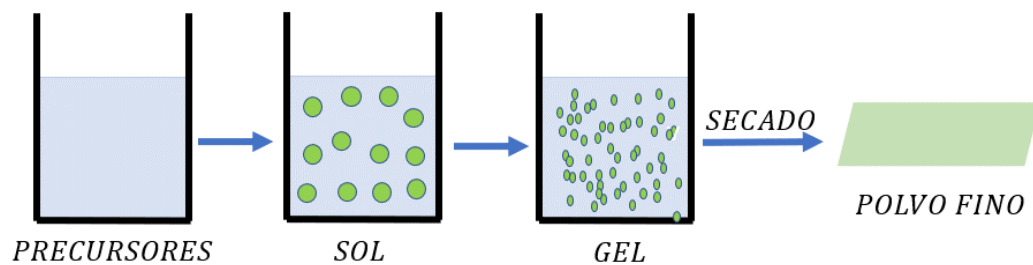
Ventajas

- Control de la microestructura: Permite un control preciso de la composición y estructura a nivel nanométrico.
- Bajo costo y simplicidad: Puede llevarse a cabo a temperaturas relativamente bajas (20-25°C preparación del sol) en comparación con otros métodos.

La temperatura utilizada en cada etapa depende del tipo de material que se esté sintetizando y de las propiedades finales deseadas. Una técnica adicional para sintetizar nanopartículas es la serigrafía o también llamado screen-printing en la comunidad científica (C. Chen *et al.*, 2023).

Figura 4

Técnica Sol-Gel



2.7. Teoría de bandas

La teoría de bandas describe el estado cuántico de un electrón dentro de un sólido metálico. Cada molécula comprende varios niveles discretos de energía. En síntesis, la forma en que se comportan los electrones dentro de una molécula se explica bien mediante la teoría de bandas. Dicha teoría se desarrolló a partir del conocimiento adquirido durante la revolución cuántica. En 1928, Felix Bloch aplicó la teoría cuántica a los sólidos, tratando con diferentes bandas, siendo las principales, la banda valencia, banda de conducción y banda prohibida. Se dan principalmente en metales y semiconductores, bandas de valencia y de conducción que se encuentran muy cerca entre si, estas bandas pueden llegar a superponerse. Por lo general se da en semiconductores.

2.7.1. *Banda de valencia*

Son los electrones de valencia de los átomos. Por lo general, los electrones con más energía toman niveles situados en esta banda.

2.7.2. *Banda de conducción*

Esta banda la constituyen los electrones libres, es decir decir, aquellos que en función a su grado de excitación se han separado de sus átomos y pueden moverse a través del sólido. Estos electrones son los causantes de originar el flujo eléctrico bajo la influencia de una energía electromotriz.

Otra propiedad importante en la configuración electrónica de los átomos, es la energía de banda prohibida (E_g). Ésta se refiere al ancho entre la máxima energía en la banda de valencia y el mínimo de energía en la banda conducción.

2.7.3. *Banda prohibida*

El término banda prohibida (en inglés band gap) se refiere a la diferencia de energía entre el punto más alto de la banda de valencia y el más bajo de la banda de conducción permite que los electrones puedan moverse o 'saltar' desde la banda de valencia hacia la de conducción, figura 5 . Para que un electrón logre moverse desde la banda de valencia hasta la banda de conducción, debe absorber una energía mínima que haga posible ese salto (Abdullahi *et al.*, 2016). Por otro lado, la brecha entre estas bandas, conocida como banda prohibida, puede ser de tipo directo o indirecto, dependiendo del material:

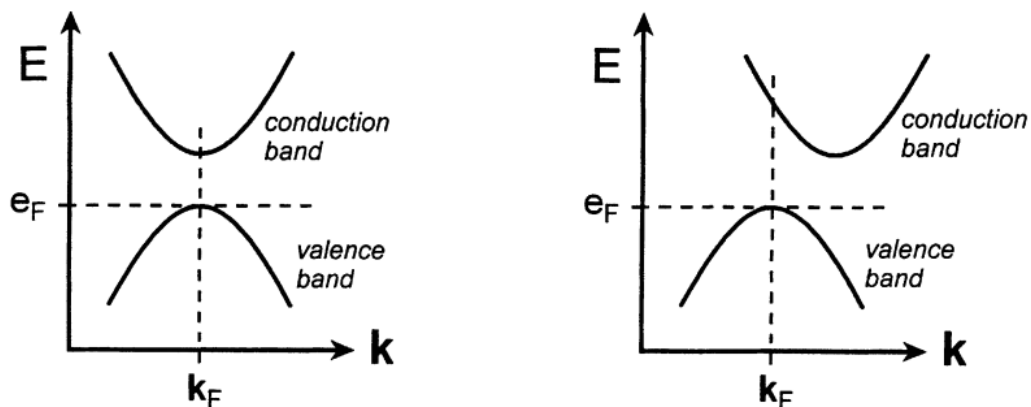
- **banda prohibida (banda directa)** se da cuando la parte más baja de la banda de conducción se alinea de manera vertical con la parte más alta de la banda de valencia dentro del mismo vector de onda (k-vector) en el espacio cristalino
- **banda prohibida (banda indirecta)** se da cuando el nivel más bajo de la

banda de conducción no coincide de forma directa con el nivel más alto de la banda de valencia.

Además, una banda prohibida (E_g) amplia es una de las nuevas propiedades de los materiales semiconductores diseñados para funcionar eficientemente en dispositivos optoelectrónicos."

Figura 5

Gráfico sobre la energía prohibida directa e indirecta (Abedin, 2015)



2.8. Técnicas de caracterización

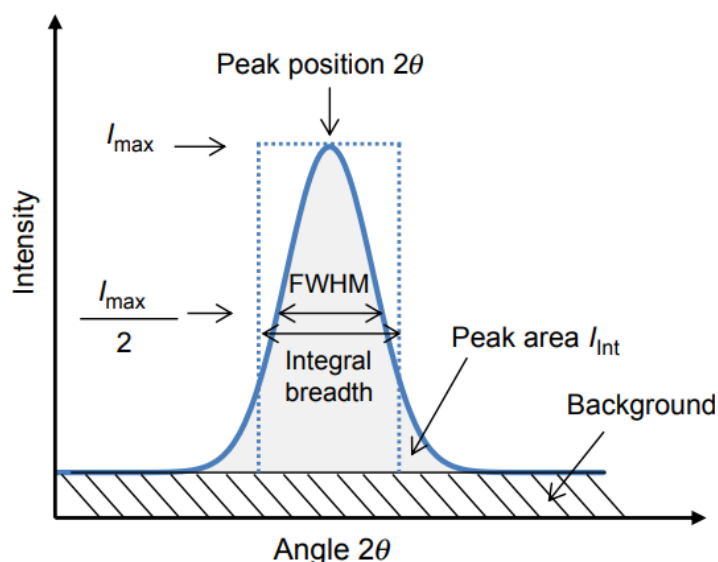
2.8.1. Difracción de rayos X (XRD)

Los métodos de difracción de rayos X (XRD) se basan en la capacidad de los cristales para difractar rayos X de una manera característica, lo que permite un estudio preciso de la estructura de las fases cristalinas. Además, el equipo mediante el cual se realiza esta técnica es el **difractómetro de rayos (XRD)** y los gráficos que lo describen reciben el nombre de **difractogramas**. Por lo general, los resultados obtenidos mediante difracción se expresan como una gráfica de intensidad frente al ángulo 2θ . La información correspondiente se puede observar en la figura 6 6.

XRD recopila el espaciado de la red al disparar un rayo X en un sólido cristalino a una longitud de onda conocida, λ , y un ángulo conocido, θ , y luego recopila la intensidad de los rayos X refractados recolectados. Después de la sustracción del línea base, se puede definir la intensidad máxima de pico I_{max} . El ancho de pico se puede caracterizar generalmente por el ancho completo a la mitad del máximo (FWHM) correspondiente a la mitad del ancho de pico de la intensidad máxima.

Figura 6

Difractograma y parámetros de pico de difracción (Epp, 2016)



Cabe destacar que los patrones de difracción obtenidos reflejan la combinación de diversas propiedades micro y macroestructurales presentes en una muestra. A partir de la posición de los picos, es posible analizar aspectos como los parámetros de red, el grupo espacial, la composición química e incluso las tensiones internas. Por otro lado, la intensidad de esos picos ofrece información útil sobre la estructura cristalina, como la ubicación de los átomos, el factor térmico o el nivel de ocupación y los análisis de fase cuantitativos. Por otro lado, la forma del pico proporciona información sobre las contribuciones de ensanchamiento de la muestra (microtensiones

y tamaño del cristal) (Dinnebier y Billinge, 2015).

Además, tradicionalmente se ha utilizado para medir la tensión residual de materiales, esto se puede determinar a través de la desviación de los picos de difracción. Sin embargo, esta medición de tensión residual requiere varios conocimientos técnicos correspondientes a la forma de la pieza de prueba y al lugar de medición. XRD puede ayudar a caracterizar las propiedades críticas del material para obtener información sobre cómo un material podría interactuar con el tejido biológico tras la implantación (Sampath Kumar, 2013).

Para el presente estudio la estructura de las nanopartículas de $NiTiO_3$ será caracterizada mediante difracción de rayos X, tales como:

- Planos cristalográficos.
- Tamaño de cristalito

2.8.1.1. Principio de rayos X en materiales cristalinos. Los rayos X son ondas electromagnéticas de inmensa energía con pequeña longitud de onda de 10^{-3} y 10nm. El primero en descubrirlo fue Wilhelm Conrad Roentgen en 1895, causando una importante innovación en todas las disciplinas científicas, permitiendo el desarrollo de posibles aplicaciones en medicina y dispositivos electrónicos. La generación de rayos X se logra mediante el uso de tubos sellados y rotando ánodos o fuentes de radiación sincrotrón. Ambos producen rayos X por el mismo principio. Al calentar un filamento de tungsteno en un entorno al vacío, se liberan electrones que son acelerados mediante un campo eléctrico de alto voltaje y luego dirigidos hacia un material blanco. Al interactuar con este objetivo, se producen rayos X a través de dos fenómenos distintos. Uno de ellos es la desaceleración brusca de los electrones al acercarse al núcleo atómico, lo que genera fotones de rayos X con una amplia gama de longitudes de onda, proceso conocido como radiación de frenado o Bremsstrahlung

La segunda es la ionización de los átomos impactados mediante la expulsión de electrones de las capas internas. Para conseguir un estado basal o más estable, los electrones de las capas externas “saltan” a estos huecos. Cuando un electrón proveniente del exterior expulsa a uno de la capa interna de un átomo, la diferencia de energía entre ambos niveles se libera en forma de fotones. La energía de estos fotones es específica y está determinada tanto por el material como por los niveles electrónicos involucrados en la transición.

Cuando los rayos X inciden sobre un material, pueden ocurrir diversas interacciones que generan fenómenos de absorción y dispersión, aunque no todos serán abordados en este contexto. Uno de estos procesos es la dispersión elástica —también conocida como dispersión de Rayleigh—, en la cual los fotones interactúan con los electrones que rodean los núcleos atómicos sin que se altere su energía ni su fase respecto a la onda original. Como resultado, los fotones se dispersan en múltiples direcciones desde todos los átomos del volumen irradiado. Sin embargo, en materiales con estructura cristalina, la disposición periódica de los átomos provoca que esta dispersión genere patrones de interferencia, constructiva o destructiva, que dan origen a fenómenos de difracción. Estos patrones pueden analizarse para obtener información detallada sobre la estructura interna del cristal.

2.8.2. *Espectroscopía UV-vis*

La radiación ultravioleta (UV) y la radiación visible son una pequeña parte del espectro electromagnético, que incluye otras formas de radiación como la radio, la infrarroja (IR), la cósmica y los rayos X. El espectrofotómetro ultravioleta-visible (UV-Vis) se utiliza para cuantificar y cualificar muestras mediante luz ultravioleta y visible (principalmente de 200 a 900 nm). Además, una de las principales ventajas de los espectrofotómetros UV-Vis es que ya no se necesitan servicios, mantenimiento

ni recalibraciones regulares para su funcionamiento (Förster, 2004).

Además, es una de las técnicas más usadas debido a que es muy versátil y capaz de detectar casi cualquier molécula. El equipo que se usa para dicha técnica es un espectrómetro UV-vis. La muestra colocada en el equipo pasa por luz UV-vis y se mide la transmitancia (T) de la luz por una muestra. A partir de la transmitancia (T) se puede calcular la absorbancia como $A = -\log(T)$. Un espectro de absorbancia se obtiene que muestra la absorbancia de un compuesto en diferentes longitudes de onda. La cantidad de la absorbancia a cualquier longitud de onda es debido a la estructura química de la molécula. Mediante la transmitancia y el uso de la ecuación de Kubelka-Munk se puede determinar la energía de la banda prohibida del material, ecuación 2.9.1.

En esta investigación se utilizará la técnica de espectroscopía UV-Visible en modo de reflectancia difusa, la cual resulta útil para analizar diversas propiedades ópticas, entre ellas:

- Curvas de absorción de los materiales.
- Bandgap del material.

2.8.3. *Espectroscopía infrarroja por transformada de fourier(FT-IR)*

La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) es una herramienta ampliamente utilizada tanto en entornos industriales como académicos para estudiar la estructura molecular y la composición de mezclas. Esta técnica se basa en el uso de radiación infrarroja del rango medio, modulada de forma específica para interactuar con la muestra. La absorción de esta radiación ocurre en frecuencias particulares que corresponden a las energías vibracionales de los enlaces entre átomos dentro de una molécula. Cuando la energía del enlace vibracional coincide con la de la radiación infrarroja, se produce una absorción. Como cada tipo

de enlace vibra con una energía única, diferentes longitudes de onda del espectro IR son absorbidas, generando un patrón específico. La frecuencia y la intensidad de estas bandas de absorción conforman un espectro único que permite identificar de forma característica a la molécula analizada (Khalil *et al.*, 2011).

2.9. Ecuación de Scherrer

Esta técnica busca identificar la estructura cristalina que presenta un material, así como el tamaño de sus cristales y las características geométricas de su celda, incluyendo ángulos y bordes (Patterson, 1939).

$$D = \frac{K\lambda}{\beta \cos(2\theta)} \quad (1)$$

D: Tamaño promedio del cristalito(nm)

K: Constante de Scherrer

λ longitud de onda de rayos X(nm)

β : ancho total en el pasillo máximo(FWHM)(rad)

θ : Ángulo de Bragg(rad)

Esta técnica se utiliza principalmente en polvos y cristales finos; en estas condiciones, la muestra permanece fija frente al haz de luz. Si la muestra ya está en polvo, se puede analizar directamente. Sin embargo, si se trata de un material policristalino, será necesario triturarlo previamente. En el caso de que el material sea frágil, el proceso de molienda será relativamente sencillo. Si el material fuese frágil, no será difícil molerla, para mayor detalle de la ecuación 1 revisar (Patterson, 1939).

2.9.1. Ecuación de Kubelka-Munk (K-M)

El concepto inicial de emplear los espectros de difracción difusa (DR) obtenidos de nanoestructuras semiconductoras para determinar la banda prohibida

(Eg) fue planteado por la teoría de Kubelka-Munk en 1931. Básicamente, esta teoría explica cómo se comporta la luz al atravesar una muestra que dispersa la luz. La ecuación de Kubelka-Munk es un método sencillo para calcular la banda prohibida de un material. La banda prohibida se calcula trazando la gráfica del cuadrado entre el producto del coeficiente de absorción y la energía $(\alpha E)^2$ versus la energía E, $((\alpha E)^2 vs E)$. La banda prohibida se puede obtener extendiendo la línea recta desde el segmento recto del gráfico que toca el eje E. La extrapolación de esta recta al eje E (eje de abscisas) da los valores de la banda prohibida (Abdullahi *et al.*, 2016).

La ecuación de Kubelka-munk viene dada por la siguiente expresión:

$$\frac{K}{S} = \frac{(1 - R_{\infty})^2}{2R_{\infty}} \equiv F(R_{\infty}) \quad (2)$$

$F(R_{\infty})$: función de Kubelka-Munk

R_{∞} : Radio reflexión difusa

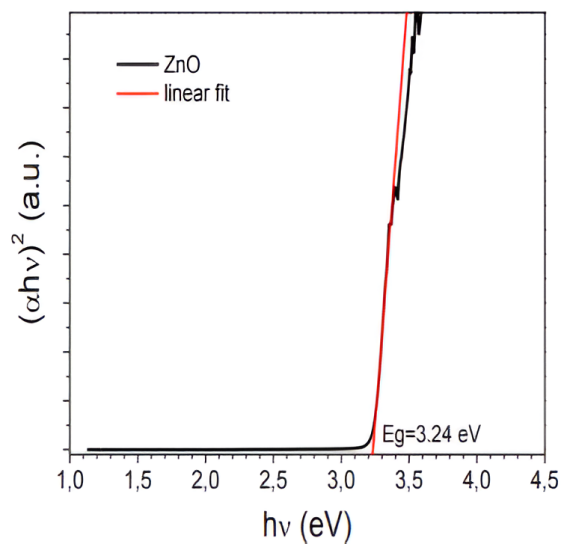
S: Coeficiente de dispersión

K: Coeficiente de absorción

Para mayor detalle sobre la ecuación , revisar (Abdullahi *et al.*, 2016), además, en dicho artículo se estima la energía de banda prohibida óptica de las nanobarras del óxido de zinc (ZnO) utilizando la ecuación de K-M, obteniendo 3.24eV, figura 7.

Figura 7

Calculo del band gap del óxido de zinc mediante la ecuación de Kubelka-Munk (Abdullahi et al., 2016)



Por otro lado, además de Kubelka-Munk existen otras técnicas para calcular el band gap de un material, como método de Tauc y espectroscopía de fotoluminiscencia (Sánchez, 2015), los cuales no se abarcan en este trabajo.

III. Metodología

3.1. Lista de reactivos, materiales y/o equipos

3.1.1. *Lista de reactivos*

- Nitrato de níquel (II) hexahidratado (1.06721.1000-1kg, EMSURE ACS, Merck KGaA, 64271Darmstadt)
- Nitrato de cromo (III) nanohidratado (239259-100G, SIGMA-ALDRICH)
- Ácido cítrico (8.18707.1000 – 1kg, Merck KGaA, 64271Darmstadt)
- Isopropóxido de Titanatio (205273-2.5L, LOT SHBL3886, 97 % ALDRICH)
- 2-propanol (1.09634.25000, 2,5L - EMSURE ACS Reag Ph Eur, Merck KGaA, 64271Darmstadt)
- Agua destilada

3.1.2. *Lista de materiales*

- 2 vasos de precipitado de 500ml, 250ml y 50ml
- Probetas (250 ml)
- Pipetas digitales (5ml)
- 6 placas Petri
- 1 microcuchara
- 1 mortero de ágata
- 5 eppendorf
- 5 Tubos centrífuga

3.1.3. *Lista de equipos*

- Difractómetro de Rayos X (marca PANalytical, modelo Aeris Research)
- Espectrómetro Ultravioleta-Visible con reflectancia difusa (DRS) (marca

Thermoscientific, modelo EVOLUTION 220)

- Espectrómetro FTIR
- Estufa Universal de Secado (Marca Binder)
- Horno Mufla (marca Protherm)
- Agitadores Manéticos (marca VELP y Kyntel)
- Balanza analítica (marca Sartorius)
- Sensor de hidrógeno

3.1.4. Lista de software

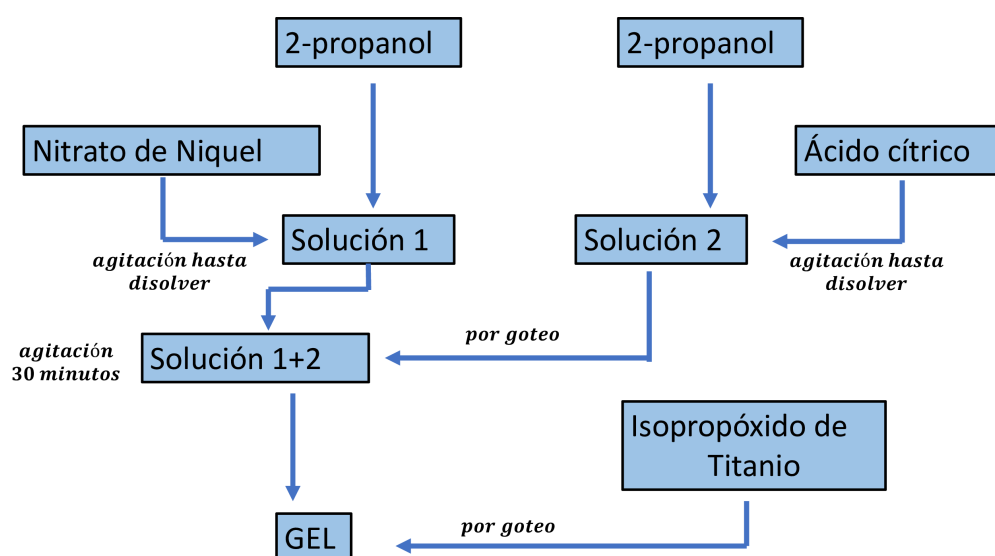
- OriginPro 2024b.
- Software HighScore Plus

3.2. Proceso de desarrollo de investigación

3.2.1. Síntesis de nanopartículas

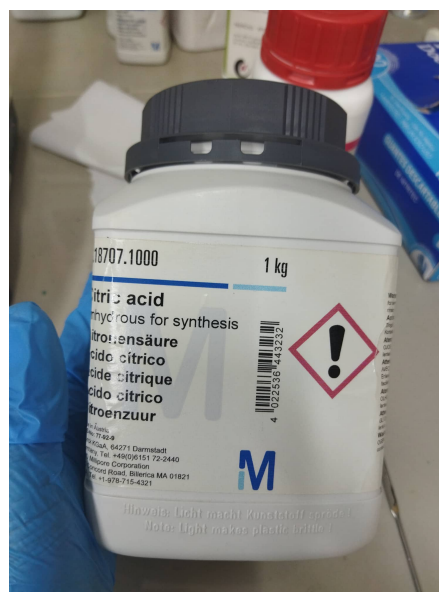
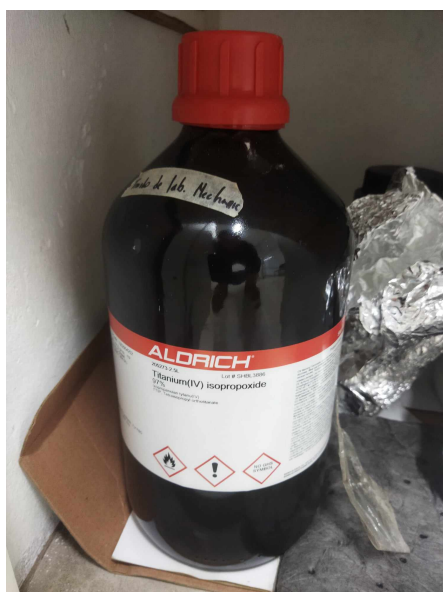
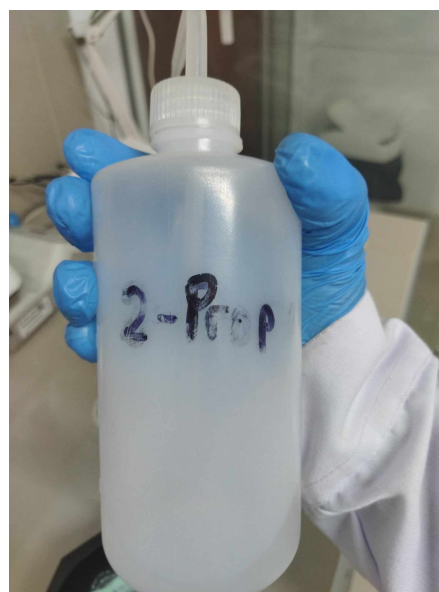
Figura 8

Ruta para elaboración del $NiTiO_3$



3.2.1.1. Titanato de níquel ($NiTiO_3$).

1. Para la elaboración de $NiTiO_3$ se realizó la técnica Sol-Gel, para ello se usaron como precursores: nitrato de níquel, ácido cítrico, 2-propanol e isopropóxido de titanio, como se muestra en las imágenes 9, 10, 11 y 12. La ruta usada se muestra en la figura 8. Por otro lado, para medir las respectivas masas de los precursores se usó una balanza analítica.

Figura 9*a) Nitrato de níquel***Figura 10***b) Ácido cítrico***Figura 11***c) Isopropóxido de titanio***Figura 12***d) 2-propanol*

2. El pesaje de los precursores se realizó mediante una balanza analítica siguiendo

un cálculo estequiométrico, además se usó una microcuchara para obtener las cantidades deseadas. Para el titanato de níquel puro se midió 3,635125 g de nitrato de níquel y 1,875 g de ácido cítrico. Cabe mencionar que la concentración del cromo es nula, puesto que se trata del $NiTiO_3$ puro. Las cantidades se puede visualizar en la tabla 4.

Figura 13

a) Pesaje del ácido cítrico y b) Pesaje del nitrato de níquel



3. Para la obtención del sol se preparó 2 soluciones en vasos precipitados de 500ml: para la solución 1 se utilizó nitrato de níquel (3,635124 g) con 2-propanol (65,1 ml), obteniendo la solución 1, ver figura 14; para la solución 2 se utilizó ácido cítrico (1,875 g) con 2-propanol (12ml), ver figura 15. Tanto la solución 1 como solución 2, cada solución se llevaron a un agitador magnético durante media hora para su posterior combinación.

Figura 14*a) Solución 1***Figura 15***b) Solución 2*

4. La solución resultante (Solución 1+2) se dejó agitar durante media hora para luego combinarlo con isopropóxido de titanatio (3,7007 ml) por goteo 3 veces, para extraer dicha cantidad se usó una micropipeta. Una vez agregado el isopropóxido se forma el **gel**, ver figura 16.

Figura 16*Obtención del gel*

5. Luego la muestra se colocó en placas de petri para llevarlas a una estufa de secado durante 24 horas y posterior calcinación a 700°C durante 2 horas para eliminar cualquier presencia de humedad, cabe resaltar que el secado y calcinación fueron de manera simultánea.

Figura 17

Calcinación de 700°C



6. Finalmente se pasa por un proceso de molienda en un mortero de agata durante aproximadamente 2 horas, obteniendo un polvo fino, figura 18. Donde el polvo fino fue depositado en un tubo de centrifuga, figura 19

Figura 18

a) Molienda del NiTiO_3 por 2 horas



Figura 19

b) Nanopartículas de NiTiO_3

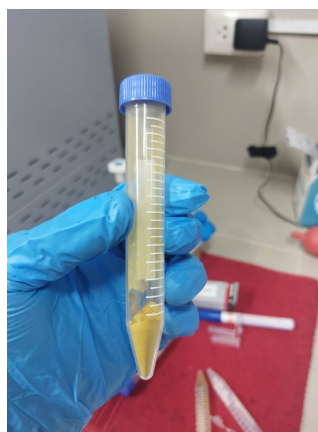


Figura 20

Ruta para elaboración del $NiTiO_3/Cr$

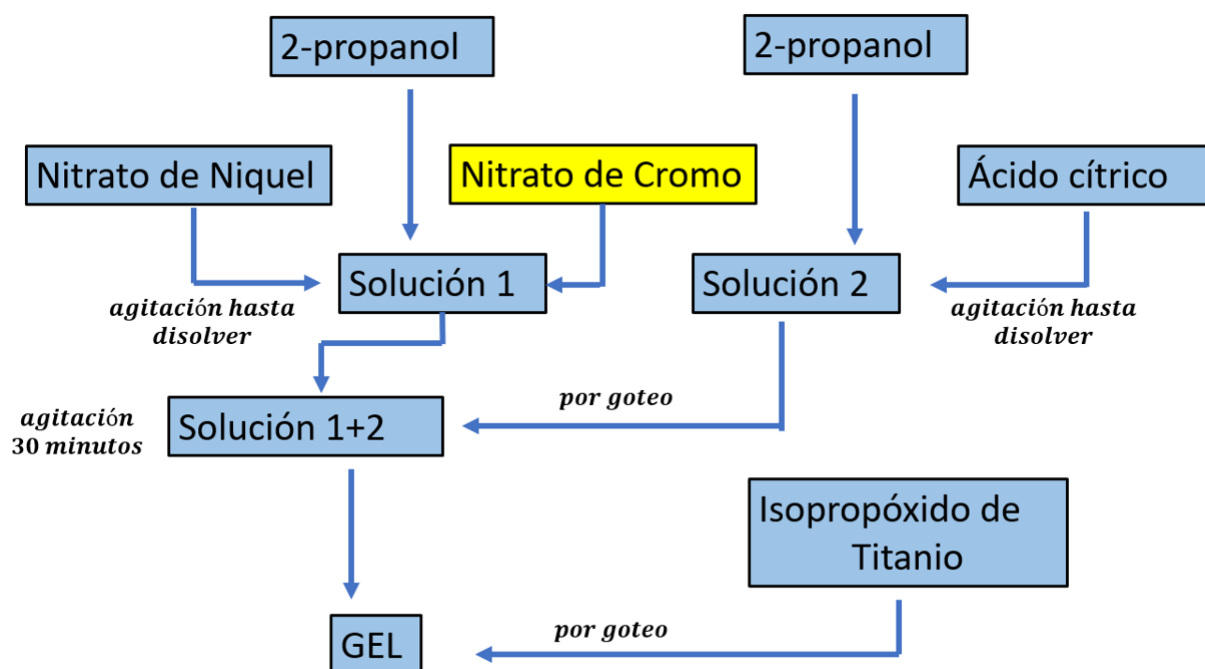
**Tabla 4**

Tabla de cantidades usadas en la síntesis del $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$

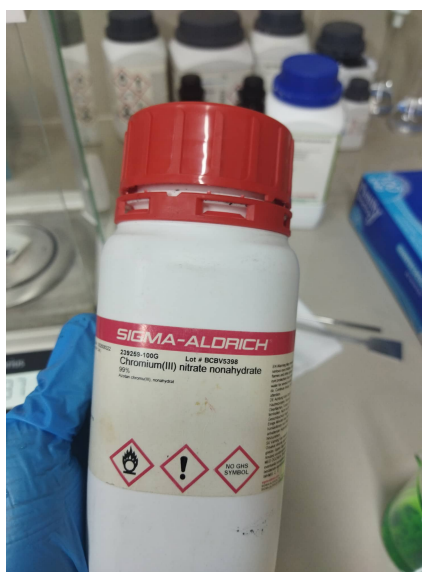
Isopropóxido de Titanio (ml)	$NiTiO_3/Cr$				
	Nitrato de Niquel		Nitrato de Cromo		
	Molaridad(M)	Masa(g)	Dopante(%)	Molaridad(M)	Masa(g)
3,70078125	0,5	10,905375	0	0	0
3,70078125	0,495	10,79632125	1	0,005	0,15005625
3,70078125	0,485	10,57821375	3	0,015	0,45016875
3,70078125	0,475	10,36010625	5	0,025	0,75028125
3,70078125	0,45	9,8148375	10	0,05	1,5005625

3.2.1.2. Titanato de niquel dopado con cromo ($NiTiO_3/Cr$).

1. Para el titanato de níquel dopado con cromo se usó nitrato de cromo (figura 21) a diferentes concentraciones (1 %, 3 %, 5 % y 10 %). Las cantidades se muestran en la tabla 4.

Figura 21

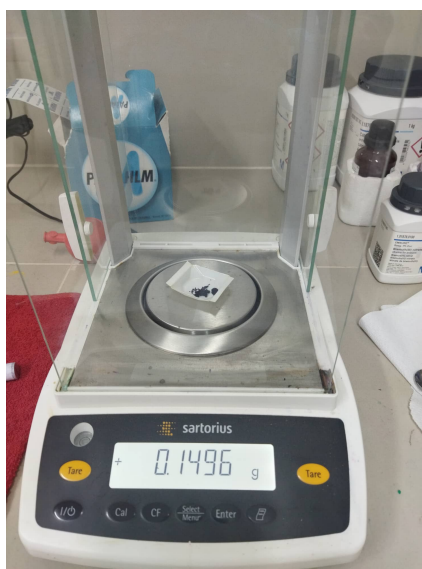
Nitrato de Cromo



2. Para el pesaje de este compuesto se usó una balanza analítica y una microcuchara para obtener las cantidades deseadas, figura 22

Figura 22

Pesaje de nitrato de Cromo



3. El nitrato de cromo se pone en agitación con el nitrato de níquel, siguiendo la misma ruta que el $NiTiO_3$ puro. Esto se realizó con cada concentración de dopado.
4. Luego las muestras se colocaron en placas de petri para llevarlas a la estufa de secado durante 24 horas y posterior calcinación a 700°C durante 2 horas para eliminar cualquier presencia de humedad o impureza, cabe resaltar que el secado y calcinación fue de manera simultánea con cada una de las muestras.
5. Finalmente se pasa por un proceso de molienda en un mortero de agata durante aproximadamente 2 horas. Las muestras fueron depositadas en tubos de centrífuga, ver figura 23

Figura 23

Nanopartículas de NiTiO₃ a diferentes concentraciones

**3.2.2. Caracterización óptica**

3.2.2.1. Difracción de rayos X (XRD). Para la caracterización XRD se usó un difractómetro de rayos X (marca PANalytical, modelo Aeris Research). Para la preparación de las muestras se realizó lo siguiente:

1. El portamuestra debe ser previamente limpiado con 2-propanol antes llenarse con la muestra, ver figura 24.
2. El portamuestra se adhiere a una pieza complementaria para contener a la muestra de NiTiO₃, ver figura 25.

Figura 24

Portamuestra sin $NiTiO_3$

**Figura 25**

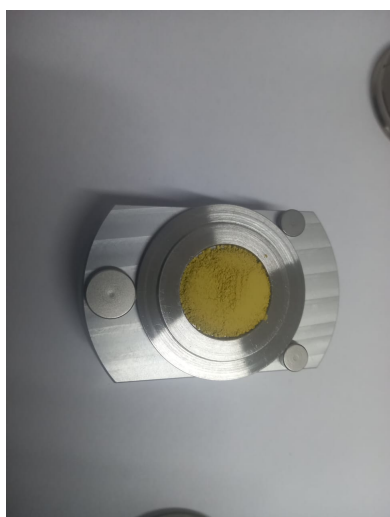
Unión del portamuestra



3. El portamuestra es llenado con $NiTiO_3$ y presionado hasta que se forme una superficie lisa, tal como se muestra en la figura 26.
4. Posteriormente es llevado al difractor para su caracterización, tal como se muestra en la figura 27.

Figura 26

Portamuestra con $NiTiO_3$

**Figura 27**

Caracterización en el difractor



3.2.2.2. Espectroscopía UV-Vis. Para la caracterización UV-vis se usó un espectrómetro UV-vis. Para la preparación de las muestras se realizó lo siguiente:

1. El portamuestra debe ser previamente limpiado con 2-propanol antes llenarse con la muestra.
2. El portamuestra es llenado con $NiTiO_3$ y presionado hasta que se forme una superficie lisa.
3. Posteriormente es llevado al espectrómetro para su caracterización, ver figura 28.

Figura 28

Caracterización en el espectrómetro UV-vis



3.2.2.3. Espectroscopía FTIR. Para la caracterización por espectroscopía FTIR se usó un espectrómetro FTIR. Para la preparación de las muestras se realizó lo siguiente:

1. El portamuestra debe ser previamente limpiado con 2-propanol antes de llenarse con la muestra.
2. El portamuestra es llenado con $NiTiO_3$ hasta que se forme una superficie lisa.
3. Posteriormente es llevado al espectrómetro FTIR para su caracterización.

3.2.3. Generación de hidrógeno

1. Para la generación de hidrógeno verde, previamente se determinó el pH de las muestras de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$, para ello se utilizó un pHmetro o medidor de pH.

Figura 29

Medición del pH de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$



2. El valor del pH de cada muestra se aprecia en la tabla 5, note que todas tiene a un pH casi neutro, lo que puede ayudar a la reacción en el proceso fotocatalítico.

Tabla 5

pH de las muestras de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$

Muestra	pH
$NiTiO_3$	6,98
$NiTiO_3/1\%Cr$	7,02
$NiTiO_3/3\%Cr$	7,0
$NiTiO_3/5\%Cr$	7,02
$NiTiO_3/10\%Cr$	6,96

3. Para el proceso de fotocatalisis se disolvió medio gramo de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$ en un litro de agua destilada con propanol. La fuente de luz usada fue de 300 W de potencia. Este proceso se llevó a cabo durante 1 hora y se repitió con cada una de las muestras.

Figura 30

Generación de hidrógeno mediante fotocatalisis con lámpara de 300 W



4. Mediante un sensor de hidrógeno se consigue medir la tasa de producción

hidrógeno para cada muestra. El tiempo por muestra fue de 1 hora.

Figura 31

Medición de la producción de hidrógeno mediante un sensor de hidrógeno



3.3. Procesamiento y análisis de datos

La data obtenida por el difractómetro se guardó en un block de notas con extensión **.txt**, tanto para el $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$. Posteriormente se llevó al software OriginLab para la representación de gráficos. El eje horizontal corresponde a 2θ y el vertical a la intensidad

Figura 32

Procesamiento de datos en OrigiLab

The screenshot shows the OrigiLab software interface with a data table. A red arrow points to the row where the dopant concentration is 10% and the crystal size is 28.58 nm. The table contains the following data:

Long Name	Dopante cromo (%)	Tamaño de cristalito (nm)	C(X)2	D(Y)2	E(X)3	F(Y)3	G(X)4	H(Y)4	I(X)5	J(Y)5	K(X)6	L(Y)6	M(Y)6	Banda prohibida eV
1	0	32.23	10.00643	2111	10.00643	2882	10.00643	2799	10.00643	2160	10.00643	2835	2835	2.16
2	1	31.09	10.0173	2198	10.0173	2846	10.0173	2936	10.0173	2105	10.0173	2831	2831	1.98
3	3	29.38	10.02817	2143	10.02817	2785	10.02817	2940	10.02817	2106	10.02817	2824	2824	1.95
4	5	29.09	10.03903	2178	10.03903	2730	10.03903	2966	10.03903	2188	10.03903	2804	2804	1.68
5	10	28.58	10.0499	2165	10.0499	2854	10.0499	2842	10.0499	2112	10.0499	2887	2887	1.6
6			10.06077	2240	10.06077	2832	10.06077	2850	10.06077	2141	10.06077	2776	2776	
7			10.07163	2091	10.07163	2810	10.07163	2919	10.07163	2193	10.07163	2787	2787	
8			10.0825	2126	10.0825	2848	10.0825	2949	10.0825	2227	10.0825	2765	2765	
9			10.09336	2120	10.09336	2893	10.09336	2949	10.09336	2121	10.09336	2780	2780	
10			10.10423	2133	10.10423	2838	10.10423	2847	10.10423	2189	10.10423	2817	2817	
11			10.1151	2186	10.1151	2797	10.1151	2850	10.1151	2200	10.1151	2794	2794	
12			10.12596	2175	10.12596	2768	10.12596	2793	10.12596	2123	10.12596	2862	2862	
13			10.13683	2204	10.13683	2810	10.13683	2830	10.13683	2106	10.13683	2739	2739	
14			10.1477	2201	10.1477	2756	10.1477	2877	10.1477	2090	10.1477	2899	2899	
15			10.15856	2161	10.15856	2856	10.15856	2785	10.15856	2185	10.15856	2783	2783	
16			10.16943	2228	10.16943	2874	10.16943	2898	10.16943	2159	10.16943	2795	2795	
17			10.1803	2175	10.1803	2875	10.1803	2841	10.1803	2183	10.1803	2852	2852	
18			10.19116	2178	10.19116	2805	10.19116	2913	10.19116	2130	10.19116	2835	2835	
19			10.20203	2105	10.20203	2812	10.20203	2887	10.20203	2087	10.20203	2723	2723	
20			10.2129	2094	10.2129	2720	10.2129	2811	10.2129	2151	10.2129	2729	2729	
21			10.22376	2093	10.22376	2736	10.22376	2832	10.22376	2105	10.22376	2743	2743	
22			10.23463	2212	10.23463	2835	10.23463	2957	10.23463	2023	10.23463	2801	2801	
23			10.24549	2103	10.24549	2741	10.24549	2752	10.24549	2051	10.24549	2749	2749	
24			10.25636	2159	10.25636	2758	10.25636	2816	10.25636	2132	10.25636	2678	2678	
25			10.26723	2098	10.26723	2866	10.26723	2814	10.26723	2075	10.26723	2741	2741	
26			10.27809	2171	10.27809	2725	10.27809	2779	10.27809	2031	10.27809	2618	2618	
27			10.28896	2143	10.28896	2795	10.28896	2780	10.28896	2153	10.28896	2800	2800	
28			10.29983	2160	10.29983	2783	10.29983	2941	10.29983	2103	10.29983	2639	2639	
29			10.31069	2104	10.31069	2821	10.31069	2800	10.31069	2164	10.31069	2723	2723	

3.4. Técnicas e instrumentos de recolección de datos

La técnica de recolección de datos experimentales está dada directamente por los siguientes instrumentos de medición:

- Espectroscopia UV-vis
 - Espectros de reflexión
 - Estimación de la banda prohibida (band gap)
- Espectroscopia FTIR
 - Bandas de vibración de los compuestos
- Difractómetro de rayos X
 - Cristalinidad de las muestras
 - Tamaño de cristalito
- Sensor de hidrógeno

- Tasa de producción de hidrógeno

3.5. Métodos y técnicas de procesamiento y análisis de resultados

El análisis y procesamiento de datos se realizó con un software especializado, este software es OriginLab 2021. Debido a su versatilidad, se realizaron las gráficas de XRD, Uv-VIS y FTIR (Deschenes, 2000).

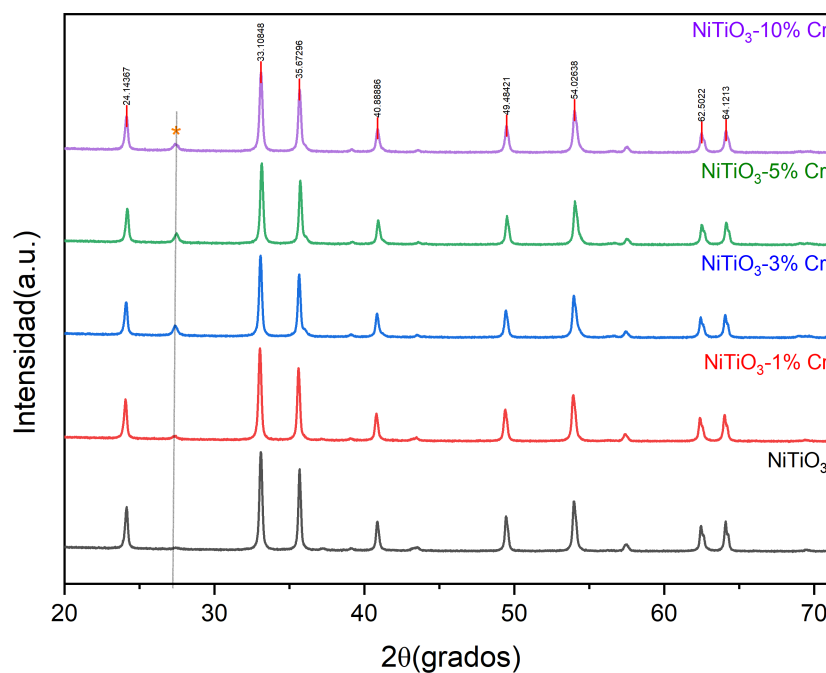
IV. Resultados y discusión

4.1. Propiedades ópticas

4.1.1. Caracterización XRD

Figura 33

Difractograma de las nanopartículas de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$



4.1.1.1. Estructura cristalina. Mediante la técnica DRX se pudo realizar el análisis estructural y microestructural del $NiTiO_3$, su fórmula química es $Ni_6Ti_6O_{18}$. En la figura 33 mostramos los difractogramas de las muestras sintetizadas que corresponde al titanato de níquel ($NiTiO_3$) puro y titanato de níquel dopado con cromo ($NiTiO_3/Cr$) a 1 %, 3 %, 5 %, 10 % calcinado a 700 °C durante 2 horas. Los patrones se analizaron utilizando la base de datos COD (Crystallographic

Open Database), y se determinó que la estructura cristalina corresponde a una fase hexagonal tipo ilmenita (representado por H en la tabla 6), grupo espacial R-3, N°148, y que corresponde al código de referencia 96-900-7390. Los parámetros estructurales a,b,c (nm) son a=5.0276, b=5.0276 y c=13.8124 para el $NiTiO_3$; a=5.0261, b=5.0261 y c=13.8122 para el $NiTiO_3/1\%Cr$; a=5.0284, b=5.0284 y c=13.8174 para el $NiTiO_3/3\%Cr$; a=5.0288, b=5.0288 y c=13.817 para el $NiTiO_3/5\%Cr$ y a=5.0306, b=5.0306 y c=13.8212 para el $NiTiO_3/10\%Cr$. Los ángulos α , β , γ ($^\circ$) confirman la estructura hexagonal $\alpha = 90$, $\beta = 90$, $\gamma = 120$ para el $NiTiO_3$; $\alpha = 90$, $\beta = 90$, $\gamma = 120$ para el $NiTiO_3/1\%Cr$; $\alpha = 90$, $\beta = 90$, $\gamma = 120$ para el $NiTiO_3/3\%Cr$; $\alpha = 90$, $\beta = 90$, $\gamma = 120$ para el $NiTiO_3/5\%Cr$ y $\alpha = 90$, $\beta = 90$, $\gamma = 120$ para el $NiTiO_3/10\%Cr$, los parámetros estructurales se aprecian en la siguiente tabla.

Tabla 6

Parámetros estructurales del $NiTiO_3$ puro y $NiTiO_3/Cr$

Parámetros estructurales	$NiTiO_3/Cr$				
	0 %	1 %	3 %	5 %	10 %
Estructura cristalina	H	H	H	H	H
Grupo espacial	R-3	R-3	R-3	R-3	R-3
a = b (nm)	5.0276	5.0261	5.0284	5.0288	5.0306
c (nm)	13.8124	13.8122	13.8174	13.817	13.8212
$\alpha = \beta$ ($^\circ$)	90	90	90	90	90
γ ($^\circ$)	120	120	120	120	120

Los principales picos de difracción identificados en 2θ son: $24,14^\circ$; $33,11^\circ$; $35,67^\circ$; $40,89^\circ$; $49,48^\circ$; $54,03^\circ$; $62,50^\circ$; $64,12^\circ$; $71,82^\circ$ expresaron los siguientes planos (012), (10-4), (110), (11-3), (024), (116), (234), (030), (0,1,-10) respectivamente. las gráficas correspondientes a cada muestra de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3\%Cr$ se muestran en el anexo A.

Sin embargo, el patrón de difracción de rayos X de las muestras de $NiTiO_3$

dopadas con Cr revela un pico adicional en $2\theta = 27,41^\circ$ y es indicado por un asterisco (*) en la figura 33, esto puede indicar presencia de dióxido de titanio.

Observamos que mientras se incrementa la concentración de Cr en las muestras de ($NiTiO_3$) ocurre una disminución en la intensidad de los picos, debido a que el Cromo está inhibiendo el crecimiento de las partículas haciendo que éstas a su vez reduzcan el tamaño del cristalito a partir del $NiTiO_3/1\%Cr$; Del mismo modo, se observa un desplazamiento que puede atribuirse a la configuración de la estructura inicial del material.

4.1.1.2. Determinación del tamaño del cristalito. El tamaño del cristalito se determinó para el $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$ a diferentes concentraciones a partir del patrón DRX de acuerdo con la ecuación de Scherrer:

$$D = \frac{K\lambda}{\beta \cos(2\theta)}$$

En la tabla 7 se presentan los resultados obtenidos para estimar el tamaño de los cristalitos, calculado a partir de la ecuación de Scherrer (Ec. 1). Para este cálculo, se seleccionó el pico más intenso de cada difractograma, ya que representa la señal más clara y confiable. Se utilizó un valor de K igual a 0,9 como factor de forma, y una longitud de onda y $\lambda = 1,5406$ nm.

Tabla 7

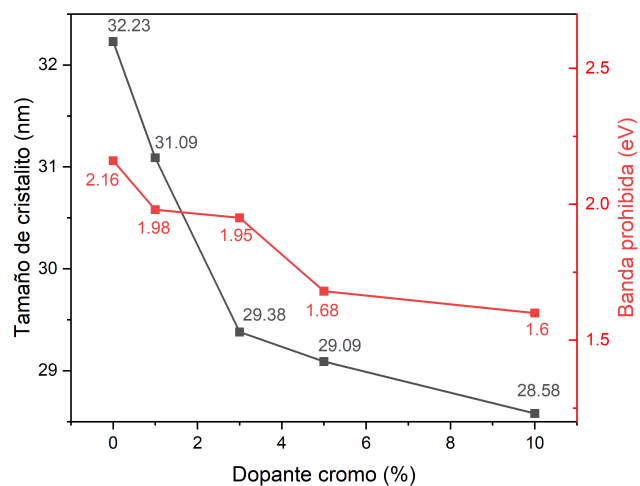
Características estructurales y cristalográficas, para determinar el tamaño de cristalito de $NiTiO_3$ puro y dopados con Cr

Muestra	k	λ	β	$\cos(2\theta)$	Tamaño(nm)
$NiTiO_3$			0,274	45,490	32,233
$NiTiO_3 - 1\%Cr$			0,282	45,425	31,088
$NiTiO_3 - 3\%Cr$	0,9	0,15406	0,307	43,461	29,380
$NiTiO_3 - 5\%Cr$			0,309	43,539	29,095
$NiTiO_3 - 10\%Cr$			0,322	46,329	28,581

Los resultados obtenidos para el Titanato de Niquel puro ($NiTiO_3$) fueron $D=32,23$ nm, $D=31,08$ nm para $NiTiO_3/1\%Cr$, $D=29,38$ nm para $NiTiO_3/3\%Cr$, $29,09$ nm para $NiTiO_3/5\%Cr$ y $28,58$ nm para $NiTiO_3/10\%Cr$. El tamaño del cristalito disminuye, estos valores se puede apreciar en la tabla 7 y figura 34. El cristalito disminuye su tamaño de $32,23$ nm a $28,58$ nm para $NiTiO_3$ puro y $NiTiO_3/Cr$, respectivamente.

Figura 34

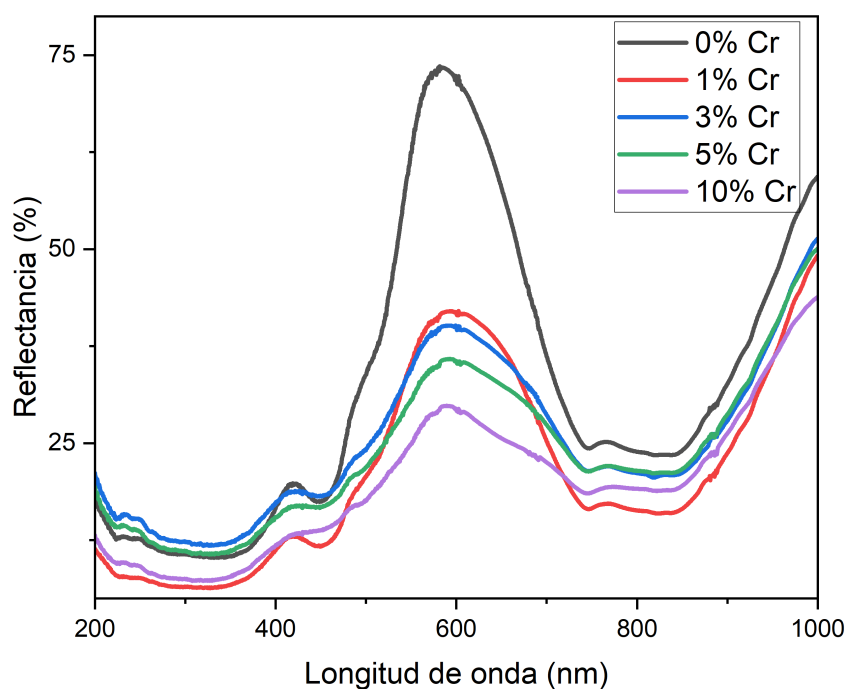
Influencia del dopante sobre el tamaño del cristalito y banda prohibida



4.1.2. Caracterización UV-Vis

Figura 35

Espectro de reflectancia difusa UV-visible de nanopartículas de $NiTiO_3$ puro y $NiTiO_3/Cr$



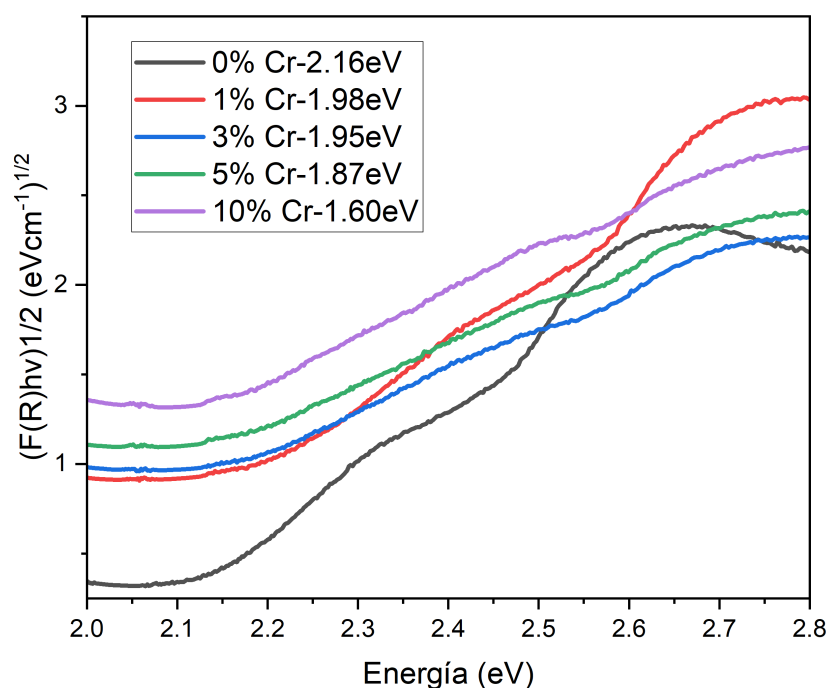
Según los resultados experimentales, las nanopartículas de $NiTiO_3$ puro y $NiTiO_3/Cr$ muestran picos de reflectancia en el rango visible. Presentando reflectancia cerca al 75 % para el $NiTiO_3$ puro, además una baja reflectancia en longitudes de onda inferiores a 400 nm. También se aprecia que los espectros de reflectancia del $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$ se dan en el rango visible (400-750 nm), disminuyendo con el aumento de la concentración de cromo, alcanzando hasta un 45 % de reflectancia al 10% Cr. Los picos bajos están relacionados con absorciones,

lo que significa que la muestra está absorbiendo la luz en esas longitudes de onda en lugar de reflejarla, esto puede ser influenciado por la coloración de la muestra, que a su vez depende de la absorción de luz en longitudes de onda específicas. La diferencia entre el porcentaje de reflectancia del $NiTiO_3$ puro y el $NiTiO_3 - 1\%Cr$ es cerca al 40 % en sus valores de intensidad máxima, ver figura 35, las gráficas correspondientes a cada muestra de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3\%Cr$ se muestran en el anexo B.

4.1.2.1. Cálculo de la banda prohibida.

Figura 36

Gráfico para el cálculo de la banda prohibida del $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$ mediante el modelo de Kubelka-Munk



La banda prohibida indirecta (E_g) de las nanopartículas de $NiTiO_3$ puro y

$NiTiO_3/Cr$ se determinaron utilizando la ecuación de Kubelka-Munk, ec. 2.9.1

$$\frac{K}{S} = \frac{(1 - R_\infty)^2}{2R_\infty} \equiv F(R_\infty)$$

Los datos de reflectancia difusa de las muestras se transformaron al modelo Kubelka-Munk función $F(R) = (1 - R_\infty)^2 / (2R_\infty)$ (donde R es el valor de reflectancia difusa) $[F(R)h\nu]^2$ vs $h\nu$, tal como se aprecia en la figura 36.

Los resultados muestran que el aumento en la concentración de dopante disminuye la energía de la banda prohibida del $NiTiO_3$ de 2,16 a 1,60eV. Esto indica que la banda prohibida se ha reducido, como se muestra en la tabla 8. En la estructura ilmenita, el Ni^{2+} y Ti^{4+} adoptan coordinación octaédrica con el oxígeno. El dopado con cromo divide la banda de conducción y introduce estados intermedios que provocan la reducción de la banda prohibida.

Tabla 8

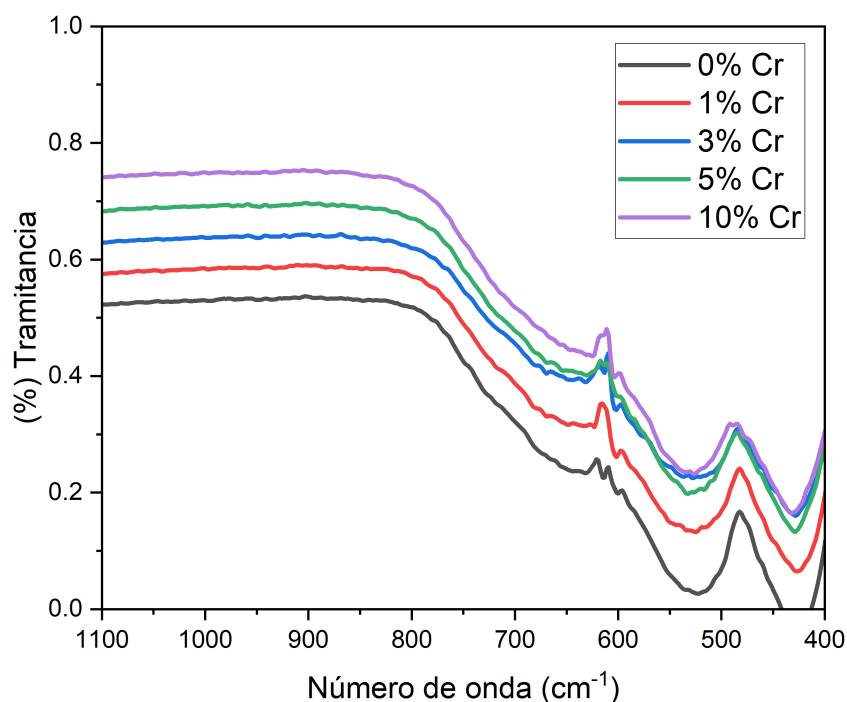
Band gap de $NiTiO_3$ puro y $NiTiO_3/Cr$

Muestra	Band gap (eV)
$NiTiO_3 - 0\%Cr$	2,16
$NiTiO_3 - 1\%Cr$	1,98
$NiTiO_3 - 3\%Cr$	1,95
$NiTiO_3 - 5\%Cr$	1,78
$NiTiO_3 - 10\%Cr$	1,60

4.1.3. Caracterización FTIR

Figura 37

Espectro FTIR del $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$



La Figura 37 ilustra los espectros FTIR de las nanopartículas $NiTiO_3$ puro y $NiTiO_3/Cr$. Las características espectrales observadas incluyen una banda característica alrededor de 487 cm^{-1} , que es indicativa del modo de vibración de la red Ti-O-Ni, Ni-O y Ti-O en $NiTiO_3$, esto indica que el dopaje con cromo no mejora la polarizabilidad de los enlaces Ti-O. Las gráficas correspondientes a cada muestra de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3\%Cr$ se muestran en el anexo C.

Por otro lado, estas características espectrales se alinean con informes de la literatura, afirmando así la estructura cristalina de $NiTiO_3$ en el material analizado

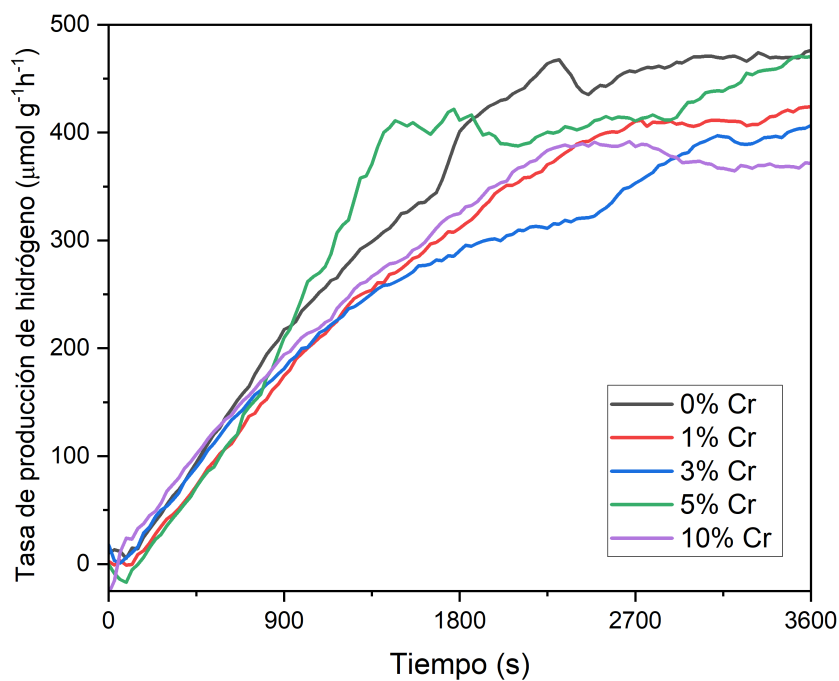
4.2. Eficiencia en la generación de hidrógeno verde

La producción de hidrógeno es relativamente mayor para el $NiTiO_3$, esto se atribuye a la aparición de TiO_2 en fase anatasa.

Se aprecia una mayor tasa de producción para el $NiTiO_3$ y disminuye a medida que aumenta la concentración de cromo.

Figura 38

Tasa de producción de hidrógeno verde



La tasa de producción de hidrógeno se expresa en $\mu\text{mol g}^{-1}\text{h}^{-1}$, en donde se obtiene un valor de 952,45228 para el $NiTiO_3$ puro, 847,66236 para $NiTiO_3/1\%Cr$, 813,22571 para $NiTiO_3/3\%Cr$, 940,44416 $NiTiO_3/5\%Cr$ y 742,97319 para $NiTiO_3/10\%Cr$. Los datos obtenidos se aprecian en la tabla 9. las gráficas correspondientes a cada muestra de $NiTiO_3$ y $NiTiO_3\%Cr$ se muestran en el

anexo D.

De la tabla 9 se puede apreciar una disminución en la tasa de producción cuando presenta una concentración de cromo al 1 % y 3 %, pero al 5 % produce hidrógeno en una cantidad similar al $NiTiO_3$ puro. Además, note que al 10 % sufre una disminución considerable. Por otro lado, la tasa de producción de hidrógeno puede ser influida por el pH medido, además que puede formar productos y afectar la estabilidad de los reactivos, por lo que es un parámetro clave en el procesos fotocatalítico.

Tabla 9

Tasa de producción de hidrógeno del $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$

Fotocatalizador	Cocatalizador	Tasa de producción de $H_2(\mu mol g^{-1} h^{-1})$
$NiTiO_3$	agua destilada	952,45228
$NiTiO_3/1\%Cr$	agua destilada	847,66236
$NiTiO_3/3\%Cr$	agua destilada	813,22571
$NiTiO_3/5\%Cr$	agua destilada	940,44416
$NiTiO_3/10\%Cr$	agua destilada	742,97319

V. Conclusiones

- Se sintetizaron satisfactoriamente las nanopartículas de $NiTiO_3$ por el método sol gel dopando las soluciones con cromo al %0, %1, %3, %5 y %10.
- Mediante difracción de rayos X se logró obtener difractogramas de cada muestra; obteniendo patrones de difracción consistentes con la estructura hexagonal predominante de ilmenita de $NiTiO_3$, además permitiendo determinar el tamaño del cristalito con base a la ecuación de Scherrer, obteniendo 32,23 nm para el $NiTiO_3$ y disminuyendo al aumentar la concentración de cromo hasta 28.58 nm al %10. Además, mediante espectroscopía UV-vis se calculó la banda prohibida con base a la ecuación de Kubelka-Munk, obteniendo un valor de 2,16 eV para el $NiTiO_3$ y disminuyendo al aumentar la concentración de cromo hasta 1,6eV al %10. Finalmente, mediante FTIR se determinó las curvas de transmitancia, presentando una banda característica alrededor de 487 cm^{-1} , siendo mayor para el $NiTiO_3$ y presentando un decaimiento ostensivo al aumentar la concentración de cromo, siendo menor para el $NiTiO_3/\%10Cr$.
- La generación de hidrógeno verde se realizó mediante el proceso de fotocatalisis, para ello se usó el $NiTiO_3$ y $NiTiO_3/Cr$ como fotocatalizador, obteniendo una tasa de producción de $952,45228\ \mu\text{molg}^{-1}\text{h}^{-1}$ para el $NiTiO_3$ puro, al aumentar la concentración de cromo disminuye hasta $742,97319\ \mu\text{molg}^{-1}\text{h}^{-1}$ para el $NiTiO_3/\%10Cr$, donde se presenta una tasa de producción similar al $NiTiO_3$ para el $NiTiO_3/\%5Cr$ de $940,44416\ \mu\text{molg}^{-1}\text{h}^{-1}$. Esta disminución en la tasa de producción de hidrógeno puede deberse al cromo que es un metal de transición y puede alterar las propiedades electrónicas del $NiTiO_3$ al modificar la estructura de bandas del material, puede afectar negativamente la capacidad del material para generar electrones libres necesarios para la

generación de hidrógeno.

- Los resultados indican que $NiTiO_3 - Cr$ no resulta adecuado para generar hidrógeno verde.

Recomendaciones

- Evaluar otros parámetros como la temperatura o presión para ver su influencia en la síntesis y fotocatalisis.
- Se sugiere hacer otros estudios relacionados con las nanopartículas de $NiTiO_3$ dopado con distintos materiales, ya sean conductores o semiconductores para determinar su influencia en la generación de hidrógeno verde.
- Para obtener buenos resultados, se recomienda también ser precisos en cuanto al pesaje de los materiales y un ambiente adecuado para realizar la síntesis, y de esa forma evitar contaminar las muestras y errores en los resultados.

Referencias

- Abdullahi, S. S., Güner, S., Koseoglu, Y., Musa, I. M., Adamu, B. I., y Abdulhamid, M. I. (2016). Simple method for the determination of band gap of a nanopowdered sample using kubelka munk theory. *NAMP J*, 35, 241–246.
- Abedin, M. I., Islam, A., y Hossain, Q. D. (2015). A self-adjusting lin-log active pixel for wide dynamic range cmos image sensor. En *2015 ieee international conference on telecommunications and photonics (ictp)* (pp. 1–4).
- Amokrane, G., Falentin-Daudré, C., Ramtani, S., y Migonney, V. (2018). A simple method to functionalize pcl surface by grafting bioactive polymers using uv irradiation. *IRBM*, 39(4), 268-278. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1959031818301659> doi: <https://doi.org/10.1016/j.irbm.2018.07.002>
- Angulo, K. L. C. (2024). Estrategias adaptativas de la agroindustria frente al cambio climático: Un análisis crítico. *Polo del Conocimiento*, 9(4), 2971–2993. Descargado de <https://polodelconocimiento.com/ojs/index.php/es/article/view/7142> doi: 10.23857/pc.v9i4.7142
- Antoranz, J. L. (2021). El hidrógeno verde en la unión europea: una vía necesaria para la transición energética. *Revista Española de Desarrollo y Cooperación*(48), 13–33. doi: <https://doi.org/10.5209/redc.81174>
- Ares, J. R., Leardini, F., Sánchez, C., Fernández, J. F., y Ferrer, I. J. (2019). El hidrógeno como vector energético: Mucho hecho pero casi todo por hacer. *Encuentros multidisciplinares*, 62.
- Augustin, A., Chuaicham, C., Shanmugam, M., Vellaichamy, B., Rajendran, S., Hoang, T. K., ... Sekar, K. (2022). Recent development of organic–inorganic hybrid photocatalysts for biomass conversion into hydrogen production.

Nanoscale Advances, 4(12), 2561–2582.

- Ayqui Chuctaya, N. A. (2023). *Generación de hidrógeno verde a través de electrólisis con energía fotovoltaica en majes-arequipa, 2023* (Tesis pregrado, Universidad Católica de Santa María, Majes, Arequipa). Descargado de <https://repositorio.ucsm.edu.pe/handle/20.500.12920/12751>
- Bedoya Olarte, N., y Hernández, M. (2021). *Evaluación de la producción de hidrógeno a partir de electrólisis de agua de mar utilizando energía renovable como fuente de energía eléctrica*. (Tesis, Universidad de América). Descargado de <https://hdl.handle.net/20.500.11839/8656>
- Benjumea Cervera, M. d. R. (2021). *Análisis de instalaciones de generación de hidrógeno mediante energía solar fotovoltaica* (Tesis pregrado, Universidad de Sevilla, Sevilla, España). Descargado de <https://www.ingemecanica.com/monografias/objetos/publicacion26.pdf>
- Bianco, E., y Blanco. (2020). Green hydrogen: a guide to policy making. *Institution of Gas Engineers and managers*. (Publicada por empresa)
- Bravo Pérez, H., Castro Ramírez, J. C., Gutiérrez Andrade, M. Á., y Omaña Pulido, E. P. (2017). Evaluación de una política de sustitución de energías fósiles para reducir las emisiones de carbono. *El trimestre económico*, 84(333), 137–164. doi: <https://doi.org/10.20430/ete.v84i333.265>
- Calisaya Pinto, F. C. (2021). *Estudio del efecto de la adición de nanopartículas de nitio_3 a pinturas en la disminución de temperatura de confort de ambientes fabricados con placas metálicas a nivel de laboratorio* (Tesis pregrado, Universidad Nacional Jorge Basadre Grohmann, Tacma, Perú). Descargado de <https://repositorio.unjbg.edu.pe/handle/20.500.12510/1814>

- Cancino Silva, R. B. (2021). *Producción y almacenamiento hidrógeno verde para aplicaciones energéticas en Chile* (Tesis, Universidad de Chile, Santiago de Chile). Descargado de <https://repositorio.uchile.cl/handle/2250/181631>
- Candal, R. J., Bilmes, S. A., y Blesa, M. A. (2001). Semiconductores con actividad fotocatalítica. *Red CYTED VIII-G*.
- Chen, C., Ran, C., Yao, Q., Wang, J., Guo, C., Gu, L., ... Xia, Y. (2023). Screen-printing technology for scale manufacturing of perovskite solar cells. *Advanced Science*, 10(28), 2303992.
- Chen, C.-H., Her, J.-L., y Pan, T.-M. (2020). Structural and electrical properties of the sol-gel derived multiferroic bifeo₃ monolayer and nitio₃-bifeo₃ bilayer thin films. *Ceramics International*, 46(9), 13219-13224. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0272884220304193> doi: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.02.097>
- Council, H. (2017). Hydrogen scaling up: a sustainable pathway for the global energy transition. *Institution of Gas Engineers and managers*. (Publicada por empresa)
- Council, H. (2020). Path to hydrogen competitiveness: a cost perspective. *REKEMARIKON*.
- Deschenes, L. A. a. (2000). Origin 6.0: Scientific data analysis and graphing software origin lab corporation (formerly microcal software, inc.). web site: www.originlab.com. commercial price:\$595. academic price: \$446. *Journal of the American Chemical Society*, 122(39), 9567-9568. Descargado de <https://doi.org/10.1021/ja004761d> doi: 10.1021/ja004761d
- Diab, K. R., El-Maghrabi, H. H., Nada, A. A., Youssef, A. M., Hamdy,

- A., Roualdes, S., y Abd El-Wahab, S. (2018). Facile fabrication of nitio3/graphene nanocomposites for photocatalytic hydrogen generation. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 365, 86–93.
- Dincer, I. (2012). Green methods for hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(2), 1954-1971. (10th International Conference on Clean Energy 2010) doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.03.173>
- Dinnebier, R. E., y Billinge, S. J. (2015). *Powder diffraction: theory and practice*. Royal society of chemistry.
- Dobbertin Sánchez, S. E. (2015). *Efecto del contenido de cobalto en la absorbanca óptica, fotoluminiscencia y estructura cristalina del zno nanoestructurado* (Tesis pregrado, Universidad Nacional de Trujillo). Descargado de <https://hdl.handle.net/20.500.14414/8158>
- El-Bery, H. M., y Abdelhamid, H. N. (2021). Photocatalytic hydrogen generation via water splitting using zif-67 derived co3o4@c/tio2. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9(4), 105702. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2213343721006795> doi: <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.105702>
- Epp, J. (2016). X-ray diffraction (xrd) techniques for materials characterization. En *Materials characterization using nondestructive evaluation (nde) methods* (pp. 81–124). Elsevier.
- Förster, H. (2004). Uv/vis spectroscopy. En H. G. Karge y J. Weitkamp (Eds.), *Characterization i: -/* (pp. 337–426). Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. Descargado de <https://doi.org/10.1007/b94239> doi: 10.1007/b94239
- Galdámez-Martínez, A., Bai, Y., Santana, G., Sprick, R. S., y Dutt, A. (2020). Photocatalytic hydrogen production performance of 1-d zno nanostructures:

- Role of structural properties. *international journal of hydrogen energy*, 45(56), 31942–31951.
- Gogoi, D., Namdeo, A., Golder, A. K., y Peela, N. R. (2020). Ag-doped tio2 photocatalysts with effective charge transfer for highly efficient hydrogen production through water splitting. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(4), 2729-2744. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319919343496> doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.11.127>
- Gross, R., Leach, M., y Bauen, A. (2003). Progress in renewable energy. *Environment International*, 29(1), 105-122. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0160412002001307> doi: [https://doi.org/10.1016/S0160-4120\(02\)00130-7](https://doi.org/10.1016/S0160-4120(02)00130-7)
- Habisreutinger, S. N., Schmidt-Mende, L., y Stolarczyk, J. K. (2013). Photocatalytic reduction of co2 on tio2 and other semiconductors. *Angewandte Chemie International Edition*, 52(29), 7372–7408. doi: <https://doi.org/10.1002/anie.201207199>
- Huang, J., Jiang, Y., Li, G., Xue, C., y Guo, W. (2017). Hetero-structural nitio3/tio2 nanotubes for efficient photocatalytic hydrogen generation. *Renewable Energy*, 111, 410-415. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960148117303233> doi: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2017.04.024>
- Hung, P. P., Dat, T. T., Dung, D. D., Trung, N. N., Hanh, M. H., Toan, D. N., y Bac, L. H. (2018). Effect of annealing temperature on structural, optical and visible-light photocatalytic properties of *nitio3* nanopowders. *Journal of Electronic Materials*, 47(12), 7301–7308. doi: <https://doi.org/10.1007/>

s11664-018-6668-9

- Iberdrola. (2023). *El hidrógeno verde una alternativa para reducir las emisiones y cuidar nuestro planeta*. Descargado de <https://www.iberdrola.com/sostenibilidad/hidrogeno-verde>
- Jiang, K., Pham, T.-T., Kang, S. G., Men, Y., y Shin, E. W. (2018). Modification of the structural properties of nitio3 materials by transition metal dopants: The dopant size effect. *Journal of Alloys and Compounds*, 739, 393-400. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838817344201> doi: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.12.224>
- Karayel, G. K., Javani, N., y Dincer, I. (2022). Green hydrogen production potential for turkey with solar energy. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(45), 19354-19364. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319921043196> (The Fifth International Hydrogen Technologies Congress) doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.10.240>
- Khalil, D., Sabry, Y., Omran, H., Medhat, M., Hafez, A., y Saadany, B. (2011). Characterization of mems ftir spectrometer. En *Moems and miniaturized systems x* (Vol. 7930, pp. 142–151).
- Lakhera, S. K., Hafeez, H. Y., Veluswamy, P., Ganesh, V., Khan, A., Ikeda, H., y Neppolian, B. (2018). Enhanced photocatalytic degradation and hydrogen production activity of in situ grown tio_2 coupled nitio_3 nanocomposites. *Applied Surface Science*, 449, 790 – 798. Descargado de (4th International Conference on Nanoscience and Nanotechnology) doi: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.02.136>
- Li, Q., Xing, Y., Zong, L., Li, R., y Yang, J. (2013). Nickel titanates hollow shells: Nanosphere,

nanorod, and their photocatalytic properties. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 13(1), 504-508. Descargado de <https://www.ingentaconnect.com/content/asp/jnn/2013/00000013/00000001/art00070> doi: doi:10.1166/jnn.2013.6713

Lin,

Y.-J., Chang, Y.-H., Yang, W.-D., y Tsai, B.-S. (2006). Synthesis and characterization of ilmenite TiO_2 and CoTiO_3 prepared by a modified pechini method. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 352(8), 789 – 794. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2006.02.001>

Liu, S., Qu, Y., Li, R., Wang, G., y Li, Y. (2014). Photocatalytic activity of mTiO_3 (m = Ca, Ni, and Zn) nanocrystals for water decomposition to hydrogen. *Journal of Materials Research*, 29(11), 1295–1301. doi: 10.1557/jmr.2014.110

Liza, Y. M., Yasin, R. C., Maidani, S. S., y Zainul, R. (2018). Sol gel: Principle and technique (a review). *INA-Rxiv*. doi: <https://doi.org/10.31227/osf.io/2cuh8>

Ma, N., Zhao, W., Wang, W., Li, X., y Zhou, H. (2023). Large scale of green hydrogen storage: Opportunities and challenges. *International Journal of Hydrogen Energy*.

Machicado Flores, B. J. (2024). *Síntesis, caracterización y evaluación de nanopartículas de NiTiO_3 dopadas con la* (Tesis pregrado, Universidad Nacional Jorge Basadre Grohmann, Tacna, Perú). Descargado por un gei en:

<https://repositorio.unjbg.edu.pe/handle/20.500.12510/4108>

Matyushok, V. M., Sinelnikova, A. V., Matyushok, S. B., y Galvez, D. P. C. (2024, Jan.). Carbon capture and storage in hydrogen production: World experience and growth of export opportunities of the Russian hydrogen sector. *International Journal of Energy Economics and Policy*, 14(1), 507–516. Descargado de <https://www.econjournals.com.tr/index.php/ijeep/article/view/15205> doi: 10.32479/ijeep.15205

More, M. A., More, S. A., Femi, M. D., Jain, G. H., Shinde, S. D., Patil, D. Y., . . . Patil, G. E. (2024). Hydrothermally synthesized nanostructured nitio3 thick films for h2s and room temperature co2 gas sensing. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 35(26), 1–21.

Nevárez-Martínez, M. C., Espinoza-Montero, P. J., Quiroz-Chávez, F. J., y Ohtani, B. (2017). Fotocatálisis: inicio, actualidad y perspectivas a través del tio₂. *Avances en Química*, 12(2 – 3), 45 – –59.

Oliveira, A. M., Beswick, R. R., y Yan, Y. (2021). A green hydrogen economy for a renewable energy society. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 33, 100701. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2211339821000332> doi: <https://doi.org/10.1016/j.coche.2021.100701>

Patterson, A. L. (1939, Nov). The scherrer formula for x-ray particle size determination. *Phys. Rev.*, 56, 978–982. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.56.978> doi: 10.1103/PhysRev.56.978

Piguillem Palacios, S. V., y Fernández Baldo, M. A. (2016). *Síntesis y caracterización de nanomateriales: Aplicación clínica. nanomateriales aplicados como plataformas para la inmovilización de biomoléculas*. Editorial Académica Española. Descargado de <https://www.eae-publishing.com/catalog/details//store/es/book/978-3-8417-5432-5/>

Rafique, M., Hajra, S., Irshad, M., Usman, M., Imran, M., Assiri, M. A., y Ashraf, W. M. (2023). Hydrogen production using tio₂-based photocatalysts: a comprehensive review. *ACS omega*, 8(29), 25640–25648.

Ramesh, K. (2009). Nanomaterials. En *Nanomaterials: Mechanics and mechanisms* (pp. 1–20). Boston, MA: Springer US. Descargado de

https://doi.org/10.1007/978-0-387-09783-1_1 doi:

10.1007/978-0-387-09783-1_1

Salcedo Rodriguez, F. A., Karen Perez Ph. D. (2009). Propiedades del hidrogeno y el paladio y su papel en el desarrollo de fuentes alternas de energía. *Scientia Et Technica*. Descargado de

<https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=84917310061>

Sampath Kumar, T. (2013). Chapter 2 - physical and chemical characterization of biomaterials. En A. Bandyopadhyay y S. Bose (Eds.), *Characterization of biomaterials* (p. 11-47). Oxford:

Academic Press. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780124158009000024> doi:

<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-415800-9.00002-4>

San Miguel Gutiérrez, M. (2016). *Síntesis y caracterización de nanopartículas luminiscentes* (Tesis pregrado, Univeridad de Cantabria, Santander, España). Descargado de

<https://repositorio.unican.es/xmlui/bitstream/handle/10902/8967/386304.pdf?sequence=1>

Sarker, A. K., Azad, A. K., Rasul, M. G., y Doppalapudi, A. T. (2023). Prospect of green hydrogen generation from hybrid renewable energy sources: A review. *Energies*, 16(3).

Descargado de <https://www.mdpi.com/1996-1073/16/3/1556> doi:

10.3390/en16031556

Suárez Rodríguez, M. N. (2021). *Producción de hidrógeno mediante fotocatalisis heterogénea* (Tesis doctoral). Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, Las Palmas, España.

Taylor, D., Fleig, P., y Page, R. (2002). Characterization of nickel titanate synthesized by

sol-gel processing. *Thin Solid Films*, 408(1), 104-110. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040609002001438> doi: [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(02\)00143-8](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(02)00143-8)

Tong, Y., Fu, J., y Chen, Z. (2016). Synthesis, characterization, and nir reflectance of highly dispersed *nitio₃* and *nitio₃/tio₂* composite pigments. *Journal of Nanomaterials*, 2016(1), 5464978. Descargado de <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1155/2016/5464978> doi: <https://doi.org/10.1155/2016/5464978>

Wang, J.-L., Li, Y.-Q., Byon, Y.-J., Mei, S.-G., y Zhang, G.-L. (2013). Synthesis and characterization of *nitio₃* yellow nano pigment with high solar radiation reflection efficiency. *Powder Technology*, 235, 303-306. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591012007218> doi: <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2012.10.044>

Wang, Z., Peng, J., Feng, X., Ding, Z., y Li, Z. (2017). Wide spectrum responsive *cds/nitio₃/cos* with superior photocatalytic performance for hydrogen evolution. *Catalysis Science & Technology*, 7(12), 2524–2530. doi: DOI<https://doi.org/10.1039/C7CY00476A>

Wangong, J., y Daniel, P. (2010, dic.). Análisis a la eficiencia de las fuentes de energía renovable. *Ingenierías USBMed*, 1(1), 25–31. Descargado de <https://revistas.usb.edu.co/index.php/IngUSBmed/article/view/233> doi: 10.21500/20275846.233

Yuan, Y.-J., Chen, D., Yu, Z.-T., y Zou, Z.-G. (2018). Cadmium sulfide-based nanomaterials for photocatalytic hydrogen production. *Journal of Materials Chemistry A*, 6(25), 11606–11630.

Zainal, B. S., Ker, P. J., Mohamed, H., Ong, H. C., Fattah, I., Rahman, S. A., ... Mahlia, T. M. I. (2024). Recent advancement and assessment of green hydrogen production technologies.

Renewable and Sustainable Energy Reviews, 189, 113941. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032123007992> doi: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2023.113941>

Zeng, Y., Wang, Y., Chen, J., Jiang, Y., Kiani, M., Li, B., y Wang, R. (2016). Fabrication of high-activity hybrid $\text{nitio}_3/g - \text{c}_3\text{n}_4$ heterostructured photocatalysts for water splitting to enhanced hydrogen production. *Ceramics International*, 42(10), 12297–12305. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0272884216305855> doi: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.04.177>

Zuriaga, I. G. (2021). Retos del hidrógeno verde. *Economía aragonesa*(73), 103–129.

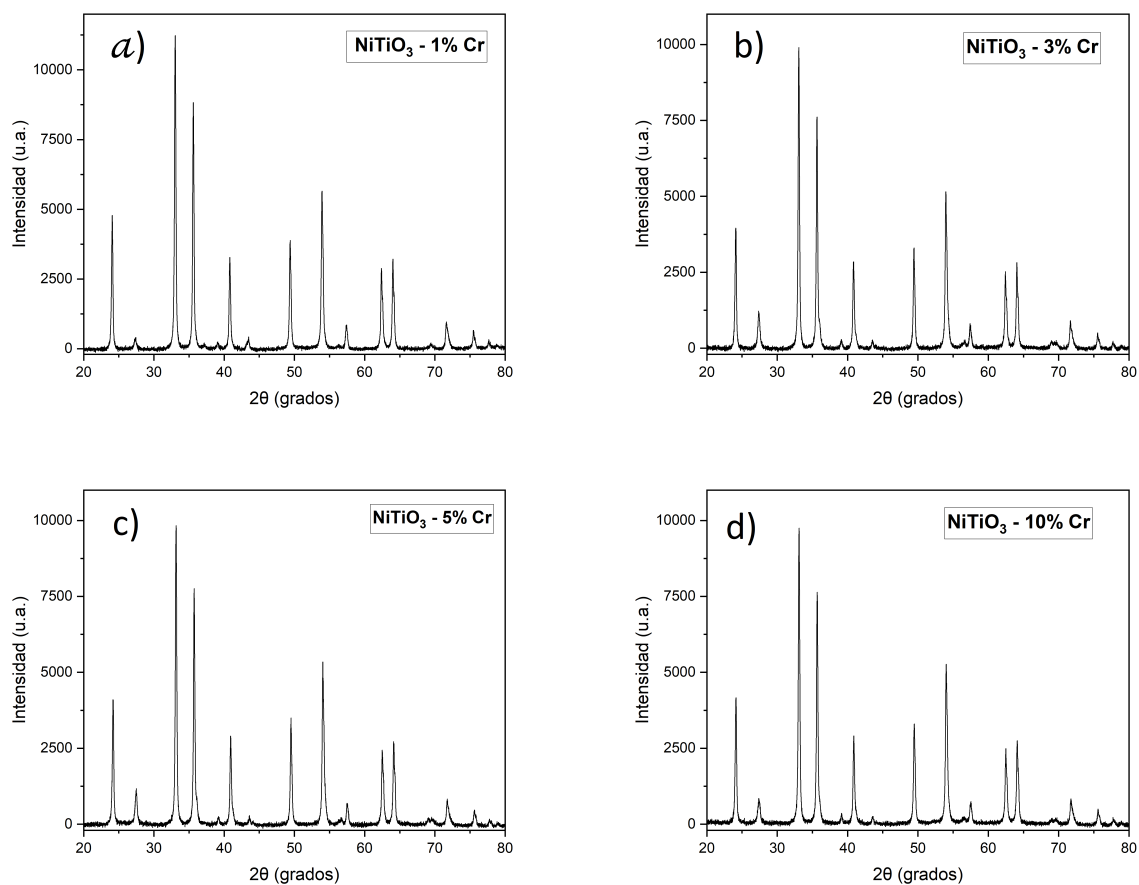
Anexos

ANEXO A

Difractograma de nanopartículas de Titanato de Niquel dopado con Cromo ($NiTiO_3/Cr$)

Figura 39

(a) Difractograma de $NiTiO_3$ 1 %Cr, (b) Difractograma de $NiTiO_3$ 3 %Cr, (c) Difractograma de $NiTiO_3$ 5 %Cr y (d) Difractograma de $NiTiO_3$ 10 %Cr

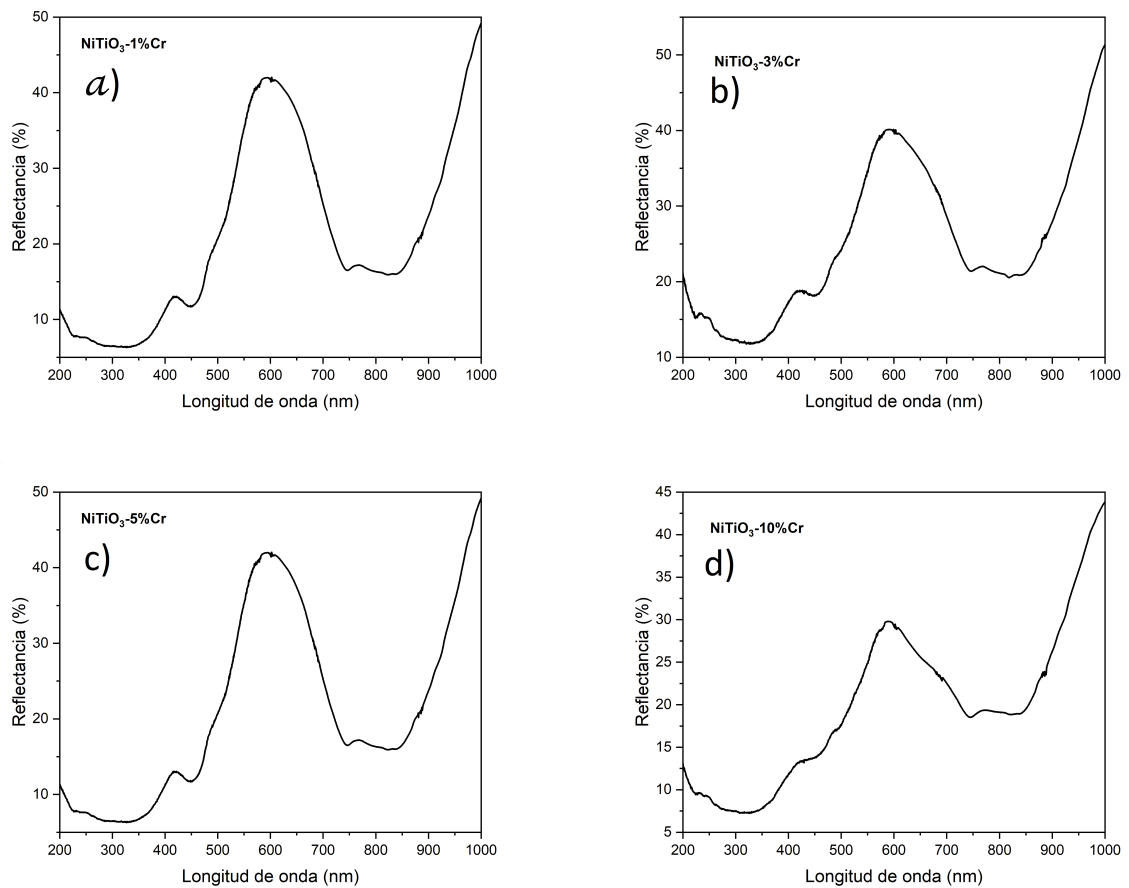


ANEXO B

Espectro de reflectancia difusa UV-visible (UV-vis) de nanopartículas de Titanato de Niquel dopado con Cromo ($NiTiO_3/Cr$) ($NiTiO_3/Cr$)

Figura 40

(a) Espectro UV-vis de $NiTiO_3$ 1%Cr, (b) Espectro UV-vis de $NiTiO_3$ 3%Cr, (c) Espectro UV-vis de $NiTiO_3$ 5%Cr y (d) Espectro UV-vis de $NiTiO_3$ 10%Cr

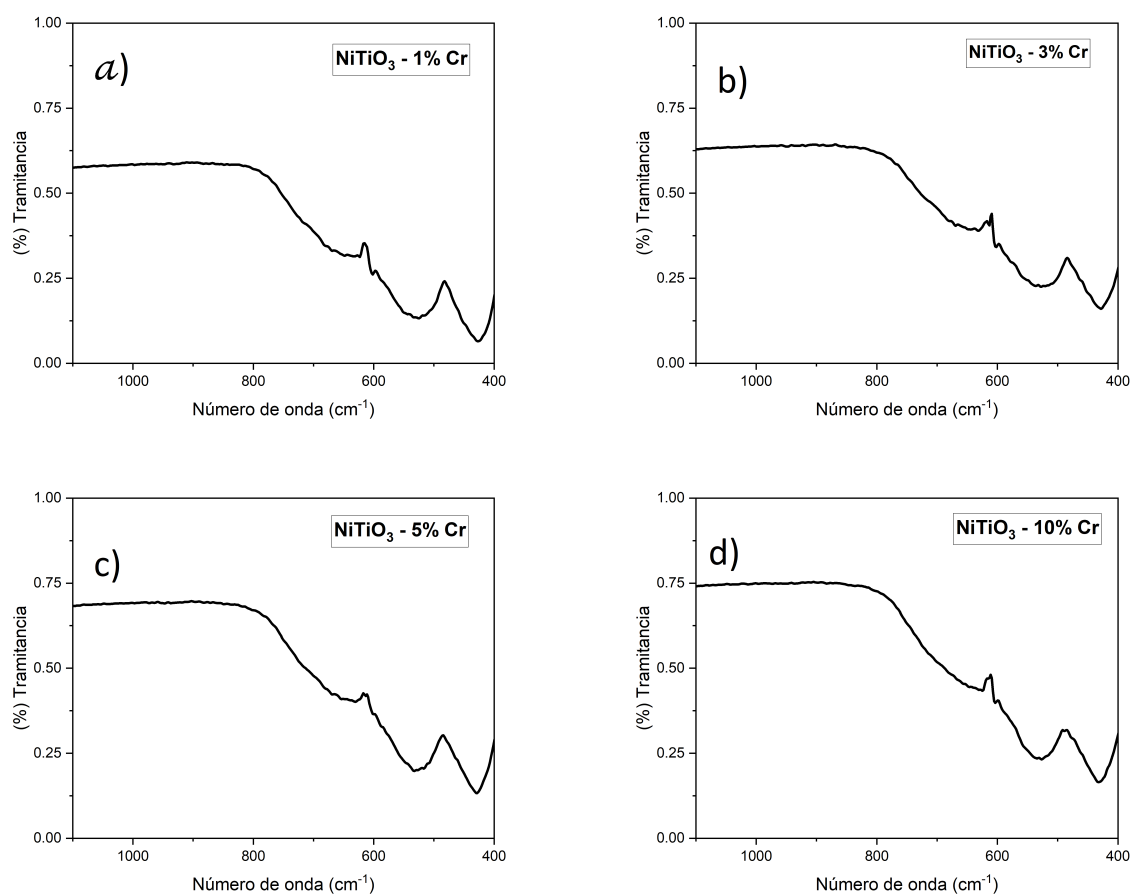


ANEXO C

Espectroscopía infrarroja de transformada de Fourier (FTIR) de nanopartículas de Titanato de Níquel dopado con Cromo ($NiTiO_3/Cr$)

Figura 41

(a) FTIR de $NiTiO_3$ 1%Cr, (b) FTIR de $NiTiO_3$ /3%Cr, (c) FTIR de $NiTiO_3$ /5%Cr y (d) FTIR de $NiTiO_3$ /10%Cr

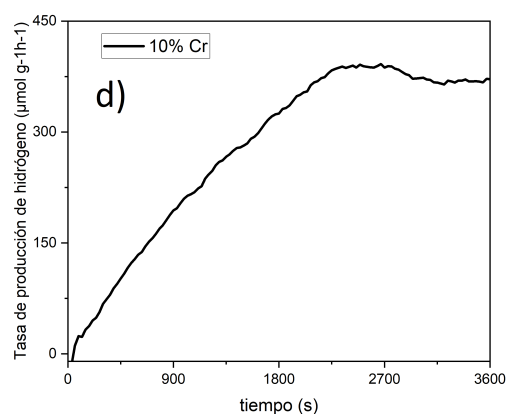
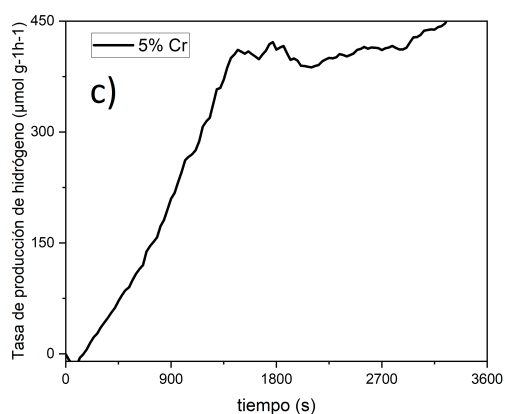
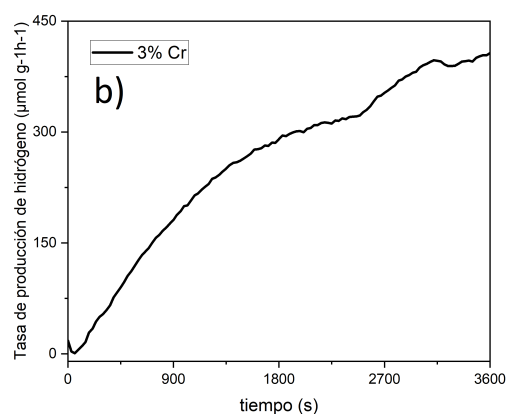
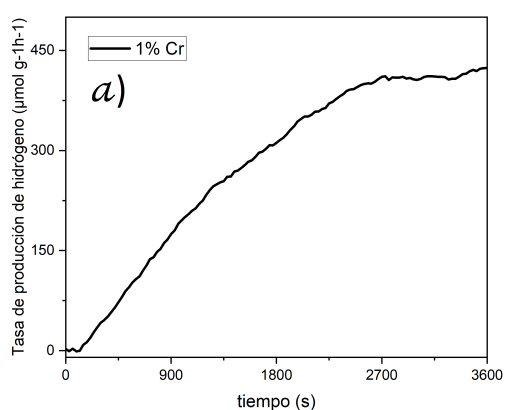


ANEXO D

Tasa de producción de hidrógeno verde de nanopartículas de Titanato de Niquel dopado con Cromo ($NiTiO_3/Cr$)

Figura 42

(a) Tasa de producción de hidrógeno para el $NiTiO_3/1\%Cr$, (b) Tasa de producción de hidrógeno para el $NiTiO_3/3\%Cr$, (c) Tasa de producción de hidrógeno para el $NiTiO_3/5\%Cr$ y (d) Tasa de producción de hidrógeno para el $NiTiO_3/10\%Cr$

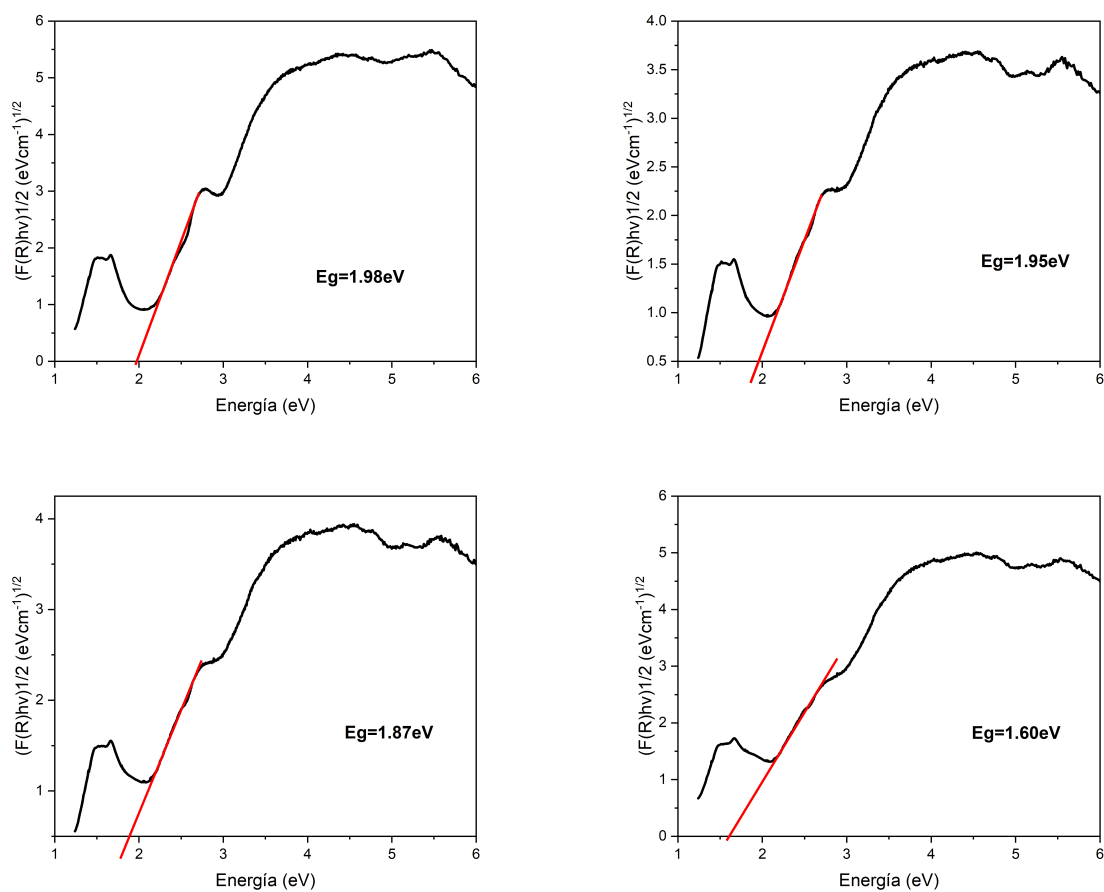


ANEXO E

Cálculo de banda prohibida (band gap) de nanopartículas de Titanato de Niquel dopado con Cromo ($NiTiO_3/Cr$)

Figura 43

(a) Band Gap de $NiTiO_3/1\%Cr$, (b) Band Gap de $NiTiO_3/3\%Cr$, (c) Band Gap de $NiTiO_3/5\%Cr$ y (d) Band Gap de $NiTiO_3/10\%Cr$



ANEXO F

Gráfico de barras de la tasa de producción de hidrógeno de nanopartículas de Titanato de Níquel dopado con Cromo ($NiTiO_3/Cr$)

Figura 44

Gráfico de barras de la tasa de producción del $NiTiO_3/Cr$

