

Ajuste de las propiedades estructurales de molibdatos de lantano a través de la modificación de los entramados catiónicos y aniónicos

J.M. Porras-Vázquez¹, M. Bergillos-Ruiz¹, A. López-Vergara¹, D. Marrero-López², E.R. Losilla¹

¹Universidad de Málaga, Dpto. de Química Inorgánica, 29071-Málaga, España

²Universidad de Málaga, Dpto. de Física Aplicada I, Laboratorio de Materiales y Superficies (Unidad Asociada al C.S.I.C.), 29071-Málaga, España

Los materiales basados en molibdatos de lantano, con fórmula general $\text{La}_{6-x}\text{MoO}_{12-\delta}$, son candidatos a membranas de separación de hidrógeno debido su conductividad electrónica y protónica. Estos cristalizan en diferentes estructuras en función de la velocidad de enfriamiento, estructuras cúbicas si son enfriados súbitamente, o estructuras romboédricas si lo son a 50 o 0.5 °C·min⁻¹ [1]. Por otro lado, recientemente ha sido descubierto que la sustitución de Mo por Nb lleva a la estabilización de polimorfos de mayor simetría.

Aparte de la aproximación tradicional de modificar la red catiónica de un material para mejorar sus propiedades, recientemente se está actuando sobre la subred de oxígenos, sustituyéndolos por átomos de flúor. Esta estrategia ha sido implementada con éxito en materiales tipo perovskita, con mejoras en los flujos de permeabilidad de oxígeno [2], o en materiales tipo $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$, con modificaciones en sus propiedades de transporte [3].

En este trabajo se ha procedido a la modificación simultánea de la red catiónica y aniónica, a través de la incorporación de niobio y flúor, respectivamente, en molibdatos de lantano, con fórmula general $\text{La}_{5.4}\text{Mo}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_{12-y-\delta}\text{F}_y$. Esta estrategia combinada da lugar a la fase de más alta simetría a baja temperatura (Figura 1).

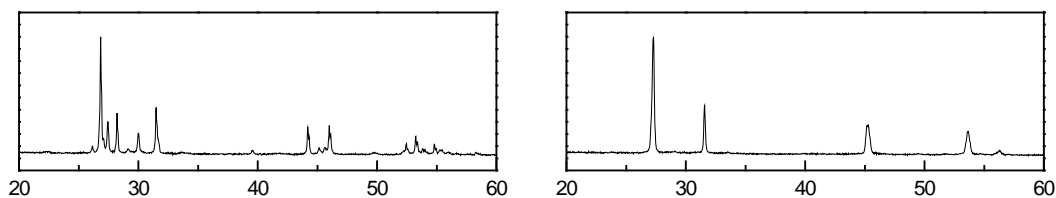


Figura 1. Difractogramas de rayos-X de $\text{La}_{5.4}\text{Mo}_{0.9}\text{Nb}_{0.1}\text{O}_{11.05}$ sin fluorar (a) y fluorado (b), ambos calcinados a 1200 °C por 1 h.

Referencias

- [1] A. López-Vergara, J.M. Porras-Vázquez, A. Infantes-Molina, J. Canales-Vázquez, A. Cabeza, E.R. Losilla, D. Marrero-López, *Chem. Mater.*, **2017**, 29, 6966-6975.
- [2] J. Zhu, G. Liu, Z. Liu, Z. Chu, W. Jin and N. Xu, *Adv. Mater.* **2016**, 28, 3511–3515.
- [3] A. Arulraj, F. Goutenoire, M. Tabellout, O. Bohnke and P. Lacorre, *Chem. Mater.*, **2002**, 14, 2492-2498.