

Heterogeneidad Estructural en un Nuevo Oxicarbonato de Bario y Níquel Estudiada por STEM con Resolución Atómica

D. Gutiérrez-Martín¹, M. Hernando¹, A. Torres-Pardo^{1,2}, J.M. González-Calbet^{1,2},
 A. Varela¹ and M. Parras¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Universidad Complutense de Madrid, España, dangut04@ucm.es

² ICTS Centro Nacional de Microscopía Electrónica, Universidad Complutense de Madrid, España

La emergencia climática global pone de manifiesto la necesidad de desarrollar nuevos catalizadores para poder establecer procesos de reducción-oxidación que permitan sustituir los combustibles fósiles como fuente de energía. En este contexto, se ha estudiado el sistema Ba-Ni-O como un posible candidato para la electrocatálisis debido a su recientemente descrita capacidad como agente catalizador de la oxidación del agua (OER)^[1]. Teniendo en cuenta que el área superficial de un sólido es un aspecto fundamental para su utilización como catalizador, se han utilizado métodos de síntesis por vía húmeda que den lugar a sólidos con pequeño tamaño de partícula.

En el intento de obtener nanopartículas de BaNiO₃ por el método sol-gel, se ha obtenido un nuevo oxicarbonato de bario y níquel estrechamente relacionado con la fase Ba₃Co₂O₆(CO₃)_{0.60}^[2]. Una primera caracterización microestructural muestra que todos los cristales presentan un cierto grado de heterogeneidad (Figura 1) observándose zonas con superestructura de orden 3 a lo largo de la dirección (100) que intercrecen con zonas sin orden extra. La combinación de técnicas de Microscopía Electrónica de Transmisión de resolución atómica (STEM, STEM-EELS, STEM-EDS) apoyadas a su vez por datos de Difracción de Neutrones, ha permitido proponer un modelo estructural para la muestra de composición Ba₃Ni₂O₆(CO₃)_x.

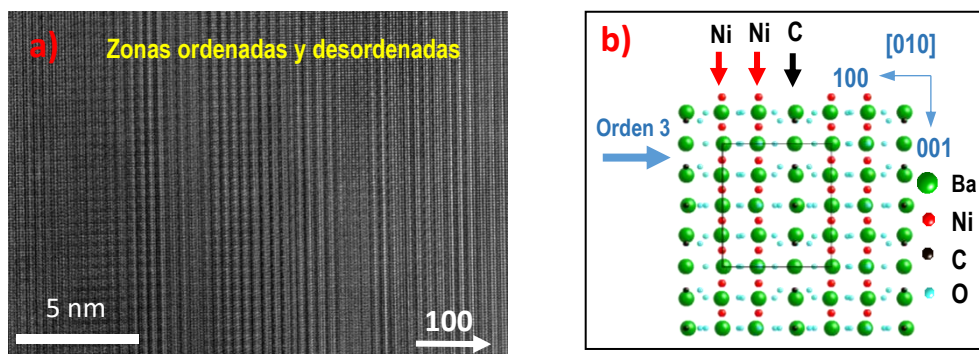


Figura 1.a) Imagen de HRTEM de un cristal con intercrecimiento de zonas con superestructura de orden 3 a lo largo de la dirección (100) y zonas sin orden. b) Modelo estructural de Ba₃Ni₂O₆(CO₃)_{0.6}.

Referencias

[1] J. G. Lee *et al*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, 138, 3541-3547

[2] K. Boulahya *et al*, *Chem. Mater.*, **2000**, 12, 966-972