

De hidróxidos laminares híbridos a nanocompuestos metálicos: una transformación topoquímica revelada *in situ* por rayos X

M. Gimenez¹; Pía Quiroga Argañaraz^{1,2}; Camilo Jaramillo-Hernández³; Víctor Oestreicher³; Cristián Huck-Iriart⁴; Gonzalo Abellán³; Martín Mizrahi^{1,2}

¹ Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, calle 1 esq. 47, 1900, La Plata, Argentina.

² Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)-Departamento de Química de Facultad de Ciencias Exactas Universidad Nacional de La Plata, CCT La Plata – CONICET, diagonal 113 y 64, 1900, La Plata, Argentina.

³ Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universidad de Valencia, Catedrático José Beltrán 2, 46980, Paterna, Valencia, España.

⁴ ALBA Synchrotron light source, Carrer de la Llum 2-26, 08290 Cerdanyola del Vallès, Barcelona, España.

gimenez.melina@alu.ing.unlp.edu.ar

Área temática: A. Síntesis de nanomateriales

Los nanocompuestos (NCs) constituidos por nanopartículas metálicas embebidas en matrices carbonosas presentan gran interés para aplicaciones energéticas, particularmente en dispositivos de almacenamiento y conversión de energía, debido a la combinación de propiedades redox, conductividad eléctrica y estabilidad estructural.[1,2] En este trabajo se estudió la transformación de hidróxidos laminares (LHs) híbridos basados en Co en nanocompuestos metálicos/carbonosos, poniendo especial énfasis en cómo la longitud de los aniones dicarboxílicos interlaminares influye sobre el mecanismo de formación del material final.

Para ello se realizaron experimentos *in situ* de difracción de rayos X en polvo (PXRD) y espectroscopía de absorción de rayos X en la región cercana al borde (XANES), que permitieron seguir en tiempo real la evolución estructural y electrónica de los precursores durante la descomposición térmica bajo atmósfera inerte. Los resultados mostraron que, al aumentar la temperatura, los LHs experimentan inicialmente una transformación desde la fase laminar hacia una fase intermedia de óxido metálico. Sin embargo, la evolución posterior depende fuertemente de la longitud de la molécula orgánica intercalada y, en consecuencia, del contenido de carbono disponible en el sistema.

En las muestras con cadenas cortas, la transformación conduce principalmente a una fase de CoO que recrystaliza a altas temperaturas, observándose sólo una reducción parcial hacia Co metálico. En cambio, en las muestras con cadenas más largas, la fase óxido intermedia se reduce completamente y se forma el nanocompuesto final, compuesto por nanopartículas metálicas dispersas en una matriz carbonosa. PXRD permitió identificar las transiciones de fase y los procesos de recrystalización, mientras que XANES aportó información clave sobre los cambios en el estado de oxidación del Co, revelando la reducción progresiva desde Co(II) hasta Co(0).

En conjunto, los resultados muestran que la formación de estos nanocompuestos está gobernada por un mecanismo de transformación topoquímica en el que la naturaleza del anión interlaminares y la cantidad de carbono disponible controlan tanto la reducción del óxido intermedio como la generación de la matriz carbonosa. Estos hallazgos resaltan la importancia de combinar técnicas *in situ* complementarias para comprender los mecanismos de formación de materiales complejos y avanzar hacia el diseño racional de nanocompuestos basados en hidróxidos laminares.

REFERENCIAS

1. P. Ares, J. J. Palacios, G. Abellán, J. Gómez-Herrero, F. Zamora, *Adv. Mater.* 30 (2018) 1703771.
2. J. Romero, H. Prima-García, M. Varela, S. G. Miralles, V. Oestreicher, G. Abellán, E. Coronado, *Adv. Mater.* 31 (2019) 1900189.