

M. Santos-Beltrán^a, A. Santos-Beltrán^{a, b} F. Paraguay-Delgado^a

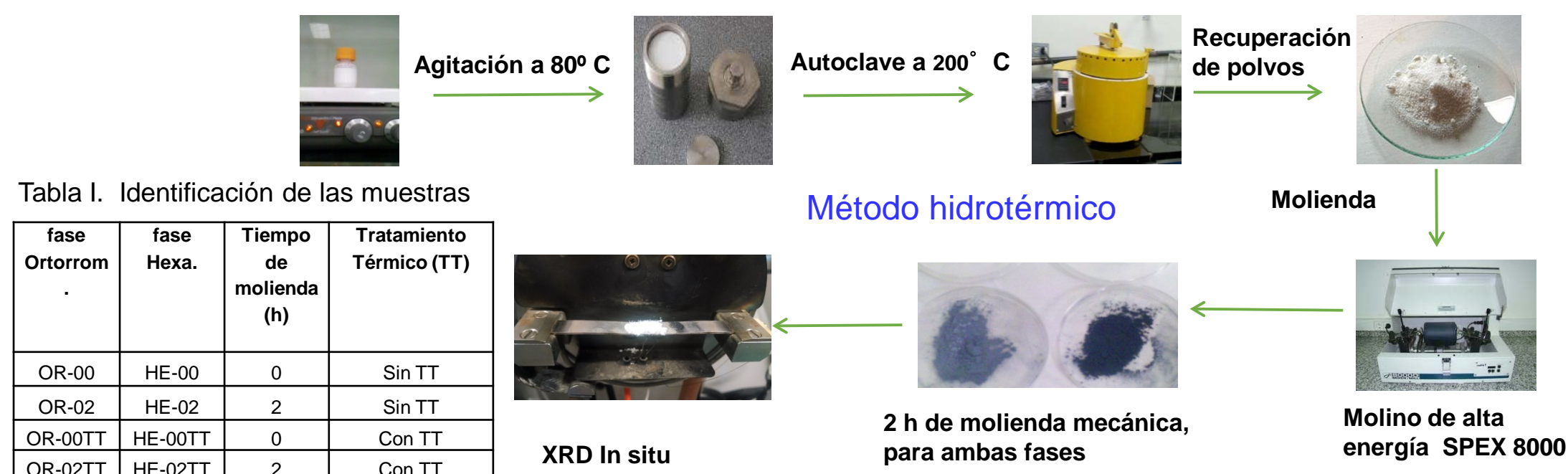
^aCentro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Miguel de Cervantes No. 120, C.P.31136, Chihuahua, Chih., México

^bUniversidad Tecnológica de Chihuahua (UTECH Sur), Carretera Aldama Km. 3, C. P. 31050. Chihuahua, Chih. México.

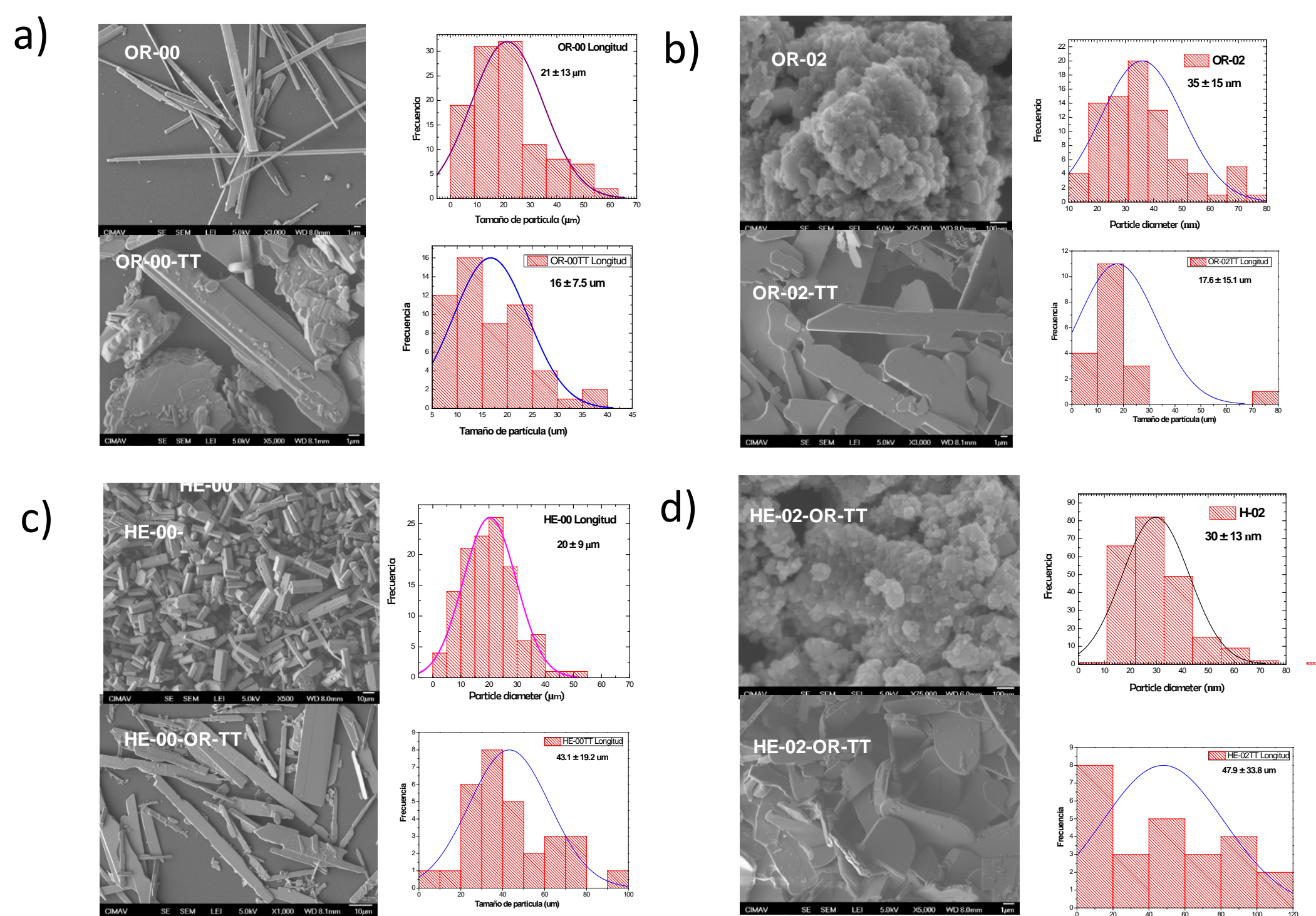
Introducción

El trióxido de molibdeno es un semiconductor con aplicaciones en sensores de gas [1], catálisis [2] y electrodos de baterías ion Litio [3] entre otras. La transición entre sus diferentes estructuras cristalinas y los cambios en parámetros de red se presentan al ser sometido a diferentes temperaturas, es de interés sobre todo para la fase hexagonal metaestable, para aplicaciones en sensado de gas. La evolución del tamaño del cristal, los cambios en los parámetros de red, la cuantificación de las microtensiones incluyendo el cambio de la concentración de vacantes de oxígeno fueron analizados, haciendo tratamientos térmicos in situ en el difractor de rayos-X, para temperaturas de 25-680 °C. Los resultados fueron refinados por el método Rietveld, para obtener los parámetros mencionados.

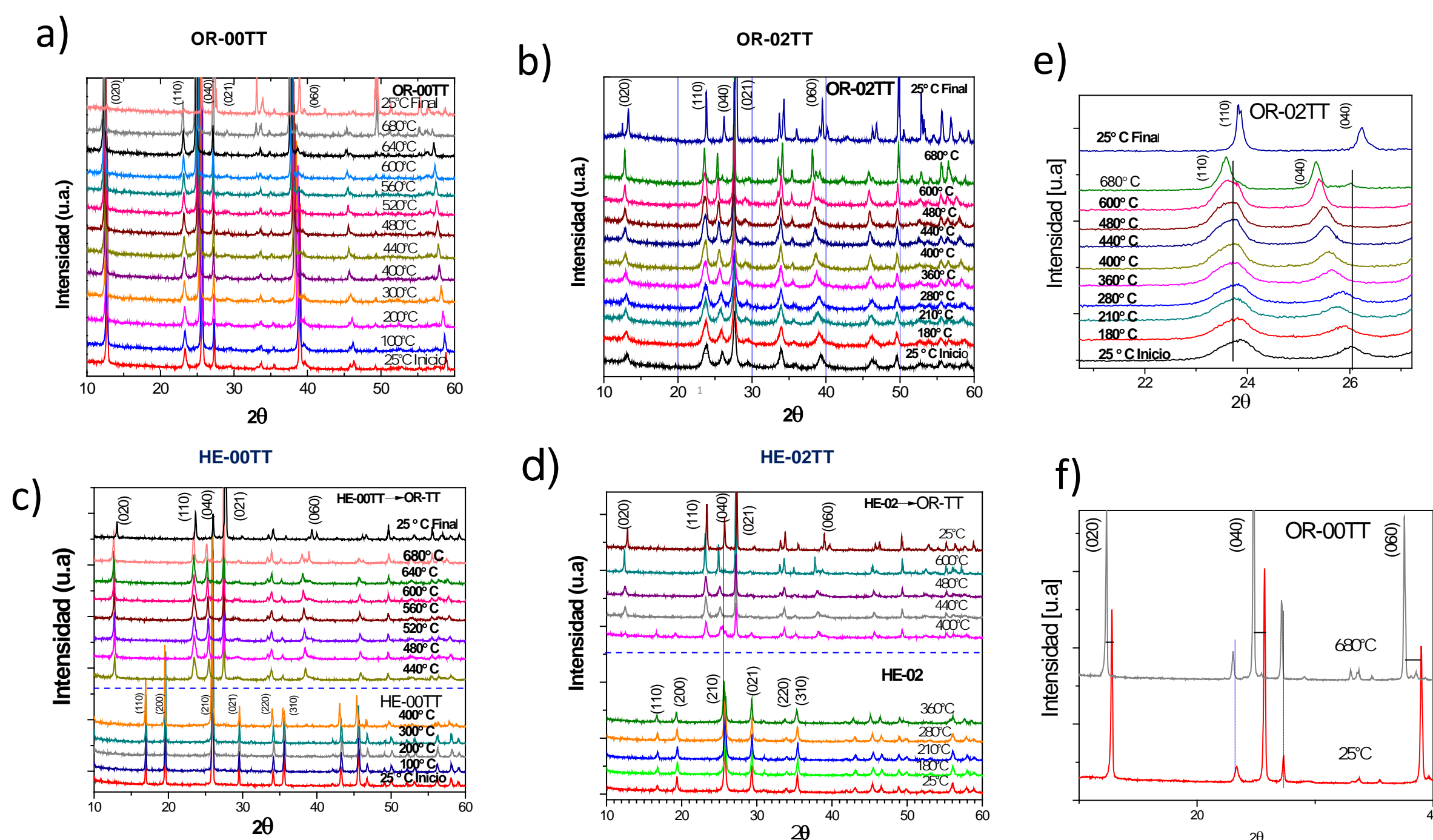
Procedimiento experimental



Análisis morfológico



DRX a diferentes temperaturas



Referencias

- [1] Khojier, H. Savaloni, S. Zolghadra Applied Surface Science, Volume 320, 30 November 2014, Pages 315-321.
- [2] A. Chithambararaj, N. S. Sanjini, S. Velmathib and A. Chandra Bose Phys. Chem. Chem. Phys., 2013, 15, 14761—14769.
- [3] Arumugam Manivel, Gang-Juan Lee, Chin-Yi Chen, Jing-Heng Chen, Shih-Hsin Ma, Tzzy-Leng Horng d, Jerry J. Wu. Materials Research Bulletin 62 (2015) 184–191
- [4] Santos-Beltrán M, Paraguay-Delgado F, Santos-Beltrán, A, & Fuentes L. (2015). Getting nanometric MoO₃ through chemical synthesis and high energy milling. *Journal of Alloys and Compounds*, 648, 445-455.

Variación de parámetros en función de la temperatura obtenidos por el método Rietveld

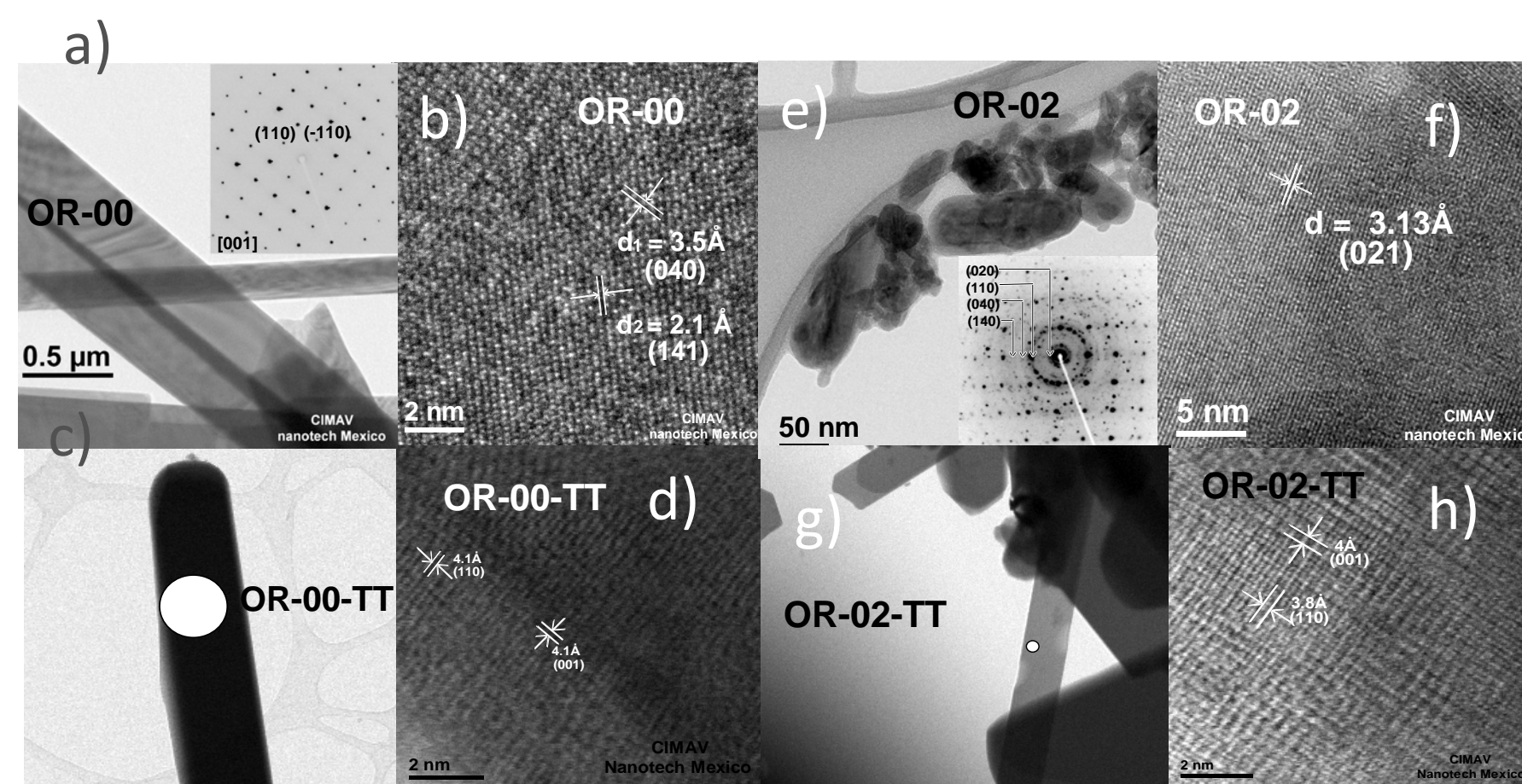
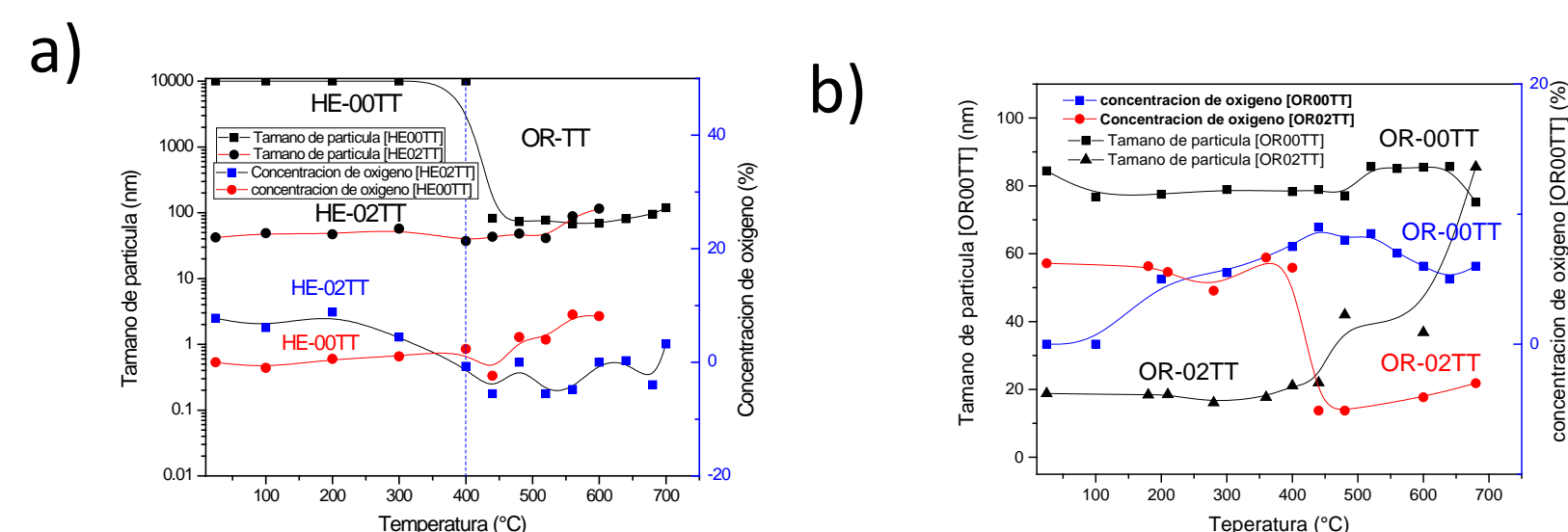
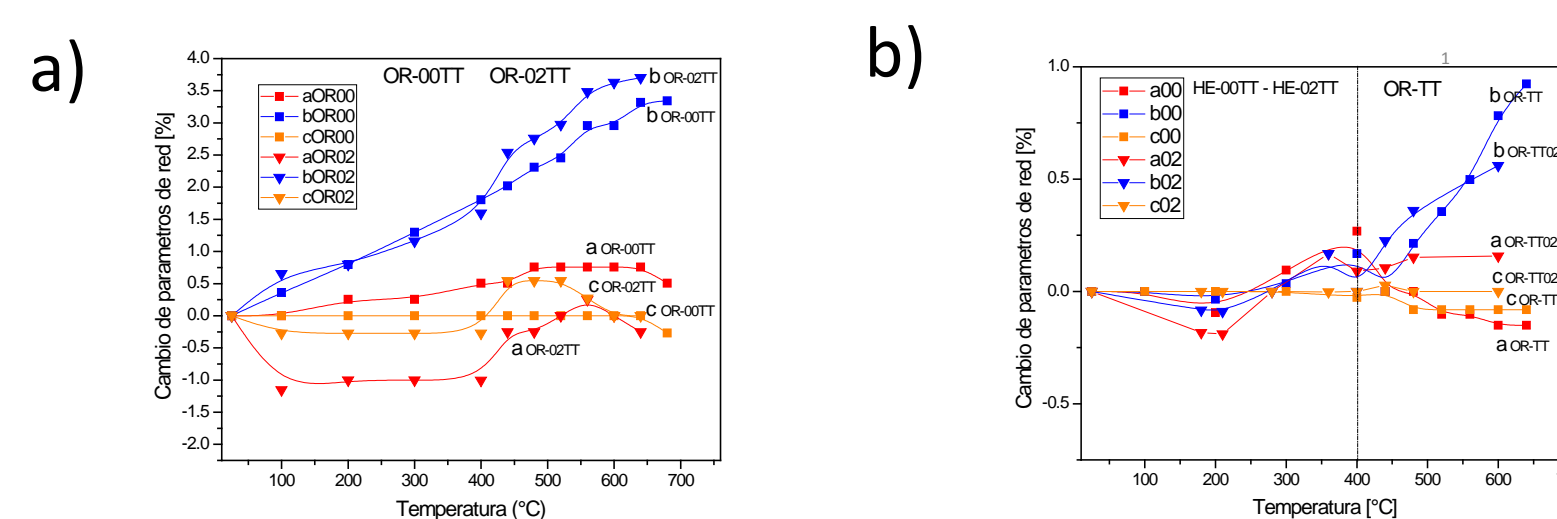


Fig. 5. Morfología de la fase ortorrómbica antes y después del tratamiento térmico, para OR-00 [4] y OR-02, Imagen MET, Imágenes de alta resolución con distancias interplanares y patrones de difracción SAED.

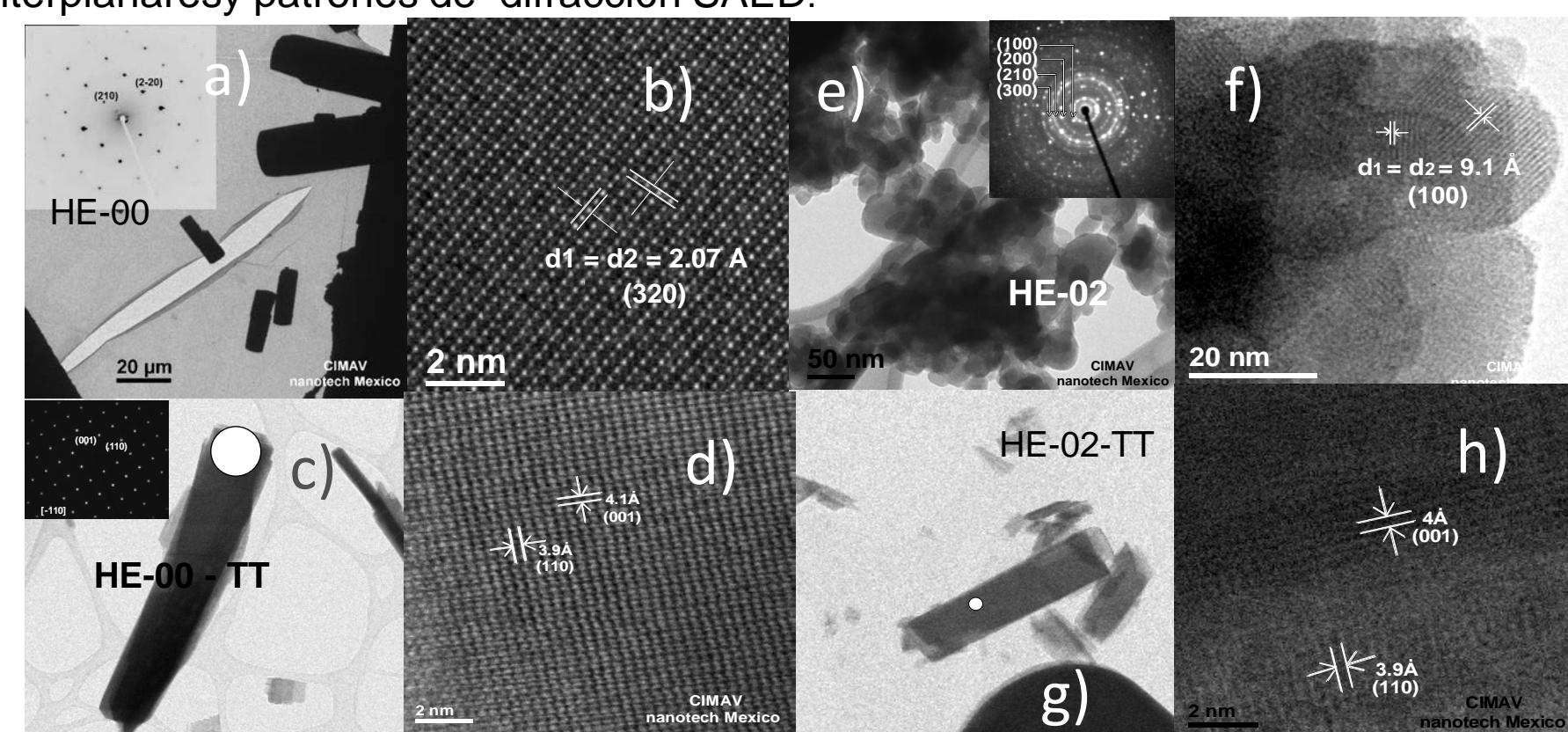
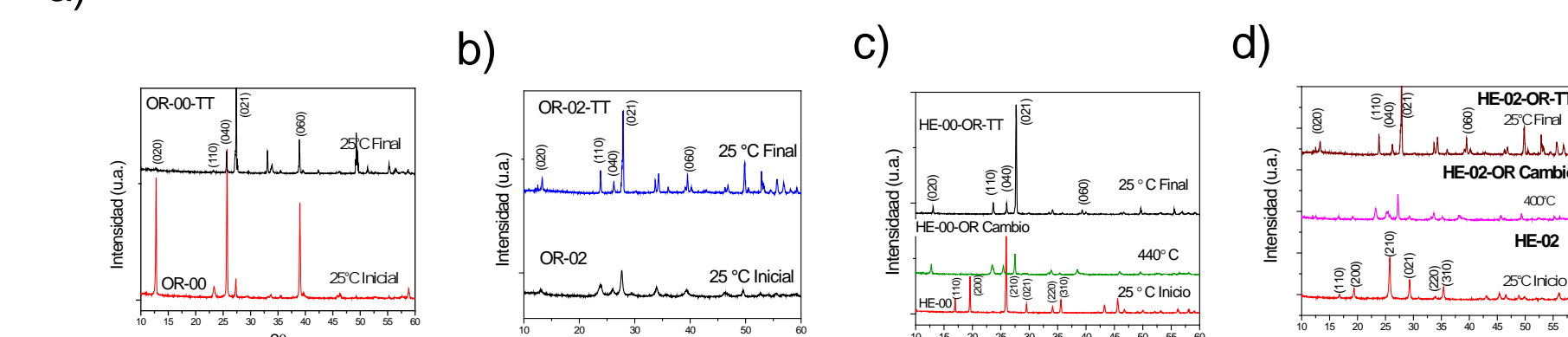


Fig. 6. Morfología de la fase hexagonal antes y después del tratamiento térmico, para HE-00 [4] y HE-02, Imagen MET, Imágenes de alta resolución con distancias interplanares y patrones de difracción SAED.



Conclusión

El MoO₃ en ambas fases hexagonal y ortorrómbica, presenta cambios por tratamiento térmico. Los parámetros de red a, b y c presentan un incremento, también el tamaño del cristal tiene una tendencia a aumenta. Inicialmente las muestras con molinillo mecánica presentan una ligera concentración de vacantes de oxígeno y microtensiones, pero al incrementarse la temperatura hay una disminución en el valor de las microtensiones y las vacancias de oxígeno. La transición de la fase hexagonal a ortorrómbica es a 380 °C para tamaño nanométrico y a 420 °C para el tamaño micrométrico. Existe un cambio de morfología después del tratamiento a 680 °C, las partículas presentan una nueva orientación preferencial, al ser enfriado. Las partículas con molinillo mecánica y tratamiento térmico son estabilizados para posibles aplicaciones tecnológicas.