



Congreso Argentino de
Técnicas Neutrónicas

**CENTRO
CULTURAL
DE LA CIENCIA**

Godoy Cruz 2270
Ciudad Autónoma de Buenos Aires
Argentina

Comité Organizador

Comisión Nacional de Energía Atómica

Gabriela Aurelio (Coordinadora)

Karina Pierpauli

Juan Ferrer

Rubén Sutelman

Florencia Cantargi

Isidro Baschar

Manuel Suarez Anzorena

Cecilia Lamagna

Florencia Cosentino

Mariano Paulin

Silvia Francesca

**Secretaría de Gobierno de Ciencia,
Tecnología e Innovación Productiva**

María de la Paz Alfaro (Coordinadora)

Paula Nahirñak

Gustavo Rajher



Comité Científico

Javier Santisteban (Chair),

Comisión Nacional de Energía Atómica

Rolando Granada,

Comisión Nacional de Energía Atómica

Raúl Bolmaro,

Instituto de Física de Rosario

Heloisa Nunez Bordallo,

Neels Bohr Institute, Dinamarca

Javier Campo,

ICMA-Universidad de Zaragoza,

España

Liliana Mogni,

Comisión Nacional de Energía Atómica

Rafael Oliveira,

Universidad Nacional de Córdoba

Julián Milano,

Comisión Nacional de Energía Atómica

Javier Dawidowski,

Comisión Nacional de Energía Atómica

Sara González,

Comisión Nacional de Energía Atómica

Diego Lamas,

Universidad Nacional de San Martín

Auspiciantes

Comisión Nacional de Energía
Atómica.

Secretaría de Gobierno de Ciencia,
Tecnología e Innovación Productiva.

CONICET.

Agencia Nacional de Promoción
Científica y Tecnológica.

Fundación Balseiro.

Instituto Dan Beninson.

INVAP.

POS-8

Difracción de neutrones y simulación de caminos de conductividad en electrolitos $Sr_{11}Mo_4O_{23}$ dopados con AlC. D. Miranda¹, C. A. López¹, J. C. Pedregosa¹, J. A. Alonso², M. T. Fernández-Díaz³¹ INTEQUI- CONICET UNSL, FQByF, Área de Qca Gral e Inorg; Alte Brown 1455 (5700), San Luis, Argentina.² Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Cantoblanco, 28049 Madrid, España.³ Institut Laue-Langevin, B. P. 156, 38042 Grenoble Cedex 9, France.

Recientemente, se ha reportado un gran número de trabajos donde se mencionan materiales para componentes de celdas de combustible de óxido sólido (SOFC). Estas celdas han cobrado interés, ya que son dispositivos que pueden convertir la energía química a eléctrica en un alto porcentaje (~40-70%). Entre los desafíos actuales, se encuentra mejorar los componentes individuales, poniendo el énfasis sobre el electrolito: se busca mejorar la conductividad iónica, que sea un buen dieléctrico, y que opere a temperaturas inferiores a las actuales. En este sentido, un enfoque para generar mejores electrolitos, es aumentar la densidad de defectos en la red mediante sustituciones controladas con cationes aliovalentes. En virtud de esto, se estudió la fase $Sr_{11}Mo_4O_{23-d}$: un electrolito con estructura semejante a una perovskita doble $Sr_{1.75}SrMoO_{5.75}$, el cual posee una conductividad inferior al de electrolitos como YSZ y LSGM. No obstante, mediante sustitución de Mo(VI) por cationes como Ti(IV) o Nb(V), se logró incrementar la conductividad de 13.1 a 18.0 y 27.0 $mS\ cm^{-1}$ a 800°C, para el mejor exponente de cada familia, respectivamente. En el actual trabajo se aborda el análisis estructural avanzado y de propiedades de transporte de la familia $Sr_{11}Mo_{4-x}Al_xO_{23}$, cuya estructura fue reportada en estudios preliminares. A partir de datos de difracción de luz sincrotrón y de neutrones (DRXS y DN), y mediante análisis Rietveld fue posible: determinar con exactitud posiciones y ocupación de oxígeno; y, evidenciar que Al(III) se reparte en forma equimolar en dos sitios cristalográficos de la fase matriz, Sr3 y Mo2, dando lugar así a óxidos de fórmula $Sr_{11-y}Mo_{4-y}Al_xO_{23-d}$, para $x = 2y = 0.5, 1.0, \text{ y } 1.5$. Mediante espectroscopia de impedancia (EIS), y posterior tratamiento y análisis de espectros, se obtuvieron conductividades de 17.1, 13.4 y 10.4 $mS\ cm^{-1}$ a 800°C para fases con $x_{Al} = 1.5, 1.0 \text{ y } 0.5$, respectivamente. Finalmente, a partir del fichero CIF que se obtiene luego de refinar, se calcularon mapas electrostáticos 3D basados en la teoría de enlace-valencia (BVLE), para simular caminos más probables de conducción a nivel atómico. Los resultados del cálculo se contrastaron con energías de activación experimentales, logrando muy buena concordancia entre los mismos. Así, este resulta un enfoque interesante, capaz de predecir a nivel atómico la conductividad del material bulk, en términos de energía de activación y camino más probable.