

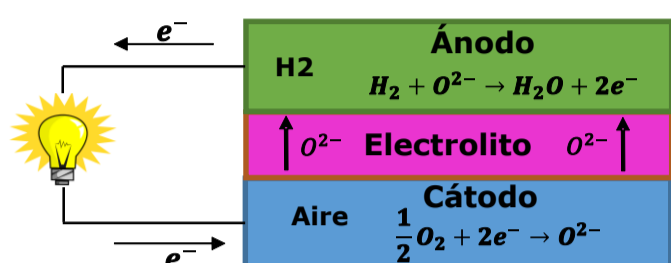
Síntesis y caracterización de perovskita tipo K_2NiF_4 nanoestructuradas de $LaSrAl_{1-x}Mg_xO_{4-\delta}$

C. Mariño¹, L. Troncoso²

¹Departamento de Física, Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile

²Instituto de Materiales y Procesos Termomecánicos, Universidad Austral de Chile, Valdivia, Chile

Celdas de Combustible de Óxido Sólido (SOFC)



- Flexibilidad de combustible
- Alta eficiencia (> 60%)
- Confiable
- Emisión prácticamente cero

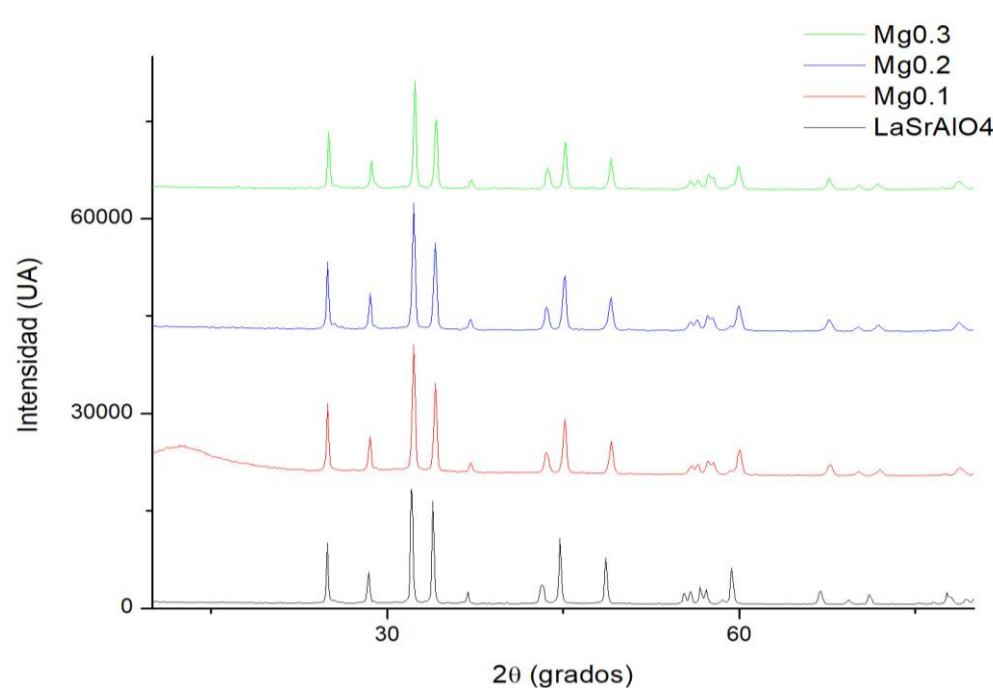
Mercado SOFC=> Disminuir temperatura de operación sin perder eficiencias en el desempeño de la celda.

- Alta temperatura de operación
- Elevado costo de materiales
- Estabilidad mecánica

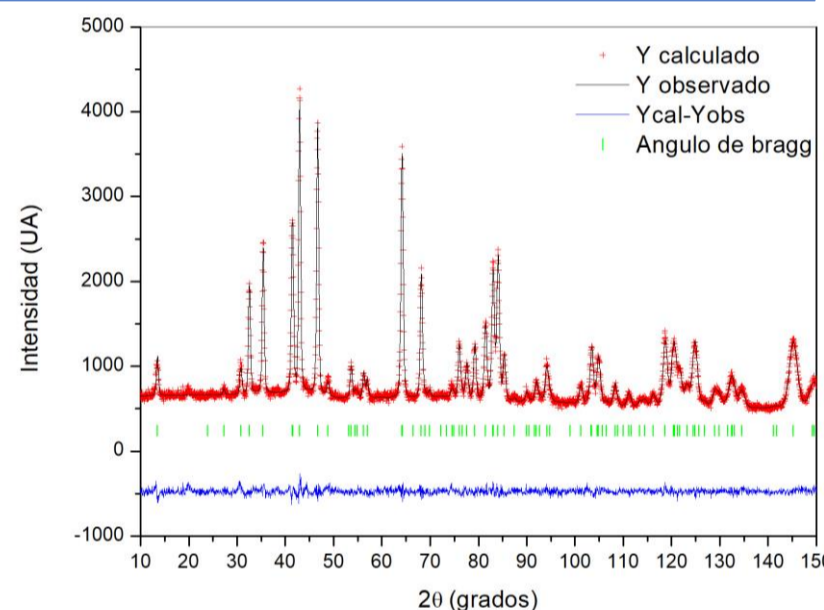
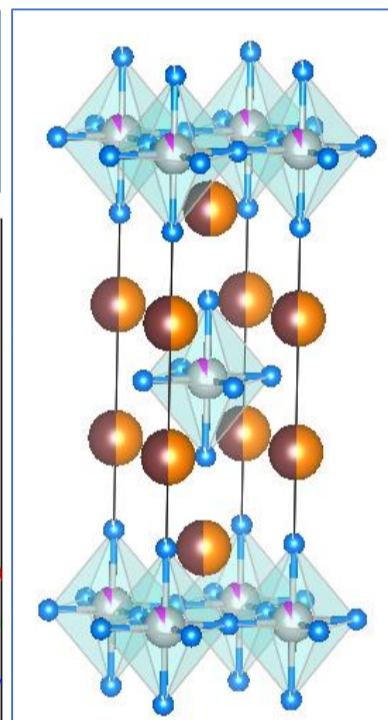
Desarrollo de nuevos materiales como electrolitos

- Baja energía de activación
- Baja resistencia eléctrica

Resultados: Difracción de rayos X y Neutrones



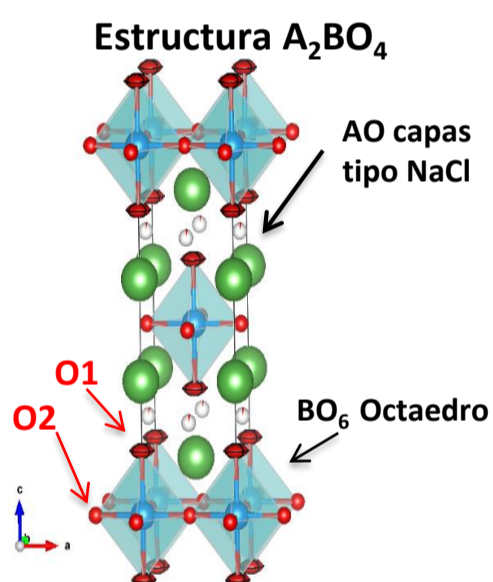
Mediante difracción de rayos X se logra caracterizar la estructura cristalina $LaSrAlO_4$, esta estructura permite la incorporación de Mg de hasta un 30% de solubilidad. También se calculó el tamaño de cristalito mediante WH.



Mediante difracción de neutrones realizada en el PSI Suiza se logró determinar los parámetros de red y volumen de la celda unidad del sistema mediante refinamiento Rietveld. Se observó que existen vacancias de oxígeno para $x=0.1$ mientras que para $x=0.2$ y 0.3 la estequiometría de los oxígenos presenta un δ inconsecuente a la estructura ya que su suma es mayor que 4. Sorprendentemente esto se debe a la inserción de moléculas de agua en el espacio intersticial lo que queda rebelado mediante NPD.

	$LaSrAlO_4$	$LaSrAl_{0.9}Mg_{0.1}O_{4-\delta}$	$LaSrAl_{0.8}Mg_{0.2}O_{4-\delta}$	$LaSrAl_{0.7}Mg_{0.3}O_{4-\delta}$
a (Å)	3.7578(2)	3.7689(1)	3.7688(2)	3.7801(1)
c (Å)	12.6486(7)	12.6761(8)	12.6834(10)	12.6877(7)
V (Å ³)	178.61(2)	180.06(1)	180.15(2)	181.30(1)
Oc O1	2	1.99(1)	2.01(4)	2.01(4)
Oc O2	2	1.95(2)	2.06(6)	1.99(2)
c ²	3.68	1.24	1.40	2.21
R _p	3.75	3.16	3.33	2.96
R _{wp}	1.91	4.00	4.17	3.93
R _{Bragg}	2.19	2.84	4.61	6.42
Cristalito (nm)	223,6	105,4	70,7	111,8

Perovskita en capas con estructura K_2NiF_4



Ruddlesden-Popper n=1
 $A_{n+1}B_nO_{3n+1}$
 Grupo espacial:
 4I/m m m

Los mecanismos de conducción iónica reportados en estos sistemas está basado en vacancias, por este motivo al momento de diseñar estos materiales hay que escoger dopantes que permitan producir un desbalance electrostático del sistema, este desbalance será equilibrado mediante la generación de vacancias de oxígeno

● La^{3+}, Sr^{2+} ● Al^{3+} ● O^{2-} ● Mg^{2+}

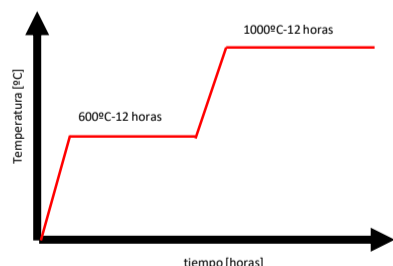
Materiales y métodos

Química suave: Técnica citrato nitrato

Recocido en aire

DRX

DNP



Refinamiento Rietveld mediante software FULLPROF

Conclusiones

Este trabajo muestra que a través del método citrato nitrato es posible dopar con magnesio la estructura perovskita tipo K_2NiO_4 basados en compuestos $LaSrAlO_4$. La solubilidad alcanzada por el método permite dopar hasta el 30% de los átomos de aluminio. El efecto de la incorporación de átomos de magnesio a la estructura produce un aumento en el volumen de la celda unidad, esto debido a que el magnesio tiene mayor radio iónico. Por otro lado el desbalance electrostático inducido por la incorporación de un átomo de valencia menor (Mg^{2+}) produce vacancias de oxígeno en la estructura, esto según los resultados expuestos en los valores de ocupación tras el refinamiento Rietveld mediante el software FULLPROF. El tamaño de cristalito de los compuestos dopados con magnesio posiciona estas perovskitas en materiales de dimensiones nanométricas.

Referencias

- [1] L. Troncoso, J. A. Alonso and A. Aguadero. Mater. Chem. A, 3 17797 (2015)
- [2] H. M. Rietveld, J. Appl. Crystallogr., 2 65 (1969)
- [3] J. Rodríguez-Carvajal, Physica B, 55 192 (1993)
- [4] Mote, V., Purushotham, Y. & Dole, B. J Theor Appl Phys 6 6 (2012)