

Las celdas de combustible de óxido sólidos (SOFC) se han convertido en uno de los dispositivos de transformación de energía más eficientes, especialmente aquellas de mediana y baja temperatura, en las cuales los principales obstáculos pueden ser solucionados, como la reactividad química entre componentes, desajuste en la expansión térmica y el alto costo de los materiales que pueden soportar temperaturas de transformación por encima de 800°C.

En este estudio, un doble perovskita $Ba_{0.5}Sr_{1.5}Co_{1.6-x}Ni_xFe_{0.4}O_{6-\delta}$ ($0.025 \leq x \leq 0.2$) ha sido sintetizado a través de un proceso de sol-gel modificado, utilizando EDTA como agente quelante, la estructura cristalina de los polvos resultantes fue caracterizada usando difracción de rayos X, refinamiento Rietveld, y la expansión térmica de la cerámica se evaluó en atmósfera de aire 700°C. Y se ha demostrado que tiene un cambio en su coeficiente de dilatación térmica alrededor de 400°C, sin importar el contenido de Ni. Con el fin de entender este comportamiento, se llevaron a cabo estudios de difracción de rayos x y DSC-TGA, revelando que ninguna transformación de fase se lleva a cabo durante la prueba del cátodo, lo que indica una expansión de la consecuencia celda unidad de la reducción de cationes del sitio B.

Palabras clave: La síntesis química; Celdas de combustible de óxido sólido; estructura cristalina.

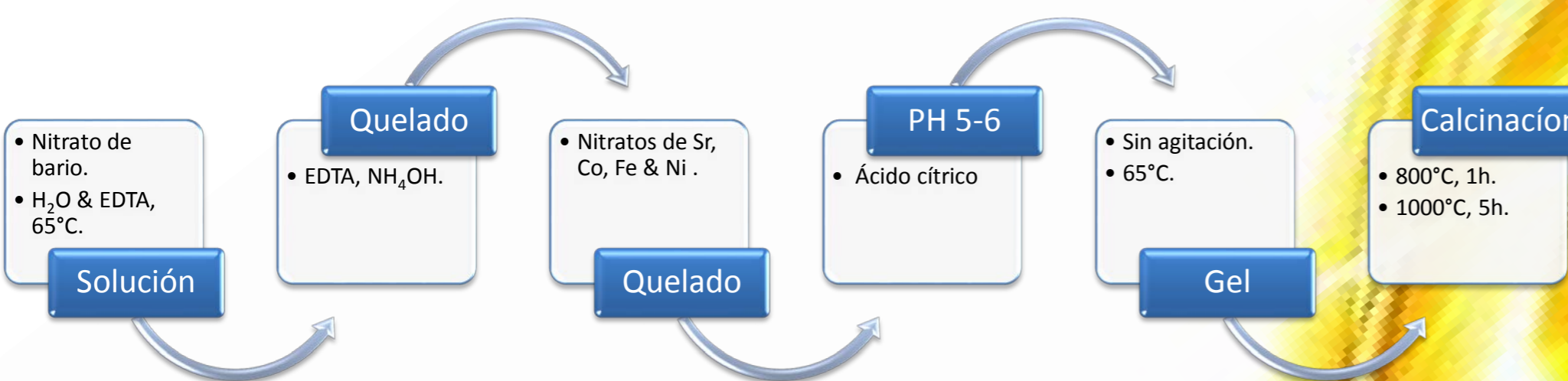
Introducción:

Las celdas de combustible de óxido sólido es una tecnología respetuosa con el medio ambiente y eficiente para la generación de energía eléctrica, pero debido a sus altas temperaturas de operación y que el costo de producción es todavía elevado. Uno de los enfoques para hacer que esta tecnología sea más competitiva, es bajando la temperatura operativa, sin embargo, los materiales más utilizados presentan una baja actividad a temperaturas inferiores a 1.000 ° C, y la conductividad eléctrica también se ve afectada. Con el fin de superar estos problemas, es necesario la utilización de materiales alternativos, capaces de producir densidades de alta potencia a bajas temperaturas (650-400 ° C), al igual que los materiales MIEC, un ejemplo es la perovskita $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-}$, en este trabajo una doble perovskita $Ba_{0.5}Sr_{1.5}Co_{1.6-x}Ni_xFe_{0.4}O_{6-\delta}$ (BSCNF) se sintetizó y caracterizó.

Procedimiento experimental:

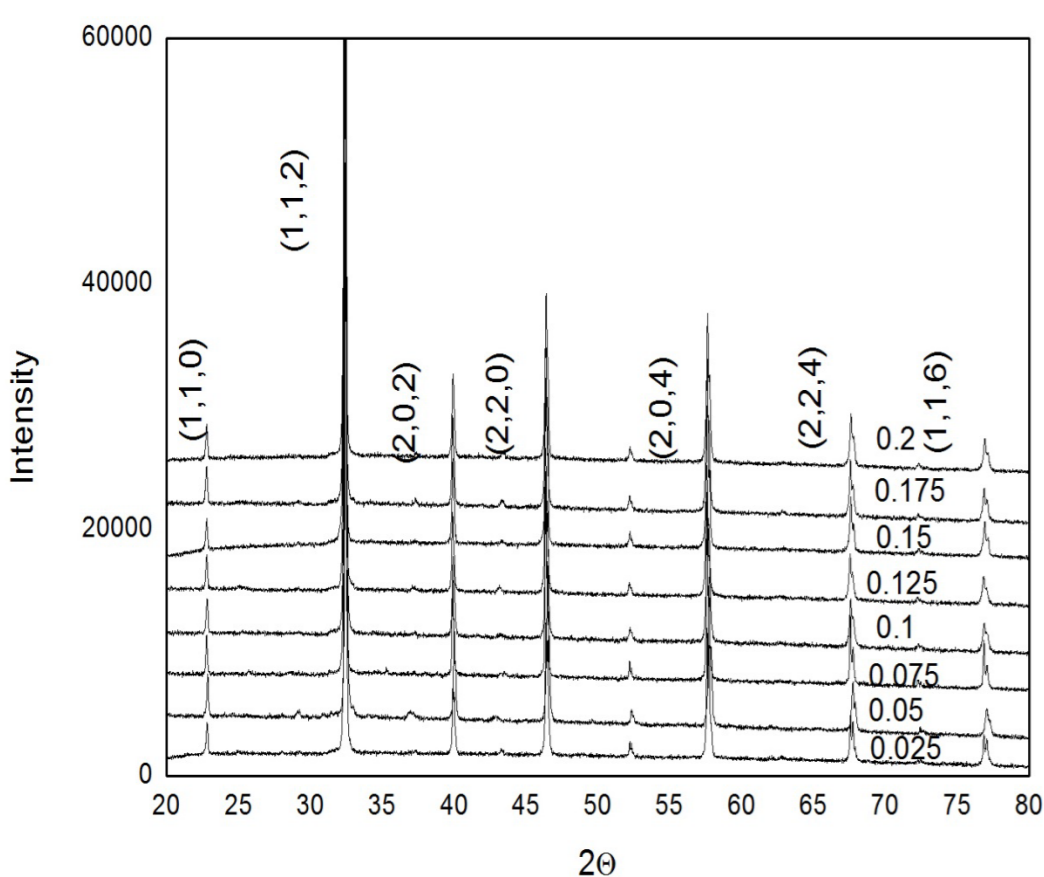
Los polvos BSCNF se fabricaron a través de Sol-Gel, utilizando EDTA como agente quelante, en H_2O a 65 °C. A continuación, se calcinó a 800 °C 1h, y finalmente a 1000 °C durante 5 hrs. Los polvos resultantes se analizaron por difracción de rayos X (DRX) en un difractómetro PANalytical X-Pert Pro, y su coeficiente de expansión térmica (TEC) se obtuvo en un TMA modelo Q400, desde 25 °C a 800 °C en atmósfera estática usando una velocidad de calentamiento de 5 °C/min. Para llevar a cabo este estudio, los polvos BSCNF fueron convertidos en pellets por la vía de cerámica convencional. Se encontró que el material exhibió un TEC diferente por encima de 400 °C como la gráfica de TMA lo muestra. Para entender este comportamiento, un análisis de difracción de rayos X a alta temperatura y un DTA-TGA se llevó a cabo, a partir de 25 °C a 800 °C. El software Fullprof se utilizó para realizar un refinamiento de Rietveld con el fin de entender el comportamiento de la expansión en la celda unitaria. Con el objetivo de probar el rendimiento de este material, BSCNF fue utilizado como cátodo en celdas individuales y se comparó con otras celdas similares construidas con el LSM como cátodo. Mediante la medición de las curvas de polarización de las celdas, fue posible determinar el rendimiento superior de la BSCNF sobre el cátodo LSM.

Síntesis por Sol-Gel:



Resultados y discusión:

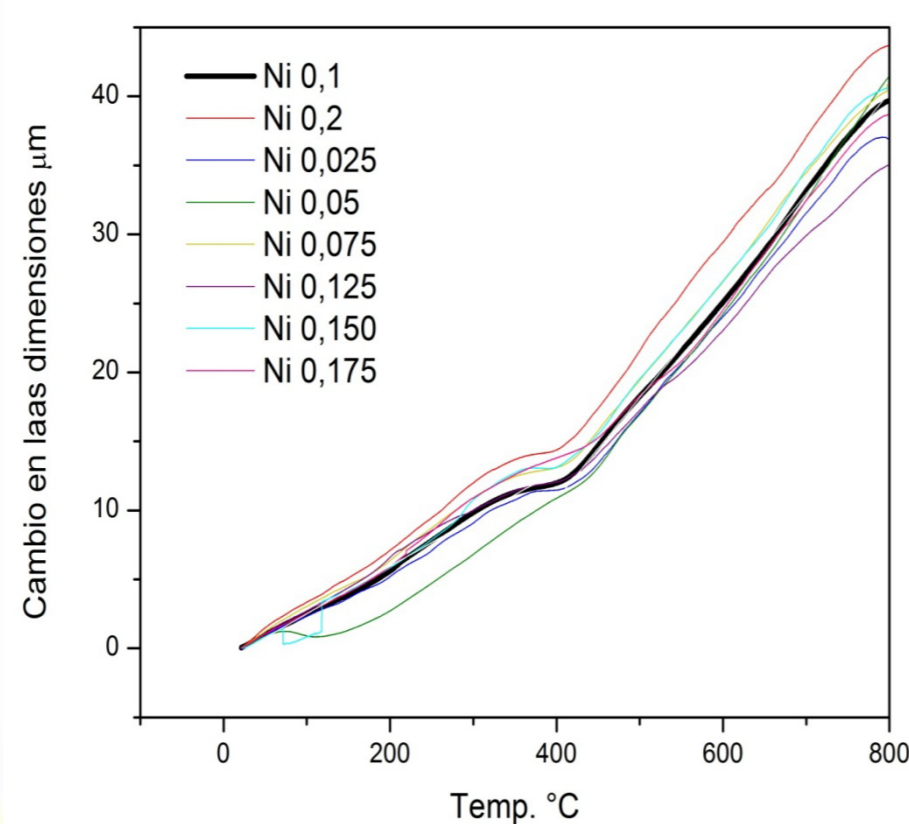
Difracción de rayos-X:



Puede ser indexada en el grupo espacial: SG. I 4/m m m (tetragonal).

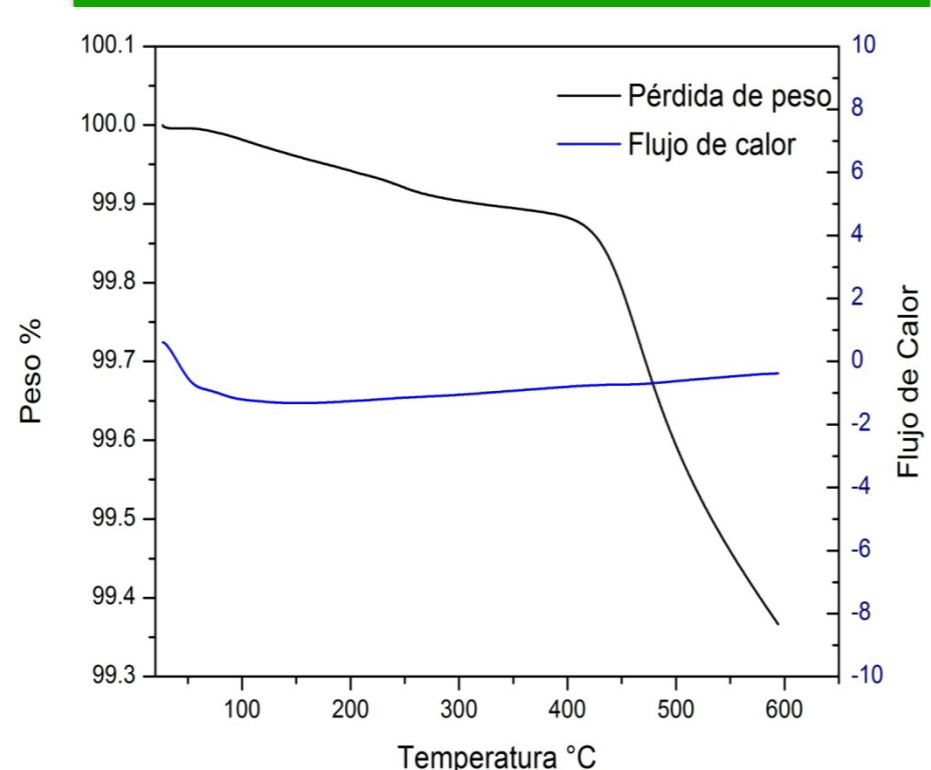
El análisis de TMA muestra, todas las composiciones, el BSCNF presenta un cambio en su TEC, sobre los 400 °C. Y la DTA-TGA de una sola composición (0,1% de Ni) muestra una ligera pérdida de masa alrededor de la misma temperatura, además, no se encontró una transición de fase en el rango de temperatura medido. La estructura cristalina fue modelada en Vesta.

Análisis TMA:



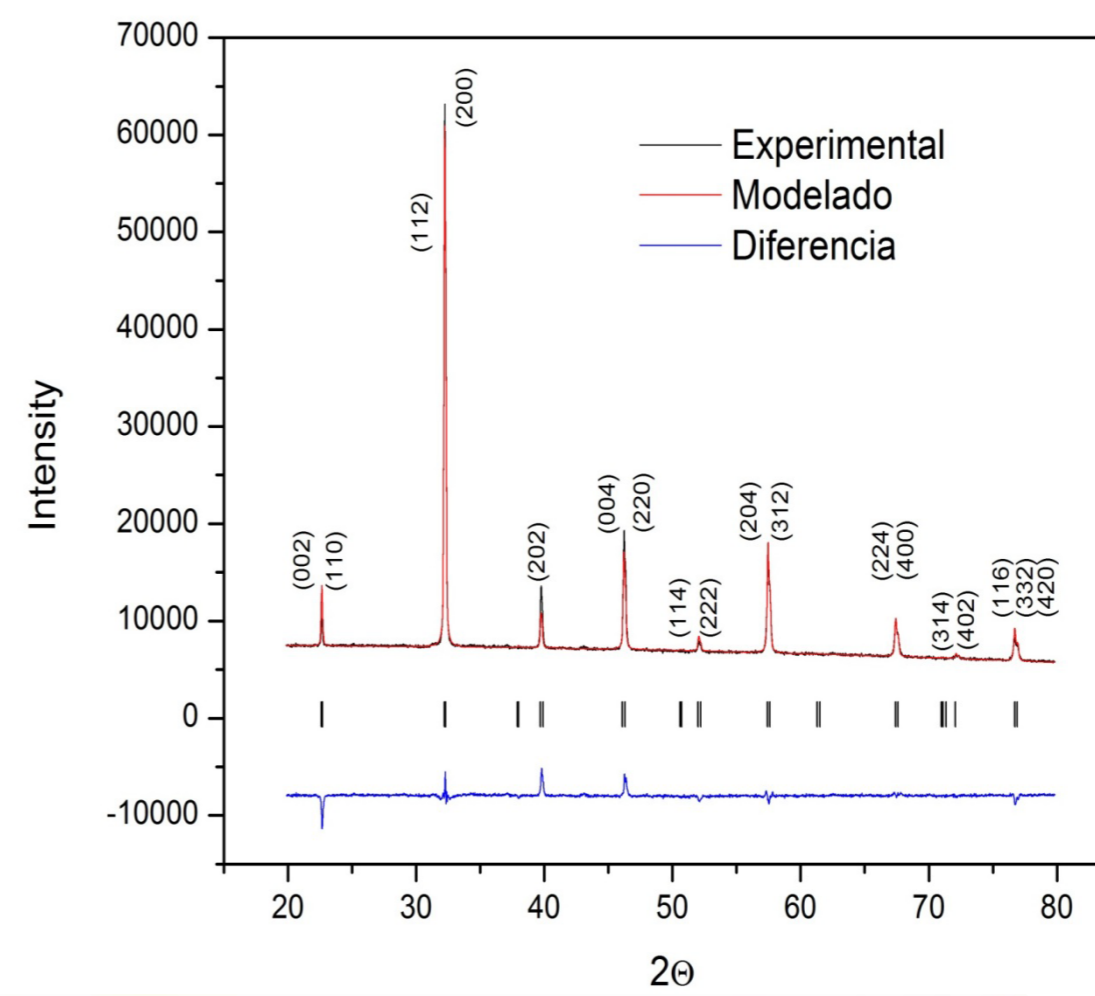
TMA de todas las composiciones de BSCNF.

Análisis DTA-TGA:



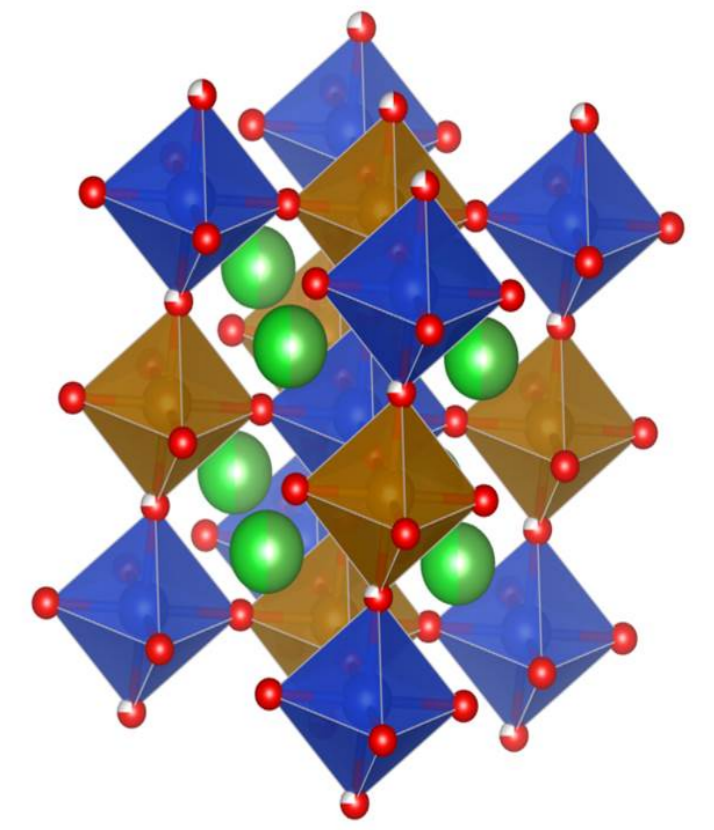
DTA-TGA del BSCNF con 0.1% de Ni.

Refinamiento Rietveld :



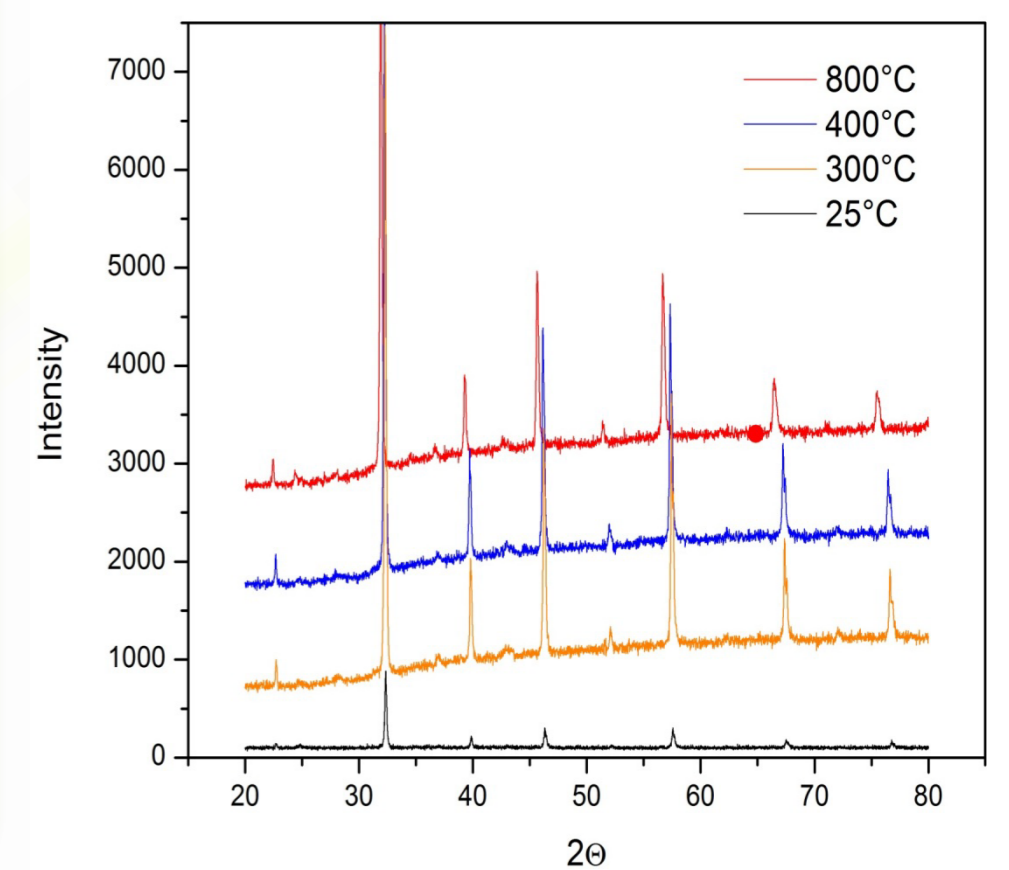
Refinamiento Rietveld realizado en el software Fullprof.

Estructura cristalina:



Doble perovskita $Ba_{0.5}Sr_{1.5}Co_{1.6-x}Ni_xFe_{0.4}O_{6-\delta}$

DRX a alta temperatura:



DRX del BSCNF con 0.1% de Ni

SEM:

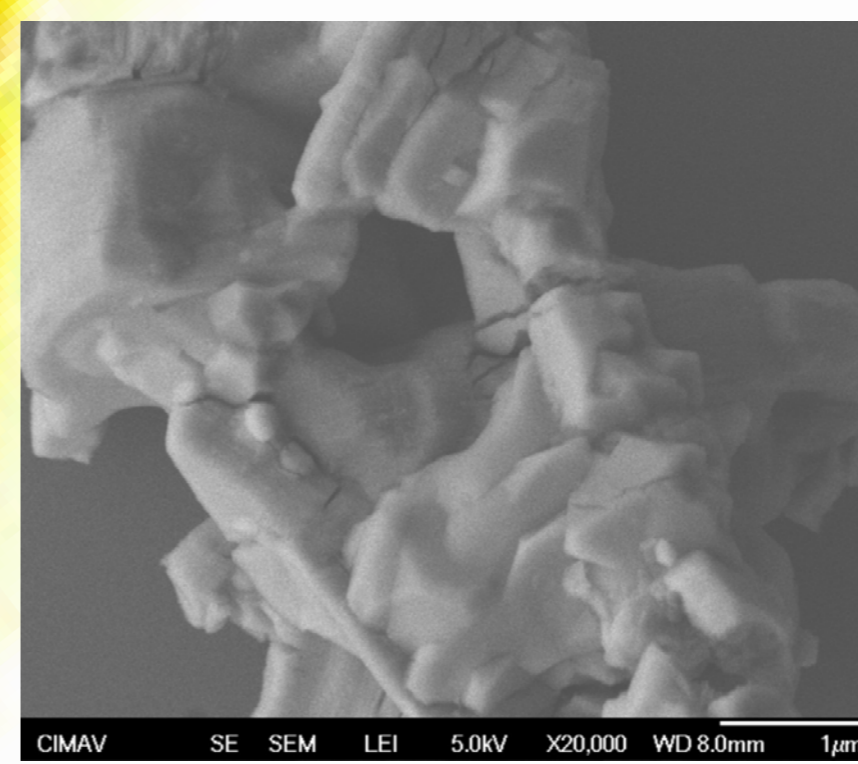
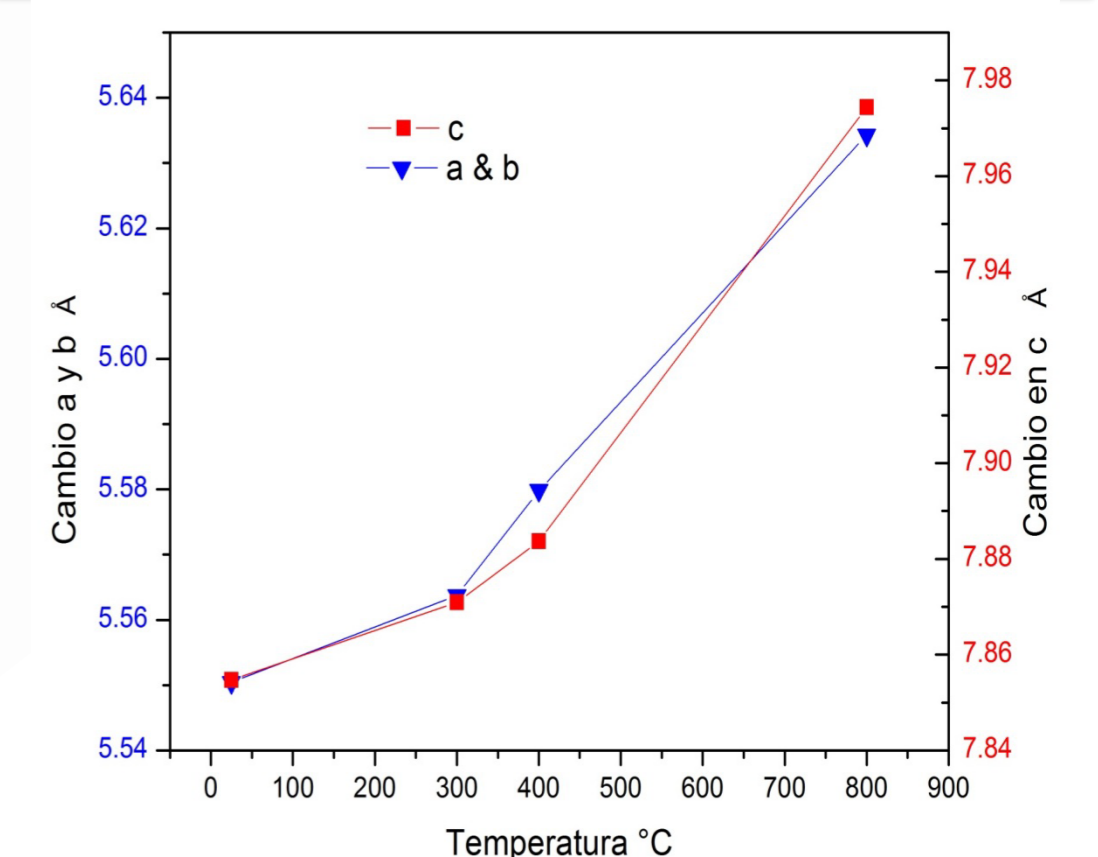


Imagen SEM después del calcinado de los polvos.

Parámetros de la celda:



Cambio en los parámetros de la celda con el aumento en la temperatura.

Conclusiones:

- ❖ Los polvos BSCNF se sintetizaron con éxito a través de sol-gel, el material resultante se caracterizó, por XRD y análisis TMA.
- ❖ The material exhibit a tetragonal double perovskite structure, and can be indexed in the space group SG. I 4/m m m.
- ❖ El material exhibió una estructura de perovskita doble tetragonal, y puede ser indexada en el SG grupo espacial. I 4 / m m m.
- ❖ La difracción de rayos X revela un desplazamiento de todas las difracciones, por lo tanto, un incremento en el volumen de la celda unidad.
- ❖ Puede ser observado a partir del análisis DTA-TGA que existe una pérdida de masa en BSCNF por encima de 400 ° C, probablemente debido a la reducción de los sitios B de la perovskita, causando una disminución estequiométrica del oxígeno, y por lo tanto un cambio en los parámetros de la celda.
- ❖ El refinamiento de Rietveld muestra que el eje c de la célula se expande ligeramente más que el eje A y b.

Referencias:

- Qingshan Zhu , Tongan Jin, Yong Wang. 2006. Solid State Ionics 177 (2006) 1199–1204.
- Bo Wei, Zhe Lü, Xiqiang Huang, Jipeng Miao, Xueqing Sha, Xianshuang Xin, Wenhui Su. (22 August 2005). Journal of the European Ceramic Society 26 (2006) 2827–2832 .
- Leilei Zhang, Mo Liu, Jinhua Huang, Zhaoyuan Song, Yidan Fu, Ying Chang, Changwei Li, Tianmin He, 2014. International journal of hydrogen energy 39 (2014) 7972–7979.