

Películas delgadas mesoporosas de YSZ para aplicaciones en celdas de combustible de óxido sólido

- Bernardo Sievers,^{1,2} Leticia Granja,^{1,2} Andres Zelcer,³ Ivan Queirolo,² Valeria Ferrari,^{1,2} Dilson Juan,^{1,2} Rodolfo Fuentes,² Sebastian Pasannante,^{1,2} Joaquin Sacanell²

¹*Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET)*

²*Departamento de Física de la Materia Condensada, CAC, CNEA-CONICET*

³*Centro de Investigaciones en Bionanociencias*

Cuerpo Con el objeto de potenciar las propiedades de las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC por sus siglas en inglés), desarrollamos películas delgadas densas y mesoporosas de ZrO₂ y 8 por ciento de Y₂O₃ (YSZ), para utilizar como electrolitos. Las películas fueron sintetizadas por sol-gel y se depositaron mediante dip coating sobre sustratos de Si y sílica fundida. En el caso de los films mesoporosos, se utilizó Pluronic F127 como agente moldeante para el autoensamblado inducido por evaporación. Las mismas fueron sometidas a distintos tratamientos térmicos para estudiar la evolución estructural que sufrirían en operación. Mediante difracción y reflectometría de rayos X se determinó la estructura cristalina, la morfología, la porosidad accesible y el espesor. Las propiedades electroquímicas de las películas se estudian en una estación de prueba diseñada en el laboratorio para realizar la caracterización eléctrica de películas delgadas y dispositivos desde temperatura ambiente hasta 700 °C. Además, estamos abordando el estudio del YSZ mediante cálculos computacionales DFT con el software Quantum Espresso. Apuntamos a realizar cálculos NEB (nudged elastic band) centrándonos en el transporte de vacancias de oxígeno. En este trabajo analizamos los resultados estructurales y morfológicos obtenidos para las películas de YSZ en función de los tratamientos térmicos realizados, presentamos el diseño de la estación de prueba y encaramos el estudio computacional del YSZ Bulk con el objetivo de poder comparar futuros cálculos con las mediciones en films.