

Correlación estructura-propiedades en materiales relacionados con la energía

J.A. Alonso

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, C.S.I.C., Cantoblanco E-28049 Madrid

El desarrollo de dispositivos de almacenamiento y conversión de energía necesarios para generar energía limpia y sostenible se basa en el diseño, síntesis y caracterización de materiales novedosos con propiedades adecuadas en cuanto a conductividad iónica y/o electrónica, capacidades de inserción iónica, actividad redox, propiedades catalíticas, etc. La caracterización estructural de estos materiales relacionados con la energía es de suma importancia para comprender y mejorar el comportamiento deseado en relación con las propiedades de interés. En este sentido, la difracción de neutrones en polvo (NPD) constituye una herramienta única para proporcionar una información estructural detallada sobre las características íntimamente relacionadas con estas propiedades y su evolución con factores externos (temperatura, composición de la atmósfera, presión, etc.). Las aplicaciones bien conocidas de la difracción de neutrones son la ubicación de átomos de oxígeno y vacantes de oxígeno en conductores de iones de óxido, iones de Li en electrolitos de Li o cátodos de baterías de Li; protones en conductores H⁺ rápidos, etc. En esta charla presentaremos algunos resultados propios recientes sobre diferentes tipos de materiales relacionados con la energía, incluidos electrodos y electrolitos en pilas de combustible de óxido sólido (SOFC) y conductores de Li, Na y H.

Con respecto a los cátodos SOFC, hemos desarrollado una serie de derivados de SrCoO_{3-d} con una alta conductividad eléctrica y difusión de oxígeno. La estructura cúbica deseada se ha estabilizado mediante dopajes adecuados en los sitios de Sr o Co; las rutas de conducción de oxígeno se han determinado por difracción de polvo de neutrones en las condiciones de trabajo de SOFC. Se han seguido procedimientos similares para materiales de SOFC de ánodo derivados de la perovskita SrMoO₃. Un ejemplo de conductor protónico donde la posición H del hidronio H₃O⁺ se determinó a partir de mapas de Fourier de diferencia es el pirocloro (H₃O)SbTeO₆, con una conductividad H⁺ superior a la del Nafion^R por encima de 200°C. Los neutrones también fueron útiles para determinar la ubicación de Li en el granate Li₇La₃Zr₂O₁₂, siendo este último material tecnológicamente importante para las baterías de tipo "all-solid-state". En esta charla se hará una breve revisión de estos diferentes materiales, con énfasis en las características estructurales específicas determinadas por los neutrones que explican sus propiedades de interés.