

Congreso Nacional de Materiales

102

SEGREGACIÓN DE Gd EN INTERCARAS DE CERÁMICAS EUTÉCTICAS DOPADAS DE CeO₂/NiO Y CeO₂/CoO. EFECTO EN LA ESTABILIDAD INTERFACIAL Y CONDUCTIVIDAD IÓNICA

Dra. Alodia Orera¹, Dra. Funing Wang^{2,3}, Dr. Elías Ferreiro-Vila⁴, Dra. Sonia Serrano-Zabaleta¹, Dr. Aitor Larrañaga⁵, Dr. Miguel Ángel Laguna-Bercero¹, Prof. Elizabeth Dickey⁶, Dr. Francisco Rivadulla⁴, Prof. Maria Carmen Muñoz², **Dr. Angel Larrea¹**

¹Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón, CSIC-U. Zaragoza, Zaragoza, España, ²Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Madrid, España, ³School of Physics, Shandong University, Jinan, China, ⁴Centro de Investigación en Química Biológica e Materiais Moleculares, U. Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, España, ⁵SGIKER, Servicios Generales de Investigación, U. País Vasco, Leioa, España, ⁶Department of Materials Science & Engineering, North Carolina State University, Raleigh, USA

SESIÓN IX - MATERIALES FUNCIONALES, Aula D-005 (módulo D - Planta baja Facultad de Derecho), julio 1, 2022, 9:30 - 11:15

SEGREGACIÓN DE Gd EN INTERCARAS DE CERÁMICAS EUTÉCTICAS DOPADAS DE CeO₂/NiO Y CeO₂/CoO. EFECTO EN LA ESTABILIDAD INTERFACIAL Y CONDUCTIVIDAD IÓNICA

A. Orera¹, F. Wang^{2,3}, E. Ferreiro-Vila⁴, S. Serrano-Zabaleta¹, A. Larrañaga⁵, M.A. Laguna-Bercero¹, E.C. Dickey⁶, F. Rivadulla⁴, M. C. Muñoz² y A. Larrea¹

- 207. Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, CSIC-U. Zaragoza, E-50.018 Zaragoza.
- 208. Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, E-28049 Cantoblanco.
- 209. School of Physics, Shandong University, Jinan 250100, China
- 210. CiQUS, Centro de Investigación en Química Biológica e Materiais Moleculares, U. Santiago de Compostela, Santiago de Compostela 15782.
- 211. SGIKER, Servicios Generales de Investigación, U. País Vasco, 48080 Bilbao.
- 212. Department of Materials Science & Engineering, North Carolina State University, Raleigh, NC 27695-7907, USA.

La conductividad de las cerámicas iónicas depende fuertemente de la segregación de dopantes en los bordes de grano e intercaras, lo que habitualmente provoca la disminución de portadores debido a efectos



Congreso Nacional de Materiales

espacio de carga y una alta resistencia intergranular. En consecuencia, es de gran interés obtener configuraciones interfaciales que provoquen la formación de vacantes de oxígeno. En este trabajo combinamos microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HREM), microscopía de fuerza con sonda kelvin (KPFM) y cálculos mediante la teoría del funcional de la densidad (DFT) para estudiar el estado de equilibrio interfacial de cerámicas eutécticas solidificadas direccionalmente de CGO-CoO y CGO-NiO (CGO: óxido de cerio y gadolinio). El HREM demuestra que la intercara es muy abrupta, quedando fundamentalmente confinada a un plano común de átomos de oxígeno, y que la concentración de Gd en la intercara es casi 3 veces mayor que en el interior del cristal en el caso de CGO-CoO. Sin embargo, en el CGO-NiO no se observa dicha segregación. Además, los experimentos de KPFM indican que la conductividad interfacial es mucho mayor en CGO-CoO que en CGO-NiO. Por su parte, el DFT concluye que la segregación de Gd en CGO-CoO disminuye la energía interfacial, ya que la formación de defectos formados por complejos de iones de Gd y vacantes de oxígeno compensa la discontinuidad de carga iónica. Además, las distorsiones locales que se inducen alrededor de los defectos relajan la deformación debida al desajuste de las redes. En consecuencia, demostramos que la estructura e ionicidad de los óxidos constituyentes provocan la segregación del dopante en la intercara en cerámicas eutécticas basadas en CGO. Este trabajo podría suponer una nueva ruta para preparar materiales nanocompuestos masivos con conductividad iónica interfacial aumentada.ⁱ

ⁱA. Orera *et al.*, *Journal of Materials Chemistry A*, 2020, **8**, 2591-2601.