



## EVOLUCIÓN TÉRMICA, NANO Y MICROESTRUCTURAL DE COMPOSITES Ce<sup>\*</sup>O<sub>2</sub>-NiO PARA APLICACIONES DUALES: ENERGÉTICAS Y AMBIENTALES

Andrés A. Quiroga<sup>(1,2)</sup>, Eugenia Zelaya<sup>(1)</sup> y Marcelo R. Esquivel<sup>(1,2,3)\*</sup>

<sup>(1)</sup>CONICET, Centro Atómico Bariloche, Avenida Bustillo km 9500, Bariloche, Rio Negro, Argentina.

<sup>(2)</sup>CRUB, Universidad Nacional del Comahue, Quintral 1250, Bariloche, Rio Negro, Argentina.

<sup>(3)</sup>Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, Avenida Bustillo km 9500, Bariloche, Rio Negro, Argentina.

\*(autor de contacto): [esquivel@cab.cnea.gov.ar](mailto:esquivel@cab.cnea.gov.ar)

### RESUMEN

Los composites basados en Ce<sup>\*</sup>O<sub>2</sub>-Ni, donde Ce<sup>\*</sup>O<sub>2</sub> es un óxido substituido, presentan un amplio rango de aplicaciones por las características estructurales y las propiedades sinérgicas del mismo. El Ce<sup>\*</sup>O<sub>2</sub> posee una estructura cúbica estable, con elementos con número de oxidación variables entre 3+ y 4+, mientras que el Ni presenta propiedades catalíticas que favorecen las reacciones superficiales [1]. La diversidad de aplicaciones del composite queda, en parte, definida por la cinética de desarrollo de sus componentes. De esta manera, se puede controlar el crecimiento de uno o de ambos de acuerdo a la temperatura, atmósfera y tipo de precursor. En este trabajo, se analiza la evolución térmica, nano y microestructural de estos composites en aire a partir de la descomposición térmica en aire de intermetálicos del tipo AB<sub>5</sub>. La evolución térmica se estudia con DSC en forma isotérmica y anisotérmica, entre temperatura ambiente y 550 °C, y mediante tratamientos térmicos hasta 1400 °C. La morfología y la distribución de tamaños de las partículas se determinan por SEM (Nova NanoSEM 230, FEI). La nanoestructura se analiza por TEM (CM200 UT, FEI). La microestructura se estudia por XRD (PANalytical Empyrean). Las estructuras halladas se refinan por el método Rietveld utilizando el software Fullprof. Se determina que la cinética entre temperatura ambiente y 300 °C es controlada por la formación de Ce<sup>\*</sup>O<sub>2</sub>. La evolución térmica está controlada por procesos en serie/paralelo asociados a la formación de este óxido y a la descomposición térmica del intermetálico. Se caracteriza el orden de la reacción considerando el O<sub>2</sub> en exceso. Se determina que los procesos de formación del Ce<sup>\*</sup>O<sub>2</sub> están asociados a mecanismos de nucleación y crecimiento [2]. En este rango de temperaturas, la formación de NiO es despreciable. Este proceso queda ratificado por las observaciones de TEM; XRD, SEM y EDS. Estos resultados son promisorios para abordar la producción en escala industrial.

### ABSTRACT

Ce<sup>\*</sup>O<sub>2</sub>-Ni composites exhibit a broad range of applications due to their synergic properties and structural characteristics. In these materials, Ce<sup>\*</sup>O<sub>2</sub> is a substituted structure. Ce<sup>\*</sup>O<sub>2</sub> is a stable cubic structure containing elements which oxidation numbers vary from 3+ to 4+. Ni presents catalytic properties that favor surface reactions [1]. The diversity on applications is correlated to the kinetics of the formation of the constituents. It means that the growth of each component can be controlled by controlling the atmosphere, temperature and precursor. In this work, it is analyzed both the thermal evolution and micro and nanostructure of the composites in air. Composites are obtained from the thermal decomposition of AB<sub>5</sub>-type intermetallics. Thermal evolution is studied by DSC. Measurements are done under isothermal and non-isothermal conditions, from room temperature to 550 °C in air. In addition, thermal treatments are done at 1400 °C. Morphology and particle size distribution are analyzed by SEM (Nova NanoSEM 230, FEI). Nanostructure is analyzed by TEM (CM200 UT, FEI). Microstructure is studied by XRD (PANalytical

*Empyrean). Structures are refined by Rietveld method using Fullprof software. It is found that kinetics of the Ce\*O<sub>2</sub> formation controls the reaction rate between room temperature and 300 °C. This thermal evolution is associated to parallel/in series processes due to the oxide formation and thermal decomposition of the intermetallic. The reaction order is characterized by considering O<sub>2</sub> as in excess reactant. It is found that Ce\*O<sub>2</sub> formation is governed by nucleation and growth processes [2]. In this temperature range, NiO formation is negligible. These conclusions are assessed by TEM; XRD, SEM and EDS observations. These results can be potentially used at industrial scale.*

## **REFERENCIAS**

1. A. V. Virkar, G. Tao, “Reversible high temperature cells for power generation and hydrogen production using mixed ionic electronic conducting solid electrolytes”; International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 40 (2015), p. 5561-5577.
2. S.M. Sarge, G. W.H. Höhne and W. Hemminger, “Calorimetry, Fundamentals, Instrumentation and Applications”; 2014, Wiley-VCH, Inc.

**TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: T05**

**PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER): P (poster)**