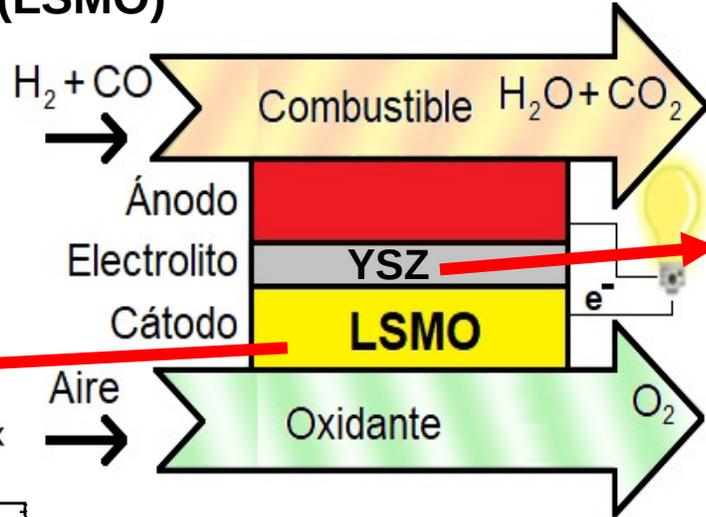
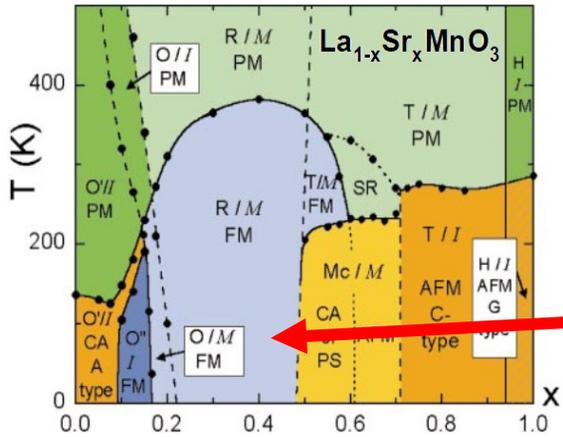


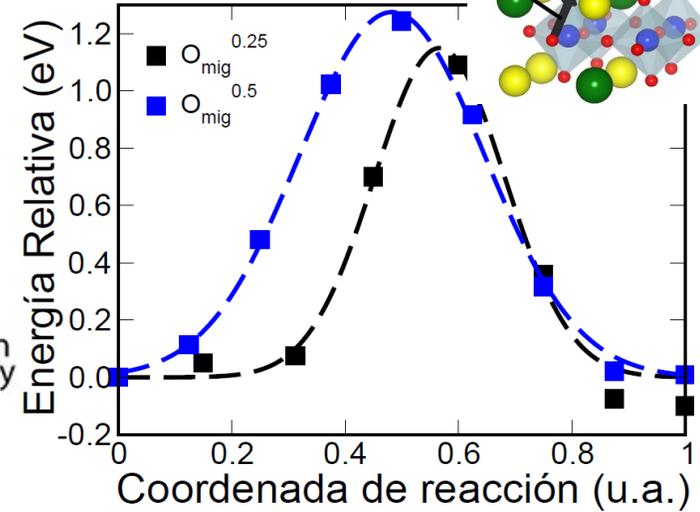
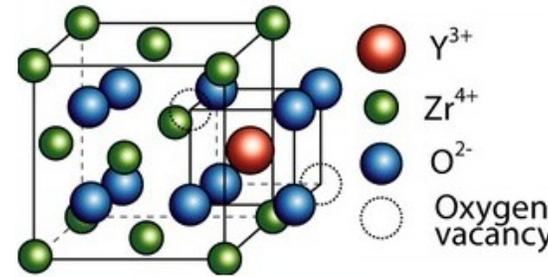
Simulaciones de migración iónica en óxidos con aplicaciones a celdas de combustible

Contacto: Dra. Valeria Ferrari
(valeria.p.ferrari@gmail.com)

Manganitas de lantano dopadas con estroncio (LSMO)



Zirconia estabilizada con itria (YSZ)



PROPUESTA:

- Cálculos *ab-initio* para estimar las barreras de migración y comprender los mecanismos de difusión en LSMO (cátodo) & YSZ (electrolito).
- Modelos de la fase magnética y cristalina de LSMO & YSZ de alta temperatura.
- Comparación directa con experimentos (colaboración con J. Sacanell y Leticia Granja-CAC).

$$D_{\text{chem}}(T) = D_{\text{chem}}^0 \cdot \exp[E_a / RT]$$

Coefficiente difusión química

E_a : Energía de activación

R : Constante de los gases

D_{chem}^0 : Prefactor

