

EFFETS QUANTIQUES DANS LES OXYDES CONDUCTEURS PROTONIQUES POUR PILES A COMBUSTIBLES

G. Geneste¹, J. Hermet^{1,2}, G. Dezanneau²

1 CEA, DAM, DIF, F-91297, Arpajon, France

2 Laboratoire Structures, Propriétés et Modélisation des Solides, UMR CNRS
8580, CentraleSupélec, Grande Voie des Vignes, 92295 Châtenay-Malabry Cedex,
France

Les piles à combustibles de type PCFC (“ProtonicCeramic Fuel Cell”) mettent en jeu des éléments (électrolyte, électrodes) qui possèdent la propriété d’incorporer les protons et de permettre leur migration. Du fait de sa faible masse, le proton est sujet à des fluctuations quantiques importantes, et ce jusqu’aux températures assez élevées de fonctionnement des PCFCs, conditions dans lesquelles leur diffusion est thermiquement activée, mais influencée par les effets quantiques. A plus basse température (100-300 K), le proton est gelé dans son état fondamental vibrationnel, et sa diffusion se produit par effet tunnel, dans des configurations favorables (« coïncidence ») produites par l’agitation thermique des atomes (plus lourds) voisins (diffusion tunnel assistée par les phonons).

Ces différents régimes seront décrits dans le cas particulier de l’oxyde BaSnO_3 , sur la base de calculs *ab initio* effectués avec le code ABINIT [1]. Dans cet oxyde de structure pérovskite, le proton peut diffuser par la succession de mécanismes de saut, et de réorientation. Dans le régime de diffusion tunnel thermiquement assistée, les limites adiabatiques et non-adiabatiques seront décrites [2]. Le mécanisme de saut du proton présente des caractéristiques proches de la limite adiabatique, tandis que le mécanisme de réorientation est plus difficile à caractériser.

1. Gonze X. et al, Comput. Phys. Comm. (in press).

2. Geneste G., Ottochian A., Hermet J., Dezanneau G., Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 19104, 2015.