



HAL
open science

Modélisation des mécanismes de réaction au sein d'électrodes à oxygène $\text{La}_{2}\text{NiO}_{4+\delta}$

Giuseppe Sdanghi, Lydia Yefsah, Fabrice Mauvy, Elisabeth Djurado,
Jean-Marc. Bassat, Jérôme Laurencin

► To cite this version:

Giuseppe Sdanghi, Lydia Yefsah, Fabrice Mauvy, Elisabeth Djurado, Jean-Marc. Bassat, et al.. Modélisation des mécanismes de réaction au sein d'électrodes à oxygène $\text{La}_{2}\text{NiO}_{4+\delta}$. *meRunionPlniresdelaFdrationFRH2, FdrationFRH2, May2022, Aussois, France*. hal-04590165

HAL Id: hal-04590165

<https://hal.science/hal-04590165v1>

Submitted on 28 May 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Modélisation des mécanismes de réaction au sein d'électrodes à oxygène $\text{La}_2\text{NiO}_{4+\delta}$

Giuseppe Sdanghi (1,2), Lydia Yefsah (2,3), Fabrice Mauvy (1), Elisabeth Djurado (3), Jean-Marc Bassat (1), Jérôme Laurencin (2)

¹ICMCB, Univ. Bordeaux, 33608 Pessac, France

²CEA-Liten, Univ. Grenoble Alpes, DTCH, 38000 Grenoble, France

³LEPMI, Univ. Grenoble Alpes, CNRS, 38000 Grenoble, France

Le matériau d'électrode sur-stœchiométrique en oxygène $\text{La}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ (LNO) est considéré aujourd'hui comme une solution alternative aux électrodes à oxygène classiques à base de pérovskites. En effet, le LNO est chimiquement stable dans une large gamme de températures et de pressions partielles d'oxygène, offrant une conductivité à la fois ionique et électronique (MIEC) élevée ainsi qu'une cinétique de réaction de réduction de l'oxygène assez rapide.

Dans des travaux précédents [1], il a été montré que les performances des électrodes MIEC peuvent être significativement améliorées par une optimisation microstructurale. Dans ce but, une connaissance approfondie des mécanismes de réaction est nécessaire pour identifier la microstructure la plus adaptée qui améliore la réponse de l'électrode. Dans ce travail, nous proposons une approche couplant expériences et modélisation visant à étudier les mécanismes de réaction pour l'électrode à oxygène LNO. Deux principaux chemins de réaction ont été considérées : (i) l'incorporation/excorporation d'oxygène à l'interface gaz/électrode (chemin de volume) et ; (ii) le transfert de charge direct aux TPBIs (chemin de surface). Les courbes de polarisation et les diagrammes d'impédance dans diverses conditions de fonctionnement (650-750 °C, 0,15-1 atm et $\pm 100 \text{ mA cm}^{-2}$) ont été enregistrés en utilisant une configuration à trois électrodes. Ces données expérimentales ont été utilisées pour calibrer le modèle basé sur les réactions ayant lieu au sein de l'électrode. Le modèle développé est capable de reproduire fidèlement la forme des diagrammes d'impédance expérimentaux quelles que soient la température et la pression étudiées. Le lien entre la microstructure, les mécanismes de réaction et les performances de l'électrode a été ainsi dévoilé.

[1] E. Effori, J. Laurencin, E. D. R. Silva, M. Hubert, T. David, M. Petitjean, G. Geneste, L. Dessemond, and E. Siebert, *J. Electrochem. Soc.*, 168, 044520 (2021).