

# Índice

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
1.1	Perovskitas . . . . .	4
1.1.1	Estructura cristalina . . . . .	4
1.1.2	Estructura electrónica . . . . .	6
1.1.3	Correlación . . . . .	10
1.2	Celdas de Combustible . . . . .	10
1.2.1	Reseña histórica . . . . .	11
1.2.2	Materiales de cátodo . . . . .	14
1.2.3	Materiales de Ánodo . . . . .	16
1.2.4	Celda simétrica . . . . .	18
1.3	Motivación del presente trabajo . . . . .	20
<b>2</b>	<b>Síntesis y caracterización morfológica</b>	<b>25</b>
2.1	Métodos de síntesis . . . . .	27
2.2	Caracterización morfológica . . . . .	30
2.3	Resumen . . . . .	35
<b>3</b>	<b>Caracterización Estructural</b>	<b>37</b>
3.1	Antecedentes . . . . .	39
3.2	Determinación de grupos espaciales y modos de simetría . . . . .	42
3.3	Determinación de parámetros cristalográficos . . . . .	46
3.3.1	Caracterización a temperatura ambiente . . . . .	48
3.4	Difracción de neutrones . . . . .	56
3.5	EXAFS . . . . .	60
3.5.1	Comparación con las técnicas de difracción . . . . .	60

3.5.2	Método experimental . . . . .	61
3.5.3	Refinamiento de caminos de retrodispersión . . . . .	62
3.6	Resumen del capítulo . . . . .	71
<b>4</b>	<b>Caracterización estructura electrónica</b>	<b>73</b>
4.1	Introducción . . . . .	75
4.2	Fundamentos de XANES . . . . .	75
4.3	Estimación de la estructura electrónica utilizando DFT . . . . .	77
4.4	Estudio de la estructura electrónica de la serie LSTC . . . . .	81
4.4.1	Motivación . . . . .	81
4.4.2	Procedimiento experimental . . . . .	82
4.4.3	Caracterización a temperatura ambiente . . . . .	84
4.4.4	Caracterización <i>in-situ</i> en condiciones de operación . . . . .	94
4.5	Resumen del capítulo . . . . .	100
<b>5</b>	<b>Estudio de propiedades de alta temperatura</b>	<b>103</b>
5.1	Estructura cristalina y estabilidad de fase en condiciones de operación .	105
5.2	Dilatometría . . . . .	117
5.3	Reducción programada en temperatura . . . . .	117
5.4	Conductividad eléctrica . . . . .	123
5.5	Resumen del capítulo . . . . .	130
<b>6</b>	<b>Discusión de Resultados</b>	<b>133</b>
6.1	Propiedades a temperatura ambiente . . . . .	135
6.1.1	Estructura cristalina local y de largo alcance . . . . .	135
6.1.2	Mecanismos de compensación de carga . . . . .	136
6.1.3	Parámetros de red . . . . .	141
6.2	Propiedades a alta temperatura . . . . .	142
6.3	Mediciones complementarias . . . . .	147
<b>7</b>	<b>Conclusiones Generales</b>	<b>149</b>
<b>A</b>	<b>Determinación de estructura por teoría de grupos</b>	<b>157</b>
A.1	Cadena grupo/subgrupo, índice de transformación . . . . .	157
A.2	Determinación del índice y matriz de transformación . . . . .	158

A.3	Tabla de caracteres de Grupos Puntuales . . . . .	160
<b>B</b>	<b>Resultados de Refinamientos</b>	<b>161</b>
<b>C</b>	<b>Espectroscopía de absorción de rayos X</b>	<b>163</b>
<b>D</b>	<b>Líneas Experimentales LNLS</b>	<b>167</b>
D.1	D10B-XPD - Difracción de rayos X en polvos . . . . .	167
D.2	D04B-XAFS1 y D08BXAFS2 . . . . .	168
	<b>Publicaciones y Trabajos Presentados</b>	<b>187</b>