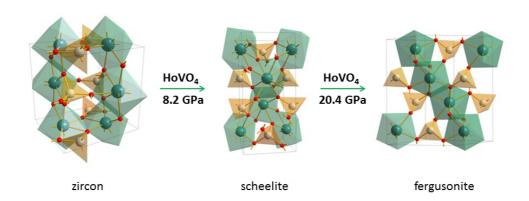


Luz sincrotrón para estudiar moléculas utilizadas en las baterías de los móviles

Un equipo internacional de científicos ha seguido con la luz del sincrotrón ALBA la evolución del ortovanadato de holmio, una molécula muy poco estudiada, cuando se la somete a altas presiones. Este tipo de compuestos se emplean como centelladores y fotocatalizadores en las baterias de ion litio, además de su uso potencial en la producción de hidrógeno.

Sincrotrón ALBA

18/7/2014 10:12 CEST



Secuencia de la estructura que adopta el HoVO4 cuando se somete a altas presiones. / Sincrotrón ALBA

Investigadores de la India, México y España, coordinados por el investigador Daniel Errandonea de la Universidad de Valencia, han estudiado la estructura y las propiedades del ortovanadato de holmio (HoVO₄) en condiciones de altas presiones gracias a la luz de sincrotrón de ALBA, en Barcelona, y de Elettra, en Italia.

Los ortovanadatos son materiales tecnológicamente apreciados ya que pueden tener aplicaciones como centelladores (debido a su capacidad de luminiscencia) o como fotocalizadores en las baterías de iones de litio, ampliamente utilizadas en los teléfonos móviles o en los ordenadores portátiles. También son de gran interés por su potencial uso en la producción de hidrógeno, con el fin de ofrecer soluciones energéticas más



sostenibles.

Los resultados del trabajo, que publica el *Journal of Physics Condensed Matter*, han demostrado que en las condiciones planteadas este material sigue la siguiente secuencia estructural: zirconita, scheelita y, finalmente, fergusonita. Los cálculos realizados coinciden plenamente con los experimentos y demuestran gran consistencia entre ambos.

"Comprimiendo ortovanadatos a presiones cientos de miles de veces mayores que la presión atmosférica hemos puesto a prueba las propiedades mecánicas y estructurales de los ortovanadatos", comenta Errandonea.

Por lo tanto, este estudio contribuye a mejorar la comprensión de los materiales a altas presiones y sus resultados pueden tener implicaciones en "geofísica o en aplicaciones tecnológicas", según apunta Catalin Popescu, otro de los investigadores del estudio y miembro de la línea del sincrotrón donde se han efectuado los análisis.

Referencia bibliográfica

Alka B. Garg, D. Errandonea, P. Rodríguez-Hernández, S. López-Moreno, A. Muñoz and Catalin Popescu. "High-pressure structural behaviour of HoVO4: combined XRD experiments and ab initio calculations". *Journal of Physics: Condensed Matter* 26 265402 (2014).

Derechos: Creative Commons

TAGS

TRANSICIÓN DE FASE | CIENCIA DE MATERIALES | SINCROTRÓN |

Creative Commons 4.0

Puedes copiar, difundir y transformar los contenidos de SINC. <u>Lee las</u> condiciones de nuestra licencia

Sinc

CIENCIAS

