



## Desxifrant la transició de fase ultrarràpida del diòxid de vanadi

Investigadors descobreixen tota la trajectòria que segueix el diòxid de vanadi durant la transició de fase d'aïllant a metall induïda per la llum. La tècnica proposada podria revelar complexitats ocultes en transicions similars d'altres materials quàntics.

April 30, 2025

Comprendre quines interaccions a nivell atòmic i subatòmic hi ha rere les propietats dels materials quàntics pot ser increïblement exigent. El diòxid de vanadi ( $\text{VO}_2$ ) i la seva ràpida transició de fase d'aïllant a metall exemplifiquen aquesta complexitat. Durant més de 50 anys s'ha debatut si aquesta transició es deu a canvis electrònics (es a dir, modificacions en el "paisatge" energètic del material, o més concretament, en la seva estructura de bandes) o a canvis estructurals (alteracions en la disposició de la xarxa atòmica).

Ara, per primera vegada, un equip d'investigadors dirigits per la [Universitat Heriot-Watt](#) i [IMDEA Nanociència](#), amb la col·laboració d'[investigadors de l'ICFO](#), el Dr. Lin Zhang, el Dr. Utso Bhattacharya, la Maria Recasens, el Dr. Johann Osmond, i el Prof. ICREA Maciej

**Lewenstein**, ha observat directament tant les transicions estructurals com les electròniques en el VO?. Així, han descobert que la transformació electrònica desencadena la transformació estructural, en un procés intricat que es desenvolupa en menys de 100 femtosegons. En l'estudi, publicat a Nature Communications, han participat diverses institucions, incloent-hi la Universitat de Memphis, ETH Zurich, el Donostia International Physics Center, la Universitat Adam Mickiewicz, i la Universitat Vanderbilt. Fins ara, els experiments previs només havien aconseguit capturar o bé la transició electrònica o bé l'estructural, però no totes dues alhora. Com a conseqüència, els investigadors es veien obligats a inferir que estava passant en el component no observat, i qual cosa va conduir a la conclusió aparent que el VO? experimenta un canvi sobtat d'aïllant a metall. "Ara podem veure directament tant els canvis electrònics com els estructurals, els quals tenen lloc més ràpidament del que es pensava. A més, el nostre nou enfocament ha revelat tot el procés de transició. Això vol dir que els intents de controlar les transicions de fase podrien ser més complicats d'implementar, però també oferir, potencialment, molts més resultats. En lloc d'obtenir A o B, potser podrem portar els materials a tot un abecedar d'estats", comparteix el Dr. Allan Johnson, investigador d'IMDEA Nanociència i autor corresponent de l'estudi

### **Una imatge completa de la transició de fase del VO?**

Utilitzant el seu nou mètode, l'equip va capturar la transició de fase del VO? en la seva escala de temps natural. Segons les seves observacions, el material comença com un aïllant, després passa per una fase de "mal metall" (només 10 femtosegons després de ser excitat amb llum), oscil·la entre estats aïllants i semimetal·lics, i finalment es consolida en una fase metàl·lica convencional uns 100 femtosegons més tard. L'estudi no només va mapar aquests canvis electrònics ràpids, sinó que també va demostrar que estan estretament connectats amb desplaçaments en l'estructura atòmica del material, on els ions de vanadi passen d'una posició torçada a una posició neutra en un procés complet.

Aquests descobriments van ser possibles gràcies a l'ús de polsos laser ultracurts -d'enorme durada- amb un espectre excepcionalment ampli. Aquest ampli rang espectral va ser crucial per resoldre totes les bandes d'energia simultàniament, permetent als investigadors construir una imatge completa de la transició. Un dels majors reptes, assenyala l'equip, va ser interpretar les noves dades. "Hi va haver una ruptura tan dràstica respecte als experiments anteriors que vam haver de desenvolupar models teòrics completament nous per descriure la transició a escales de temps tan curtes", explica el Dr. Lin Zhang, investigador de l'ICFO i coautor de l'estudi. Per a això, els investigadors del grup de Teoria d'Òptica Quàntica de l'ICFO van desenvolupar un enfocament teòric eficient per a les transicions de fase induïdes per la llum en el VO?, que havien publicat uns mesos abans a [npj Quantum Materials](#). Aquest mètode teòric, que incorpora tots els ingredients físics essencials del VO?, va resultar ser una eina potent per

explicar la dinamica complexa observada a l'experiment.

A mes, el fet que la tecnica proposada hagi revelat una ruta de transicio tan rica en un material tan estudiat com el VO<sub>2</sub> suggereix que el mateix podria ocórrer en altres materials quantics, i que es podrien descobrir moltes mes complexitats ocultes en un futur proper.

**Referencia:**

Brahms, C., Zhang, L., Shen, X. et al. Decoupled few-femtosecond phase transitions in vanadium dioxide. Nat Commun 16, 3714 (2025).

DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-025-58895-z>

**Agraiments:**

This work was funded by the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme: Starting Grant agreement HISOL no. 679649 and ERC Consolidator Grant XSOL no. 101001534. C.B. and J.C.T. acknowledge support from the United Kingdom's Engineering and Physical Sciences Research Council: Grant agreement EP/T020903/1. C.B. acknowledges support from the Royal Academy of Engineering through Research Fellowship No. RF/202122/21/133. This work was funded by the Spanish AIE (projects PID2022?137817NA-I00 and EUR2022?134052). A.S.J. acknowledges the support of the Ramon y Cajal Program (Grant RYC2021-032392-I). IMDEA Nanociencia acknowledges support from the *Severo Ochoa* Programme for Centers of Excellence in R&D (MICIN, CEX2020-001039-S). Computational resources were provided by the High-Performance Computing Center at the University of Memphis (X.S.). U.B. is also grateful for the financial support of the IBM Quantum Researcher Program. R.W.C. acknowledges support from the Polish National Science Centre (NCN) under the Maestro Grant No. DEC ?2019/34/A/ST2/00081. T.G. acknowledges funding by Gipuzkoa Provincial Council (QUAN-000021-01), by the Department of Education of the Basque Government through the IKUR strategy and through the project PIBA\_2023\_1\_0021 (TENINT), by the Agencia Estatal de Investigacion (AEI) through Proyectos de Generacion de Conocimiento PID2022-142308NA-I00 (EXQUSMI), by the BBVA Foundation (Beca Leonardo a Investigadores en Fisica 2023). S.T.P. acknowledges funding from the U. S. Department of Energy, Office of Science, Basic Energy Sciences, Materials Science and Engineering Directorate grant No. DEFG02-09ER46554 and by the McMinn Endowment at Vanderbilt University. K.A.H. and R.F.H. acknowledge support from the U. S. National Science Foundation (EECS-1509740) and the Stevenson Endowment at Vanderbilt University. The ICFO group acknowledges support from: ERC AdG NOQIA; MCIN/AEI (PGC2018-0910.13039/501100011033, CEX2019-000910-S/10.13039/501100011033, Plan National FIDEUA PID2019-106901GB-I00, Plan National STAMEENA PID2022-139099N I00 project funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and by the *European*

Union NextGenerationEU/PRTR (PRTR-C17.11), FPI); QUANTERA MAQS PCI2019-11828?2); QUANTERA DYNAMITE PCI2022-132919 (QuantERA II Programme co-funded by European Union's Horizon 2020 program under Grant Agreement No 101017733), Ministry of Economic Affairs and Digital Transformation of the Spanish Government through the QUANTUM ENIA project call - Quantum Spain project, and by the European Union through the Recovery, Transformation, and Resilience Plan - NextGenerationEU within the framework of the Digital Spain 2026 Agenda; Fundacio Cellex; Fundacio Mir-Puig; Generalitat de Catalunya (European Social Fund FEDER and CERCA program, AGAUR Grant No. 2021 SGR 01452, QuantumCAT \ U16-011424, co-funded by ERDF Operational Program of Catalonia 2014-2020); Barcelona Supercomputing Center MareNostrum (FI-2023-1-0013); EU Quantum Flagship (PASQAN S2.1, 101113690); EU Horizon 2020 FET-OPEN OPTologic (Grant No 899794); EU Horizon Europe Program (Grant Agreement 101080086 - NeQST), ICFO Internal QuantumGaudii project; European Union's Horizon 2020 program under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No 847648; La Caixa Junior Leaders fellowships, La Caixa Foundation (ID 100010434): CF/BQ/PR23/11980043.