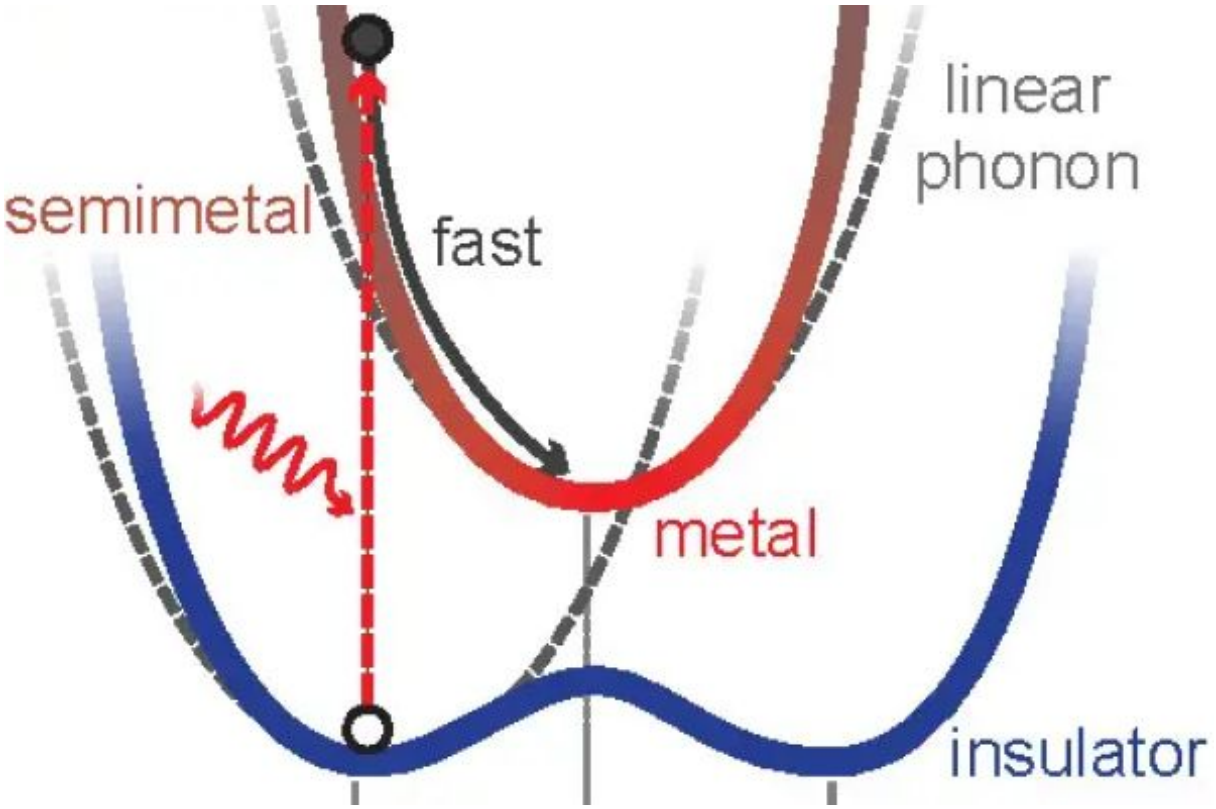


Desxifrant la transicio de fase ultrarapida del dioxid de vanadi

Investigadors descobreixen tota la trajectoria que segueix el dioxid de vanadi durant la transicio de fase d'aillant a metall induida per la llum. La tecnica proposada podria revelar complexitats ocultes en transicions similars d'altres materials quantics.

April 30, 2025

Comprendre quines interaccions a nivell atomic i subatomic hi ha rere les propietats dels materials quantics pot ser increiblement exigent. El dioxid de vanadi (VO?) i la seva rapida transicio de fase d'aillant a metall exemplifiquen aquesta complexitat. Durant mes de 50 anys s'ha debatut si aquesta transicio es deu a canvis electronics (es a dir, modificacions en el "paisatge" energetic del material, o mes concretament, en la seva estructura de bandes) o a canvis estructurals (alteracions en la disposicio de la xarxa atomica).

Ara, per primera vegada, un equip d'investigadors dirigits per la Universitat Heriot-Watt i IMDEA Nanociencia, amb la col·laboracio 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 electroniques en el VO?. Aixi, han descobert que la transformacio electronica desencadena la transformacio estructural, en un proces 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 nomes havien aconseguit capturar o be la transicio electronica o be l'estructural, pero no totes dues alhora. Com a conseqüencia, el investigadors es veien obligats a inferir que estava passant en el component no observat, l qual cosa va conduir a la conclusio aparent que el VO? experimenta un canvi sobtat d'aillan a metall. "Ara podem veure directament tant els canvis electronics com els estructurals, el quals tenen lloc mes rapidament del que es pensava. A mes, el nostre nou enfocament h revelat tot el proces de transicio. Aixo vol dir que els intents de controlar les transicions d fase podrien ser mes complicats d'implementar, pero tambe oferir, potencialment, molts me 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 Nanociencia i auto corresponent de l'estudi

Una imatge completa de la transicio de fase del VO?
Utilitzant el seu nou metode, l'equip va capturar la transicio de fase del VO? en la seva escala de temps natural. Segons les seves observacions, el material comenca com un aillant, despres passa per una fase de "mal metall" (nomes 10 femtosegons despres de ser excitat amb llum), oscil·la entre estats aillants i semimetal·lics, i finalment es consolida en una fa e metal·lica convencional uns 100 femtosegons mes tard. L'estudi no nomes va mapar aque ts canvis electronics rapids, sino que tambe va demostrar que estan estretament connect ts amb desplacaments en l'estructura atomica del material, on els ions de vanadi passen d' na posicio torcada a una posicio neutra en un proces compl
x. Aquests descobriments van ser possibles gracies a l'us de polsos laser ultracurts -d'en re nomes 1 a 5 femtosegons de durada- amb un espectre excepcionalment ampli. Aquest am li rang espectral va ser crucial per resoldre totes les bandes d'energia simultaniame t, permetent als investigadors construir una imatge completa de la transic
o. Un dels majors reptes, assenyala l'equip, va ser interpretar les noves dades. "Hi va haver na ruptura tan drastica respecte als experiments anteriors que vam haver de desenvolu ar models teorics completament nous per descriure la transicio a escales de temps tan curte ", explica el Dr. Lin Zhang, investigador de l'ICFO i coautor de l'estudi. Per a aixo, ls investigadors del grup de Teoria d'Optica Quantica de l'ICFO van desenvolupar un enfocament teoric eficient per a les transicions de fase induides per la llum en el VO?, ue havien publicat uns mesos abans a [npj Quantum Materials](). Aquest metode teoric, que incorpora tots els ingredients fisics 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? suggereix que el mateix podria ocorrer 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 i¿½Severo Ochoai¿½ Programme for Centers of Excellenc 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 grat ful for the financial support of the IBM Quantum Researcher Program. R.W.C. acknowle ges 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 Cou cil (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 Estata de Investigacion (AEI) through Proyectos de Generacion de Conocimi nto PID2022-142308NA-I00 (EXQUSMI), by the BBVA Foundation (Beca Leonar o a Investigadores en Fisica 2023). S.T.P. acknowledges funding from the U. S. Departmen of Energy, Office of Science, Basic Energy Sciences, Materials Science and Enginee ing Directorate grant No. DEFG02- 09ER46554 and by theMcMinn Endowment at Vander ilt University. K.A.H. and R.F.H. acknowledge support from the U. S. National Sci nce 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, lan National FIDEUA PID2019-106901GB-I00, Plan National STAMEENA PID2022-139099N I00 project funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and by the i¿½European

Union NextGenerationEU/PRTRi¿½ (PRTR-C17.I1), FPI); QUANTERA MAQS PCI2019-11 828?2); QUANTERA DYNAMITE PCI2022-132919 (QuantERA II Programme co-funded by uropean Union's Horizon 2020 program under Grant Agreement No 101017733), Ministry of conomic Affairs and Digital Transformation of the Spanish Government through the QUAN UM ENIA project call - Quantum Spain project, and by the European Union through the R covery, Transformation, and Resilience Plan - NextGenerationEU within the framework of the Digital Spain 2026 Agenda; Fundacio Cellex; Fundacio Mir-Puig; Generalitat de Catalunya (uropean Social Fund FEDER and CERCA program, AGAUR Grant No. 2021 SGR 01452, Quan umCAT \ U16-011424, co-funded by ERDF Operational Program of Catalonia 2014-2020); B rcelona Supercomputing Center MareNostrum (FI-2023-1-0013); EU Quantum Flagship (PASQ anS2.1, 101113690); EU Horizon 2020 FET-OPEN OPTOlogic (Grant No 899794); EU Horizo Europe Program (Grant Agreement 101080086 - NeQST), ICFO Internal i¿½QuantumGaudii? ½ project; European Union's Horizon 2020 program under the Marie Sklodowska-Curie gra t agreement No 847648; i¿½La Caixai¿½ Junior Leaders fellowships, i¿½La Caixa ¿½ Foundation (ID 100010434): CF/BQ/PR23/11980043.