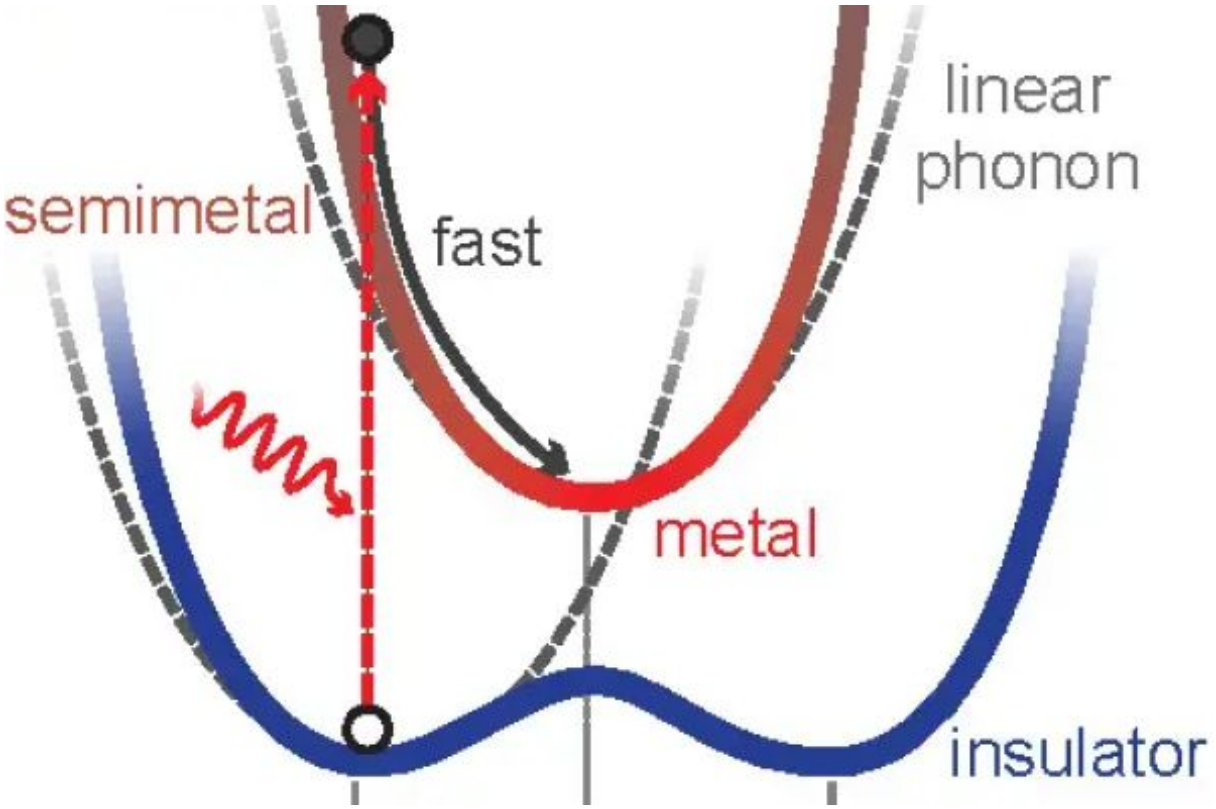


Desentranando la transicion de fase ultrarrapida del dioxido de vanadio

Investigadores descubren toda la trayectoria que sigue el dioxido de vanadio durante la transicion de fase de aislante a metal inducida por la luz. La tecnica propuesta podria revelar complejidades ocultas en transiciones similares de otros materiales cuanticos.

April 30, 2025

Comprender que interacciones a nivel atomico y subatomico subyacen a las propiedades de los materiales cuanticos puede ser increiblemente exigente. El dioxido de vanadio (VO?) y su rapida transicion de fase de aislante a metal ejemplifican esta complejidad. Durante mas de 50 anos se ha debatido si esta transicion viene dada por cambios electronicos (es decir, modificaciones en el "paisaje" energetico del material, o mas concretamente, su estructura de bandas) o por cambios estructurales (alteraciones en la disposicion de la red atomica). Ahora, por primera vez, un equipo de investigadores dirigidos por la Universidad Heriot-Watt e IMDEA Nanociencia, con la colaboracion de investigadores del ICFO, el **Dr. Lin Zhang**, el **Dr. Utso Bhattacharya**, **Maria Recasens**, el **Dr. Johann Osmond**, y el **Prof. ICREA Maciej**

Lewenstein, ha observado directamente tanto las transiciones estructurales como las electronicas en el VO?. De este modo, han descubierto que la transformacion electronica desencadena la estructural, en un proceso intrincado que se desarrolla en menos de 100 femtosegundos. En el estudio, publicado en Nature Communications, han participado varias instituciones, incluyendo la Universidad de Memphis, ETH Zurich, el Donostia International Physics Center, la Universidad Adam Mickiewicz, y la Universidad Vanderbilt.
Hasta ahora, los experimentos previos solo habian logrado capturar o bien la transicion electronica o bien la estructural, pero no ambas. Como resultado, los investigadores se veian obligados a inferir que estaba ocurriendo en el componente no observado, lo que llevo a la conclusion aparente de que el VO? experimenta un cambio abrupto de aislante a metal.
"Ahora podemos ver directamente tanto los cambios electronicos como los estructurales, los cuales ocurren mas rapido de lo que se pensaba. Ademas, nuestro nuevo enfoque ha revelado todo el proceso de transicion. Esto significa que los intentos de controlar las transiciones de fase podrian ser mas complicados de implementar, pero tambien ofrecer, potencialmente, muchos mas resultados. En lugar de obtener A o B, tal vez podamos llevar los materiales a todo un abecedario de estados", comparte el Dr. Allan Johnson, investigador de IMDEA Nanociencia y autor correspondiente del estudio.

Una imagen completa de la transicion de fase del VO?
Utilizando su novedoso metodo, el equipo capturo la transicion de fase del VO? en su escala de tiempo natural. Segun sus observaciones, el material comienza como un aislante, luego pasa por una fase de "mal metal" (apenas 10 femtosegundos despues de ser excitado con luz), oscila entre estados aislantes y semimetalicos, y finalmente se estabiliza en una fase metalica convencional alrededor de 100 femtosegundos mas tarde. El estudio no solo cartografio estos rapidos cambios electronicos, sino que tambien demostro que estan estrechamente conectados con desplazamientos en la estructura atomica del material, donde los iones de vanadio pasan de una posicion torcida a una posicion neutra en un proceso intrincado.
Estos descubrimientos fueron posibles gracias al uso de pulsos laser ultracortos -de apenas 1 a 5 femtosegundos de duracion- con un espectro excepcionalmente amplio. Este amplio rango espectral fue crucial para resolver todas las bandas de energia simultaneamente, permitiendo a los investigadores construir una imagen completa de la transicion.
Uno de los mayores desafios, senalo el equipo, fue interpretar los nuevos datos. "Hubo una ruptura tan dramatica respecto a los experimentos anteriores que tuvimos que desarrollar modelos teoricos completamente nuevos para describir la transicion en escalas de tiempo tan cortas", explica el Dr. Lin Zhang, investigador del ICFO y coautor del estudio. Para ello, los investigadores del grupo de Teoria de Optica Cuantica del ICFO desarrollaron un enfoque teorico eficiente para las transiciones de fase inducidas por la luz en VO?, que habian publicado unos meses antes en npj Quantum Materials. Este metodo teorico, que incorpora

todos los ingredientes fisicos esenciales del VO?, resulto ser una potente herramienta para explicar la compleja dinamica observada en el experimento.
Ademas, el hecho de que la tecnica propuesta haya revelado una ruta de transicion tan rica en un material tan estudiado como el VO? sugiere que algo similar podria ocurrir en otros materiales cuanticos, pudiendose descubrir muchas mas complejidades ocultas en un futuro proximo.

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

Agradecimientos:
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.