

## Una nova teoria per explicar la transparència dels òxids metàl·lics

- Els electrons dels òxids metàl·lics, per la seva gran massa efectiva a l'acoblar-se amb la xarxa iònica del material, no poden oscil·lar seguint el camp elèctric de la llum i la deixen passar.
- Els materials transparents i conductors s'empren en les pantalles tàctils dels mòbils i en les plaques solars per energia fotovoltaica

Investigadors de l'ICMAB han liderat una nova teoria per explicar la transparència d'alguns òxids metàl·lics, que proposa que la massa efectiva dels electrons és gran en aquest tipus de materials degut a la formació de "polarons" o acoblaments entre els electrons en moviment i la xarxa iònica del material, que es distorsiona al seu voltant. Els electrons amb aquesta massa efectiva més gran no poden oscil·lar ràpidament seguint el camp elèctric de la llum, i la deixen passar en comptes de reflectir-la. La teoria acceptada fins al moment en responsabilitzava a les interaccions entre els propis electrons.

### Materials aptes per pantalles tàctils: transparents i conductors

Heu pensat mai de què estan fetes les pantalles tàctils dels mòbils i de les tauletes? Són d'un material transparent, és clar, però vidre no és, perquè el vidre no seria responsiu als nostres dits, ja que no és conductor. Les pantalles han de ser d'un material transparent i conductor. La majoria estan fetes d'un material semiconductor que es diu "òxid d'indi i estany", abreviat com a ITO, pel seu nom en anglès. Altres aplicacions d'aquest material són a les plaques solars, en els LEDs, en les pantalles de de cristall líquid LCD o OLED, i fins i tot en els recobriments dels parabrises dels avions.

És un material força únic, ja que en general costa molt trobar materials conductors que siguin transparents. Però tot i les múltiples avantatges que ofereix, té un problema força greu, i és que l'indi és un metall molt escàs. De fet, amb la producció tan elevada de pantalles tàctils i l'expansió de la fotovoltaica, s'estima que segurament s'acabarà abans del 2050. A més, és el component més car de qualsevol telèfon mòbil o tauleta: la pantalla tàctil representa aproximadament el 50 % del cost dels aparells. Per tot això és tan important la recerca per trobar-ne nous substituïts.

### Els electrons pesants no poden seguir la llum i la deixen passar

En general, els materials són transparents a la llum visible quan els fotons de la llum no poden ser absorbits pel material i passen a través seu sense que el seu viatge sigui interromput per interaccions amb els electrons. Això passa quan no hi ha transicions electròniques apropiades entre els estats fonamentals i els estats excitats dels electrons. Això és el que passa en els materials aïllants, que tenen una banda d'energia prohibida més gran que l'energia dels fotons, amb la qual cosa, aquests no els poden fer saltar d'un estat a un altre, i no hi ha moviment de càrregues. El vidre de les finestres seria un exemple de material transparent i aïllant.

La presència de càrregues lliures (electrons) és una característica fonamental en els metalls, que són conductors per naturalesa. En aquests materials, els electrons, sota la influència del camp elèctric de la llum, estan forçats a oscil·lar, i irradien llum en la mateixa freqüència que la llum rebuda. Això es tradueix en què els metalls solen brillar, perquè reflecteixen la llum que els arriba. A més, això mateix fa que siguin opacs, ja que la llum no els travessa.

Això explica el funcionament dels miralls, formats per una fina capa metàl·lica (darrere d'una capa protectora de vidre transparent), que reflecteix tota la llum que li arriba. I també explica perquè l'acer, l'alumini, la plata o el platí, per exemple, són incolors i molt brillants.

Com de ràpid oscil·len els electrons i la llum que reflecteixen depèn de la seva massa. Els electrons lliures són molt lleugers, per tant, molt responsius al camp elèctric de la llum, i reflectiran la llum tal com hem explicat. Ara bé, els electrons més "pesants" no poden seguir tan ràpidament les oscil·lacions que provoca el camp elèctric de la llum, i no la poden reflectir, sinó que la deixen passar sense interaccionar-hi, i el material esdevé transparent.

### Buscant un substitut de l'ITO

Ara bé, com podem aconseguir electrons "pesants"? Com podem aconseguir un metall que sigui transparent?

L'ITO és un material sintetitzat a partir d'òxid d'indi, un material aïllant amb una gran banda d'energia prohibida, i és transparent. S'aconsegueix que sigui conductor i, per tant, apte per a pantalles tàctils, perquè es dopa el material amb àtoms d'estany, que ocupen llocs dels àtoms d'indi, i el doten amb electrons addicionals. Aquests electrons lliures són els responsables que el material esdevingui conductor. Hi ha un punt òptim on el material és transparent i conductor, però si es passa aquest punt, el material esdevé més conductor però adquireix la propietat de reflexió dels metalls, i deixa de ser transparent. Aquest punt òptim ja està molt estudiat i ja no queda marge de millora en aquest sentit.

El material que han estudiat els investigadors de l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB, CSIC), pensant que podria ser un bon substitut de l'ITO, és l'òxid de vanadi i estronci. És un material metàl·lic, però, sorprenentment, s'ha vist que capes fines d'aquest material són transparents. Seguint la lògica anterior, per ser transparent, la massa dels electrons lliures hauria de ser gran. Com és possible?

### Els polarons i la nova teoria que explica la transparència dels òxids metàl·lics

L'escenari acceptat a dia d'avui per explicar la transparència d'aquest i d'altres òxids metàl·lics, és que els electrons experimenten interaccions electrostàtiques molt fortes entre ells, i ja no es poden considerar partícules independents, sinó que formen part d'un conjunt anomenat "sistema electrònic correlacionat", la qual cosa fa que la massa efectiva dels electrons sigui més gran.

Ara bé, el nou estudi, publicat a *Advanced Science* i liderat per investigadors de l'ICMAB proposa un punt de vista totalment diferent. "Pensem que l'augment de la massa efectiva dels electrons és deguda al seu acoblament amb la xarxa cristal·lina. Els electrons de l'òxid d'estronci i vanadi i, en general, dels òxids metàl·lics, es mouen en una matriu de ions (positius i negatius). Aquesta xarxa es deforma amb l'electró en moviment, i aquesta distorsió es mou amb ell. Seria com un electró vestit amb una distorsió de la xarxa que es mou a través del material. Aquest acoblament entre l'electró i la xarxa es diu "polaró", i és més pesant que l'electró lliure, així que la massa efectiva de l'electró és major, cosa que explicaria la transparència del material a la llum visible, ja que no pot seguir les oscil·lacions del camp elèctric de la llum, i la deixa passar", explica Josep Fontcuberta, investigador de l'ICMAB i líder d'aquest estudi.

Amb aquesta nova teoria es trenca el paradigma establert fins al moment en el camp de la física de la matèria condensada. Fins ara, s'acceptava que les interaccions coulombianes entre els electrons governaven les propietats dels òxids metàl·lics, en canvi, aquesta nova teoria proposa que la interacció entre els electrons i la xarxa de ions té un paper crucial. I el més important: molts dels experiments la validen.

### Un estudi des d'un altre punt de vista

L'estudi conté una anàlisi molt completa i sense precedents d'algunes de les propietats elèctriques i òptiques que queden descrites perfectament amb l'escenari dels "polarons". "En estudis anteriors s'havia vist que hi podia haver una relació, però no s'havia analitzat mai en profunditat. A més, a part de comprovar la teoria en l'òxid d'estany i vanadi, s'ha analitzat en altres òxids metàl·lics i en alguns aïllants dopats, i s'ha comprovat que les prediccions es compleixen", explica Fontcuberta.

"Aquest estudi, entre altres aspectes, és el resultat d'una caracterització molt exhaustiva de les propietats elèctriques i òptiques de dotzenes de capes fines del material en qüestió. És el resultat, també, d'una anàlisi molt curiosa de les dades, que ha permès descobrir algunes discrepàncies amb escenaris i teories establertes de fa temps. La tasca pacient i meticulosa d'en Mathieu Mirjolet, investigador predoctoral de l'ICMAB, ho han fet possible. No sé si ha sigut el descobriment més rellevant de la meua carrera, ja que no sé quin en serà el recorregut, però sí que puc assegurar que és el que millor il·lustra el meu plaer genuí de mirar la ciència i la vida des d'un altre punt de vista" afegeix Fontcuberta.

L'estudi ha estat liderat per investigadors de l'ICMAB del grup MULFOX, Josep Fontcuberta i Mathieu Mirjolet, on s'han sintetitzat els materials i s'ha portat a terme la major part de la caracterització i l'anàlisi de les dades, en col·laboració amb investigadors de la Universitat de Santiago de Compostela (F. Rivadulla) i de la Universitat de Friburg (P. Marisk), que han aportat mesures complementàries de la massa efectiva dels electrons, i amb la Universitat de Frankfurt (R. Valentí), que han col·laborat en l'anàlisi de les propietats dels polarons de les capes fines d'òxid d'estronci i vanadi.

### Article de referència:

#### **Electron–Phonon Coupling and Electron–Phonon Scattering in SrVO<sub>3</sub>**

Mathieu Mirjolet, Francisco Rivadulla, Premysl Marsik, Vladislav Borisov, Roser Valentí, Josep Fontcuberta

*Advanced Science*, 2021, 2004207

[DOI: 10.1002/advs.202004207](https://doi.org/10.1002/advs.202004207)

Per a fotos, més informació i/o entrevistes, contacteu a l'Anna May Masnou a [amay@icmab.cat](mailto:amay@icmab.cat)