

Una nueva teoría para explicar la transparencia de los óxidos metálicos

- Los electrones de los óxidos metálicos, debido a su gran masa efectiva al acoplarse con la red iónica del material, no pueden seguir el campo eléctrico de la luz y permiten su paso
- Los materiales transparentes y conductores se emplean en las pantallas táctiles de los móviles y en las placas solares para energía fotovoltaica

Investigadores del ICMAB-CSIC han liderado una nueva teoría para explicar la transparencia de algunos óxidos metálicos, que propone que la masa efectiva de los electrones es grande en este tipo de materiales debido a la formación de “polarones” o acoplamientos entre los electrones en movimiento y la red iónica del material, que se distorsiona a su alrededor. Los electrones con esta masa efectiva más grande no pueden oscilar rápidamente siguiendo el campo eléctrico de la luz, y la dejan pasar en vez de reflejarla. La teoría aceptada hasta el momento responsabilizaba a las interacciones entre los electrones mismos.

Materiales aptos para pantallas táctiles: transparentes y conductores

¿Habéis pensado alguna vez de que están hechas las pantallas táctiles de los móviles y de las tabletas? Son de un material transparente, está claro, pero vidrio no es, porque el vidrio no sería responsivo a nuestros dedos, puesto que no es conductor. Las pantallas tienen que ser de un material transparente y conductor. La mayoría están hechas de un material semiconductor que se llama “óxido de indio y estaño”, abreviado como ITO, por su nombre en inglés. Otras aplicaciones de este material son a las placas solares, en los LEDs, en las pantallas de cristal líquido LCD o OLED, e incluso en los recubrimientos de los parabrisas de los aviones.

Es un material bastante único, puesto que en general cuesta mucho encontrar materiales conductores que sean transparentes. A pesar de las múltiples ventajas que ofrece, tiene un problema bastante grave, y es que el indio es un metal muy escaso. De hecho, con la producción tan elevada de pantallas táctiles y la expansión de la fotovoltaica, se estima que seguramente se acabará antes del 2050. Además, es el componente más caro de cualquier teléfono móvil o tableta: la pantalla táctil representa aproximadamente el 50 % del coste de los aparatos. Por todo esto es tan importante la investigación para encontrar nuevos sustitutos.

Los electrones pesados no pueden seguir la luz y la dejan pasar

En general, los materiales son transparentes a la luz visible cuando los fotones de la luz no pueden ser absorbidos por el material y pasan a través suyo sin que su viaje sea interrumpido por interacciones con los electrones. Esto pasa cuando no hay transiciones electrónicas apropiadas entre los estados fundamentales y los estados excitados de los electrones. Esto es lo que pasa en los materiales aislantes, que tienen una banda de energía prohibida más grande que la energía de los fotones, con lo cual, estos no los pueden hacer saltar de un estado a otro, y no hay movimiento de cargas. El vidrio de las ventanas sería un ejemplo de material transparente y aislante.

La presencia de cargas libres (electrones) es una característica fundamental en los metales, que son conductores por naturaleza. En estos materiales, los electrones, bajo la influencia del campo eléctrico de la luz, están forzados a oscilar, e irradian luz en la misma frecuencia que la luz recibida. Esto se traduce en que los metales suelen brillar, porque reflejan la luz que les llega. Además, esto mismo hace que sean opacos, puesto que la luz no los atraviesa. Esto explica el funcionamiento de los espejos, formados por una fina capa metálica (detrás de una capa protectora de vidrio transparente), que refleja toda la luz que les llega. Y también explica porque el acero, el aluminio, la plata o el platino, por ejemplo, son incoloros y muy brillantes.

Como de rápido oscilan los electrones y la luz que reflejan depende de su masa. Los electrones libres son muy ligeros, por lo tanto, muy responsivos en el campo eléctrico de la luz, y reflejarán la luz tal como hemos explicado. Ahora bien, los electrones más “pesados” no pueden seguir tan rápidamente las oscilaciones que provoca el campo eléctrico de la luz, y no la pueden reflejar, sino que la dejan pasar sin interactuar, y el material es entonces transparente.

Buscando un sustituto del ITO

Pero, ¿cómo podemos conseguir electrones “pesados”? ¿Cómo podemos conseguir un metal que sea transparente?

El ITO es un material sintetizado a partir de óxido de indio, un material aislante con una gran banda de energía prohibida, y transparente. Se consigue que sea conductor y, por lo tanto, apto para pantallas táctiles, porque se dopa el material con átomos de estaño, que ocupan lugares de los átomos de indio, y lo dotan con electrones adicionales. Estos electrones libres son los responsables que el material sea conductor. Hay un punto óptimo donde el material es transparente y conductor, pero si se pasa este punto, el material pasa a ser más conductor, pero adquiere la propiedad de reflexión de los metales, y deja de ser transparente. Este punto óptimo ya está muy estudiado y ya no queda margen de mejora en este sentido.

El material que han estudiado los investigadores del Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB, CSIC), pensando que podría ser un buen sustituto del ITO, es el óxido de vanadio y estroncio. Es un material metálico, pero, sorprendentemente, se ha visto que capas finas de este material son transparentes. Siguiendo la lógica anterior, para ser transparente, la masa de los electrones libres tendría que ser grande. ¿Cómo es posible?

Los polarones y la nueva teoría que explica la transparencia de los óxidos metálicos

El escenario aceptado a día de hoy para explicar la transparencia de este y otros óxidos metálicos, es que los electrones experimentan interacciones electrostáticas muy fuertes entre ellos, y ya no se pueden considerar partículas independientes, sino que forman parte de un conjunto llamado “sistema electrónico correlacionado”, lo cual hace que la masa efectiva de los electrones sea más grande.

Ahora bien, el nuevo estudio, publicado en *Advanced Science* y liderado por investigadores del ICMAB propone un punto de vista totalmente diferente. “Pensamos que el aumento de la masa efectiva de los electrones es debido a su acoplamiento con la red cristalina. Los electrones del óxido de estroncio y vanadio y, en general, de los óxidos metálicos, se mueven en una matriz de iones (positivos y negativos). Esta red se deforma con el electrón en movimiento, y esta distorsión se mueve con él. Sería como un electrón vestido con una distorsión de la red que se mueve a través del material. Este acoplamiento entre el electrón y la red se llama “polarón”, y es más pesada que el electrón libre, así que la masa efectiva del electrón es mayor, cosa que explicaría la transparencia del material a la luz visible, puesto que no puede seguir las oscilaciones del campo eléctrico de la luz, y la deja pasar”, explica Josep Fontcuberta, investigador del ICMAB y líder de este estudio.

Con esta nueva teoría se rompe el paradigma establecido hasta el momento en el campo de la física de la materia condensada. Hasta ahora, se aceptaba que las interacciones coulombianas entre los electrones gobernaban las propiedades de los óxidos metálicos, en cambio, esta nueva teoría propone que la interacción entre los electrones y la red de iones tiene un papel crucial. Y lo que es más importante: muchos de los experimentos la validan.

Un estudio desde otro punto de vista

El estudio contiene un análisis muy completo y sin precedentes de algunas de las propiedades eléctricas y ópticas que quedan descritas perfectamente con el escenario de los “polarones”. “En estudios anteriores se había visto que podía haber una relación, pero no se había analizado nunca en profundidad. Además, aparte de comprobar la teoría en el óxido de estaño y vanadio, se ha analizado en otros óxidos metálicos y en algunos aislantes dopados, y se ha comprobado que las predicciones se cumplen”, explica Fontcuberta.

“Este estudio, entre otros aspectos, es el resultado de una caracterización muy exhaustiva de las propiedades eléctricas y ópticas de docenas de capas finas del material en cuestión. Es el resultado, también, de un análisis muy cuidadoso de los datos, que ha permitido descubrir algunas discrepancias con escenarios y teorías establecidas de hace tiempo. La tarea paciente y meticulosa de Mathieu Mirjolet, investigador predoctoral del ICMAB, lo han hecho posible. No sé si ha sido el descubrimiento más relevante de mi carrera, puesto que no sé cuál será su recorrido, pero sí que puedo asegurar que es el que mejor ilustra mi placer genuino de mirar la ciencia y la vida desde otro punto de vista” añade Fontcuberta.

El estudio ha sido liderado por investigadores del ICMAB del grupo MULFOX, Josep Fontcuberta y Mathieu Mirjolet, donde se han sintetizado los materiales y se ha llevado a cabo la mayor parte de la caracterización y el análisis de los datos, en colaboración con investigadores de la Universidad de Santiago de Compostela (F. Rivadulla) y de la Universidad de Friburgo (P. Marisk), que han aportado mediciones complementarias de la masa efectiva de los electrones, y con la Universidad de Frankfurt (R. Valentí), que ha colaborado en el análisis de las propiedades de los polarones de las capas finas de óxido de estroncio y vanadio.

Artículo de referencia:

Electron–Phonon Coupling and Electron–Phonon Scattering in SrVO₃

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)

Para fotos, más información y/o entrevistas, contactad con Anna May Masnou a través del correo amay@icmab.cat