

Circuiti molecolari, scoperte fra Trieste e Zurigo

Pubblicata su *Physical Chemistry Chemical Physics* la ricerca sul corannulene, molecola di carbonio

Il corannulene è una molecola di carbonio dalla forma singolare (simile al più famoso fullerene) e dalle proprietà promettenti. Un team della Sissa e dell'Università di Zurigo ha simulato al computer le proprietà di questa molecola, scoprendo che potrebbe aiutare a superare le difficoltà che oggi si hanno nel costruire circuiti molecolari (nella dimensione cioè delle molecole). La ricerca è stata pubblicata su *Physical Chemistry Chemical Physics*.

Immaginate di prendere un fullerene (C60) e tagliarlo a me-

tà, come un melone. Quello che otterrete è un corannulene (C20H10), una molecola che secondo una ricerca appena pubblicata alla quale ha collaborato la Sissa potrebbe essere un componente importante dei "circuiti molecolari" del futuro, cioè circuiti miniaturizzati alla dimensione delle molecole, utili per dispositivi elettronici di svariata natura (transistor, diodi, ecc.).

Il fullerene è una molecola molto popolare: chiamata anche buckyball, è formata da atomi di carbonio disposti in un reticolo esagonale a forma

di sfera cava. È un materiale molto studiato che esibisce proprietà interessanti in diversi campi. Anche se si sa che nel c60 esistono "stati vuoti" (di natura molto particolare, denominati buckybowl superatom state, Bss), in grado cioè di accogliere elettroni, questi si trovano ad energie molto alte, caratteristica che rende questi stati difficili da sfruttare nel ambito dei dispositivi elettronici.

Nei circuiti elettronici gli elettroni devono poter viaggiare con facilità. «Nel fullerene i livelli energetici del tipo Bss in

grado di accomodare "elettroni viaggiatori" sono difficili da raggiungere energeticamente», spiega Layla Martin-Samos, ricercatrice di Democritos Iom-Cnr e della Sissa, fra gli autori della ricerca pubblicata su *Physical Chemistry Chemical Physics*. «Il corannulene, così dicono i nostri calcoli, invece sembra molto più adatto allo scopo».

Martin-Samos e colleghi avevano già studiato le proprietà ottiche di questa molecola. «Questa volta invece ci siamo concentrati sulle proprietà elettroniche con parti-

colare enfasi sullo studio dei Bss». Le osservazioni, di natura teorica ed effettuate con delle simulazioni al computer, di Martin-Samos e colleghi mostrano che i Bss nel corannulene si trovano a energie molto più basse che nel fullerene e quindi risultano più facilmente accessibili. «Questo rende il materiale potenzialmente un ottimo candidato per costruire circuiti elettronici» continua Martin-Samos. «Se infatti si mettono una accanto all'altra delle molecole di corannulene, gli elettroni fluiranno facilmente da una molecola

all'altra, formando una sorta di canale, che costituisce il circuito».

«Il nostro lavoro non solo ha svelato la potenzialità di questa molecola, ma ha anche guidato la successiva analisi sperimentale, indicando agli scienziati cosa e dove guardare e riducendo tempi e costi della sperimentazione. I ricercatori hanno da poco finito la raccolta dei dati sperimentali e inizieranno ora l'analisi, che verificherà nella realtà quanto osservato nella nostra simulazione. Non ci resta che incrociare le dita: chissà che fra qualche mese non si possa festeggiare».

Oltre alla Sissa e al Cnr-Iom hanno partecipato allo studio l'Università di Zurigo in Svizzera e l'Università di Nova Gorica in Slovenia.