Nodi molecolari, come quelli dei velisti

Fra Trieste ed Edimburgo uno studio sulle forme dei "mattoncini" che facilitano gli assemblaggi

Trifoglio, Savoia, semplice... come si costruisce un nodo "molecolare" con una di queste forme? O ancora meglio, quali sono i pezzetti più adatti per far sì che il nodo si auto-assembli? Un team di scienziati ha studiato e catalogato che forma devono avere i "mattoncini" molecolari per potersi assemblare spontaneamente in nodi con forme specifiche, ognuna con una sua possibile utilità nelle nanotecnologie. Lo studio è stato pubblicato sulla rivista *Nature Communications*.

Lo sanno bene velisti e alpinisti: ogni nodo ha una sua fun-

zione. C'è quello che scorre, quello che "galleggia", quello che si scioglie con un solo gesto. Anche nell'ambito delle nanotecnologie è utile avere a disposizione diversi tipi di nodi molecolari da sfruttare per esempio come nano-gabbie meccanicamente resistenti per trasportare composti chimici, oppure per confinare e controllare reagenti tossici. Finora i nodi molecolari sono stati prodotti esclusivamente per sintesi chimica, ottenendo costrutti su scala atomistica.

Nello studio coordinato da Cristian Micheletti, professore

della Sissa, il team di ricercatori (provenienti anche dall'Università di Edimburgo e dall'Università di Padova) ha affrontato una sfida finora inesplorata: ottenere nodi di scala ben maggiore partendo da tasselli molecolari con forma specifica ed estremi "appiccicosi" che permettono ai frammenti di auto-assemblarsi spontaneamente. Questi tasselli lasciati liberi di muoversi e interagire in una soluzione si appiccicano l'uno con l'altro e formano delle unità tridimensionali complesse. Come si fa a ottenere un nodo di forma precisa con questo

processo? «È necessario studiare con precisione la forma del tassello - spiega Micheletti, coordinatore dello studio -. Noi lo abbiamo fatto usando le simulazioni al computer e abbiamo stilato un "catalogo" di tasselli per ogni uso». Il risultato del lavoro è stato appena pubblicato su *Nature Communications*.

Nello studio è stato simulato l'autoassemblaggio di tasselli di varia foggia che interagiscono in una soluzione virtuale, variando di volta in volta dei parametri specifici nella forma dei frammenti. «In questo modo abbiamo selezionato le forme

migliori per assemblare vari tipi di nodo» spiega Micheletti.

I nodi possono trovare applicazioni nel campo delle nanotecnologie, per costruire nano-dispositivi con diverse funzioni. «Il nostro studio - conclude Guido Polles, primo autore dello studio - dovrebbe fungere da guida per gli sperimentali che ora possono scegliere quali nodi molecolari produrre tenendo conto della loro facilità o difficoltà di assemblaggio spontaneo».

«Finora, gli sforzi di "design" dei nodi molecolari - continua Micheletti - hanno seguito la naturale progressione della complessità matematica dei nodi. Noi abbiamo scoperto che questa scala naturale di complessità non correla necessariamente con la facilità di assemblaggio».