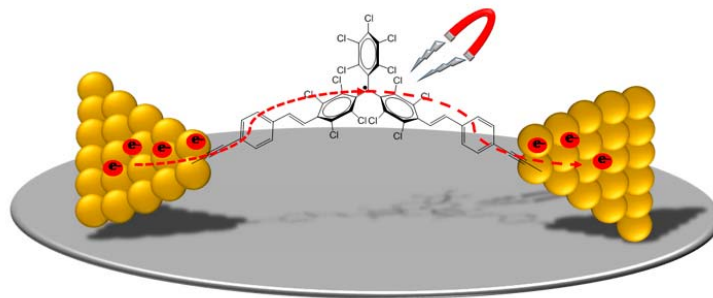


16/05/2018

Enllaços Carboni-Or per a unions molècula-elèctrode robustes



Un equip de l'ICMAB-CSIC ha investigat el comportament d'un radical orgànic com a cable molecular format a través de l'enllaç covalent carboni-or entre la molècula i dos elèctrodes. El contacte molècula-metall és més estable i geomètricament millor definit que els seus predecessors, en els quals s'empraven altres grups funcionals. Aquesta millora obre les portes a preparar nous dispositius electrònics aplicables a l'Electrònica Molecular.

Esquema de la unió molecular formada amb una molècula orgànica magnètica individual entre dos elèctrodes d'or

En l'àmbit de la tecnologia de la informació, l'increment de dades emmagatzemades ha motivat la indústria i els científics a la fabricació de dispositius electrònics més petits augmentant la seva capacitat. En aquesta direcció, els investigadors treballant en el camp de l'Electrònica Molecular pretenen utilitzar sistemes moleculars com a unitats actives en aquests dispositius enlloc del silici o altres materials inorgànics i, així, poder obtenir components de mida nanomètrica, arribant al límit de miniaturització.

Per estudiar el comportament d'aquestes molècules, cal enllaçar-les a uns elèctrodes que permetran mesurar el transport de càrrega a través d'elles. Cal dir que tot i que l'Electrònica Molecular ha progressat de forma molt remarcable en les últimes

dècades, l'estabilitat, el coneixement i el control de la geometria de l'enllaç molècula-elèctrode a escala atòmica és un factor molt crític i determinant que pot limitar el seu avenç i que segueix sent objecte d'estudi.

En aquest treball s'ha investigat el comportament d'un radical orgànic estable, magnètic i electro-actiu, com a cable molecular. La molècula estudiada té dos grups alquins terminals que permeten enllaçar-la als elèctrodes formant un enllaç carboni-or. Aquest tipus d'enllaç, malgrat estar poc explotat en aquest camp, és molt prometedor en termes d'estabilitat de la interfície i de l'acoblament electrònic molècula-elèctrode.

A través de la preparació de capes de gruix unimolecular es va confirmar la formació de l'enllaç covalent carboni-or, així com també el caràcter magnètic de la monocapa.

A partir d'aquí, es va reduir l'escala per estudiar l'enllaç i la conductància a nivell d'una sola molècula, com es veu a la figura. Per fer-ho, s'utilitza una tècnica coneguda com "*mechanically controlled break junction*" que permet obtenir una separació nanomètrica entre dos elèctrodes d'or, on posteriorment s'hi enllaça la molècula d'interès. Això s'anomena unió molecular. La reproductibilitat de les mesures de transport electrònic obtingudes dona idea de la formació d'un enllaç metall-molècula estable i geomètricament molt millor definit que quan es fan servir altres grups funcionals d'ancoratge més àmpliament estudiats com els tiols, les amines, les piridines o els isocianats.

A més a més, estudis computacionals han donat suport als experimentals. Finalment, les mesures de transport realitzades a baixes temperatures, inferiors a 10 kelvin (-263 °C), van donar lloc a l'observació d'un fenomen anomenat efecte Kondo, que està directament relacionat amb la presència d'impureses magnètiques (en aquest cas el radical) i que apareix quan la hibridació electrònica entre la impuresa i els electrons és forta.

En resum, la major estabilitat obtinguda amb l'enllaç C-Au per formar unions amb molècules individuals, i la detecció del caràcter magnètic de la molècula en la unió, obren les portes a la preparació de nous dispositius electrònics més reproduïbles per potencialment poder aplicar-se en la camp de l'(Espín)Electrònica Molecular.

Nuria Crivillers

Institut de Ciència de Materials Barcelona (ICMAB-CSIC)

ncrivillers@icmab.es

Referències