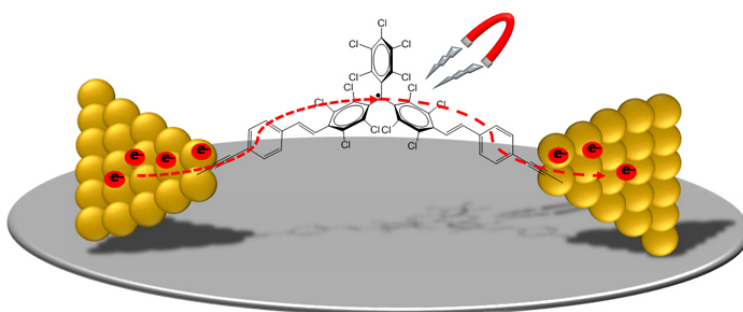


16/05/2018

## Enlaces Carbono-Oro para uniones molécula-electrodo robustas



Un equipo del ICMAB-CSIC ha investigado el comportamiento de un radical orgánico como cable molecular formado a través del enlace covalente carbono-oro entre la molécula y dos electrodos. El contacto molécula-metal es más estable y geoméricamente mejor definido que sus predecesores, en los que se empleaban otros grupos funcionales. Esta mejora abre las puertas a preparar nuevos dispositivos electrónicos aplicables en la Electrónica Molecular.

Esquema de la unión molecular formada con una molécula orgánica magnética individual entre dos electrodos de oro

En el ámbito de la tecnología de la información, el incremento de datos almacenados ha motivado a la industria y a los científicos a la fabricación de dispositivos electrónicos más pequeños aumentando su capacidad. En esta dirección, los investigadores trabajando en el campo de la Electrónica Molecular pretenden utilizar sistemas moleculares como unidades activas en estos dispositivos en lugar del silicio u otros materiales inorgánicos y, así, poder obtener componentes de medida nanométrica, llegando al límite de miniaturización.

Para estudiar el comportamiento de estas moléculas, hay que enlazarlas a unos electrodos que permitan medir el transporte de carga través de ellas. Cabe decir que a pesar de que la Electrónica Molecular ha progresado de manera muy remarcable en las últimas décadas, la estabilidad, el conocimiento y el control de la geometría de enlace molécula-electrodo a escala

atómica es un factor muy crítico y determinante que puede limitar su avance y que sigue siendo objeto de estudio.

En este trabajo se ha investigado el comportamiento de un radical orgánico estable, magnético y electro-activo, como cable molecular. La molécula estudiada tiene dos grupos alquinos terminales que permiten enlazarla a los electrodos formando un enlace carbono-oro. Este tipo de enlace, a pesar de estar poco explotado en este campo, es muy prometedor en términos de estabilidad de la interfaz y del acoplamiento electrónico molécula-electrodo.

A través de la preparación de capas de espesor unimolecular se confirmó la formación del enlace covalente carbono-oro, así como también el carácter magnético de la monocapa. A partir de aquí, se redujo la escala para estudiar el enlace y la conductancia al nivel de una sola molécula, como se ve en la figura. Para hacerlo, se utiliza una tecnología conocida como "*mechanically controlled break junction*" que permite obtener una separación nanométrica entre dos electrodos de oro, donde posteriormente se enlaza la molécula de interés. Esto se denomina unión molecular. La reproductibilidad de las medidas de transporte electrónico obtenidas dan la idea de la formación de un enlace metal-molécula estable y geoméricamente mucho mejor definido que cuando se usaban otros grupos funcionales de anclaje más ampliamente estudiados como los tioles, las aminas, las piridinas o los isocianatos.

Además, los estudios computacionales apoyaron a los experimentales. Finalmente, las medidas de transporte realizadas a bajas temperaturas, inferiores a 10 kelvin (-263 °C), dieron lugar a la observación de un fenómeno denominado efecto Kondo, que está directamente relacionado con la presencia de impurezas magnéticas (en este caso el radical) y que aparece cuando la hibridación electrónica entre la impureza y los electrones es fuerte.

En resumen, la mayor estabilidad obtenida con el enlace C-Au para formar uniones con moléculas individuales, y la detección del carácter magnético de la molécula en la unión, abren las puertas a la preparación de nuevos dispositivos electrónicos más reproducibles para potencialmente poder aplicarse en el campo de la (Espín)Electrónica Molecular.

### **Nuria Crivillers**

Institut de Ciència de Materials Barcelona (ICMAB-CSIC)

[ncrivillers@icmab.es](mailto:ncrivillers@icmab.es)

### **Referencias**

Francesc Bejarano, Ignacio Jose Olavarria-Contreras, Andrea Droghetti, Ivan RunggerII, Alexander RudnevL, Diego Gutiérrez, Marta Mas-Torrent, Jaume Veciana, Herre S. J. van der Zant, Concepció Rovira, Enrique Burzurí, and Núria Crivillers. **Robust Organic Radical Molecular Junctions Using Acetylene Terminated Groups for C–Au Bond Formation.** *J. Am. Chem. Soc.*, 2018, 140 (5), pp 1691–1696 DOI: 10.1021/jacs.7b10019

[View low-bandwidth version](#)