



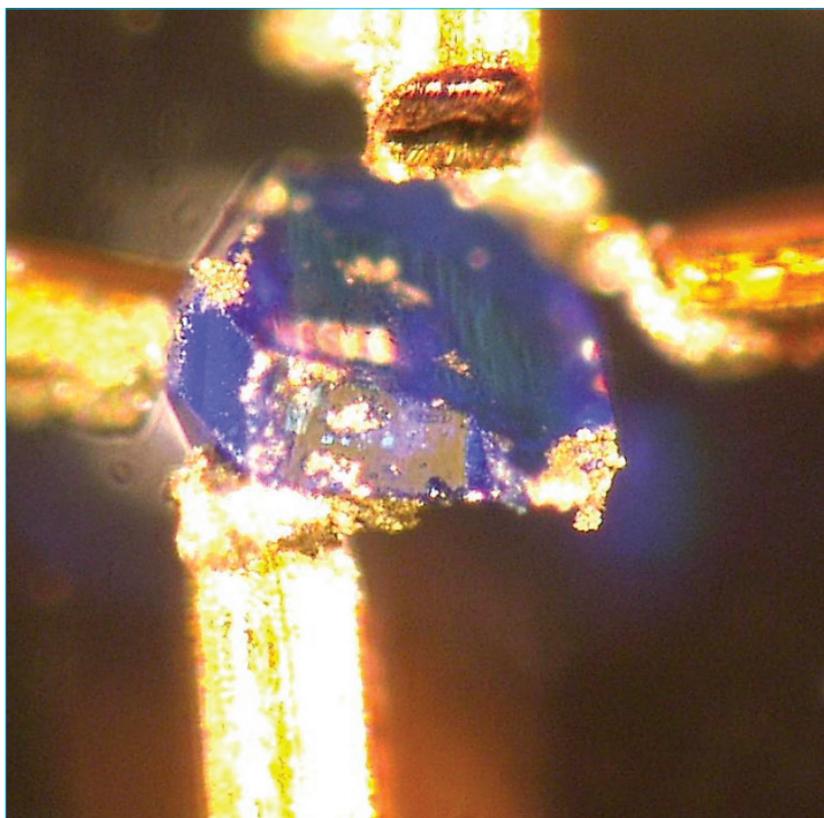
Piero Macchi

Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica, Politecnico di Milano  
e Istituto Italiano di Tecnologia, Center for Nano Science and Technology, Milano  
[piero.macchi@polimi.it](mailto:piero.macchi@polimi.it)

## LA CRISTALLOGRAFIA QUANTISTICA: APPLICAZIONI IN ELETTRONICA E SPINTRONICA

*La cristallografia e la meccanica quantistica sono strettamente collegate sin dagli albori della teoria dei quanti, che ha utilizzato la diffrazione di raggi X da cristalli per provare molte ipotesi, rendendo in cambio importanti funzioni per la determinazione sperimentale di strutture.*

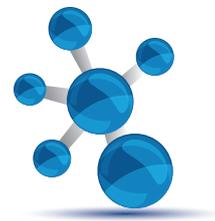
*Molti materiali cristallini sono impiegati per i loro effetti quantistici, aprendo nuovi scenari grazie ai progressi nella spintronica, che è alla base dei computer del futuro. Qual è il ruolo della cristallografia in questa nuova tecnologia?*



Per uno studente, il termine “Meccanica Quantistica” è urticante tanto quanto le parole “Hegel” o “versione di greco antico”. La fisica classica risulta di più semplice comprensione, poiché direttamente connessa ad una realtà osservabile, tangibile e di uso quotidiano.

Con la fisica classica possiamo descrivere il moto di una pallina da tennis, calcolare la rotta di un aereo, predire le posizioni dei pianeti e anticipare l’impatto di un meteorite, progettare un circuito elettrico o un impianto chimico.

La fisica quantistica, invece, ha sgretolato queste certezze, riuscendo sì a descrivere la realtà a livello atomico e subatomico, ma abbandonando il determinismo classico a favore di un’interpretazione probabilistica. In aggiunta, questo poco rassicurante risultato richiede una matematica molto complessa, infarcita di simboli particolari



che rendono il linguaggio formale della meccanica quantistica piuttosto esoterico.

La percezione comune, dunque, è che la meccanica quantistica sia di interesse per una nicchia di scienziati, ma ben poco adatta alle applicazioni industriali.

Eppure, più del 50% dell'industria elettronica produce apparati che non sarebbero nemmeno immaginabili senza le conoscenze acquisite tramite l'interpretazione quantistica della fisica.

Questo non significa che produttori e consumatori debbano conoscere la fisica dei quanti, che in effetti ignorano molto serenamente.

Tuttavia, una serie di materiali sfrutta fenomeni quantistici, a volte conosciuti (ma non capiti a pieno) anche prima dell'avvento della meccanica quantistica, altre volte volutamente ricercati proprio per la visione introdotta con la nuova fisica. Ad esempio, i semiconduttori, che dominano la moderna elettronica e informatica, sono spiegabili e prevedibili solo con la fisica dei quanti. La misurazione più accurata del tempo è quella dell'orologio atomico e si basa su un fenomeno quantistico, come anche le immagini di risonanza magnetica per diagnostica medica. Questa lista potrebbe proseguire quasi all'infinito, tanto la nostra vita quotidiana è permeata dalla fisica quantistica. E lo è ancor di più quella di scienziati e tecnologi, che utilizzano per esempio i microscopi di superficie a forza atomica o a effetto tunnel, i laser, i microscopi elettronici, la magnetoresistenza gigante per memorizzare dati in dischi rigidi, ecc.

Negli ultimi anni, inoltre, sta avvenendo una rivoluzione tecnologica fondamentale, basata ancor più strettamente sulla meccanica quantistica: lo sviluppo del computer quantistico. Il termine è probabilmente noto, ma il significato reale potrebbe sfuggire. Se fino ad oggi i computer per funzionare hanno impiegato componenti elettronici che sfruttano effetti quantistici, cosa ha di differente il "computer quantistico"? Semplice: la logica di funzionamento. Nel computer quantistico, il bit che si fonda su un classico principio elettronico binario (acceso/spento) è sostituito dal q-bit, che invece utilizza la sovrapposizione di stati elettronici quantizzati come ad esempio quelli di spin. Potremmo tradurre il q-bit in "un po' acceso e un po' spento",

che appare confondente, ma in realtà consente di immagazzinare molta più informazione. La conseguenza del passaggio dal bit al q-bit è che la meccanica quantistica non condiziona solo l'hardware ma anche il linguaggio operativo che deve interagire con esso e, di conseguenza, il software.

Una trattazione teorica del funzionamento di computer quantistici è al di fuori dello scopo del presente articolo.

Al contrario, visto l'argomento principale di questo numero de *La Chimica e l'Industria*, questo articolo cercherà di spiegare il ruolo della cristallografia nello sviluppo dei materiali per le tecnologie elettroniche avanzate e quelle quantistiche. Non prima di aver ricordato alcuni fondamenti della teoria quantistica.

### La meccanica quantistica in breve

Secondo la meccanica quantistica, lo stato di un elettrone è descritto con una funzione d'onda, poiché un elettrone si comporta sia come un'onda che come un corpuscolo (ipotesi di De Broglie, [1]). Ogni proprietà osservabile dipende dalla funzione d'onda e il movimento dell'elettrone è descritto da un'equazione del moto di un'onda (equazione di Schrödinger, [2]). Le principali conseguenze dell'ipotesi quantistica sono: gli stati elettronici sono associati a livelli discreti di energia; non possiamo conoscere simultaneamente la posizione e la quantità di moto o momento dell'elettrone (principio di Heisenberg, [3]); per questo, non possiamo conoscere la posizione istantanea di un elettrone, ma solo una probabilità di trovarlo in una certa posizione, e, complessivamente, possiamo conoscere la distribuzione spaziale di questa probabilità (ossia la densità elettronica, proporzionale al quadrato dell'ampiezza della funzione d'onda); inoltre, esistono due rappresentazioni non coincidenti di ciascuna funzione elettronica, una nello spazio delle posizioni e l'altra in quello dei momenti. Bisogna inoltre ricordare che l'elettrone possiede sia una carica (pari a ca.  $-1,0 \times 10^{-19}$  C) che uno spin. Quest'ultimo è un momento angolare intrinseco (non definibile nella fisica classica) il quale assume due possibili valori associati ad un numero quantico detto appunto numero di spin ( $m_s = \pm 1/2$ ) che determina il momento magnetico dell'elettrone.

Dunque, la densità elettronica può essere di carica oppure di spin.

Se il sistema in studio è un cristallo, ossia una ripetizione periodica di una certa unità minima di atomi o molecole, la funzione d'onda complessiva somma le onde riferibili a ciascun elettrone. Essa deve corrispondere ad una distribuzione di densità elettronica periodica.

Nei prossimi paragrafi, vedremo alcune delle applicazioni della cristallografia in ambiti in cui i materiali di natura quantistica stanno diventando sempre più importanti.

## I cristalli e la conduzione di carica

L'elettronica si fonda sulle proprietà di trasporto di un materiale, spaziando dai superconduttori agli isolanti. L'elettronica "tradizionale" è quella legata al trasporto della carica elettrica. Essa può dipendere dal movimento degli elettroni, ma anche da quello dei protoni oppure di ioni metallici, come il litio, che ha riscosso enorme interesse [4].

Un conduttore è spesso cristallino e la sua proprietà può essere spiegata attraverso le bande elettroniche (intervalli di energia in cui si collocano funzioni d'onda estese su tutto il solido e accessibili ad un elettrone).

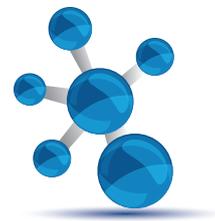
Tralasciando i metalli, le leghe metalliche e i semiconduttori intrinseci, vi sono molti materiali di nuova generazione, impiegati nell'elettronica e aventi una natura cristallina. Essi richiedono pertanto l'impiego di tecniche cristallografiche per il loro sviluppo.

Ad esempio, l'attuale interesse verso la conduzione ionica è spesso associato a studi di natura cristallografica. I catodi impiegati nelle batterie a ioni di  $\text{Li}^+$  sono materiali ceramici cristallini, ossia ossidi misti di Li e di un altro metallo più pesante (Mn, Fe, Co, Cu etc.), mentre gli anodi sono in genere in grafite, che ha la capacità di intercalare i piccoli ioni di Li. Gli studi cristallografici hanno molteplici impieghi. In primo luogo, essi possono chiarire la struttura di questi solidi e quindi consentire la formulazione di ipotesi sul meccanismo di conduzione ionica. Inoltre, consentono la progettazione di nuovi materiali che meglio soddisfino i requisiti principali, quali l'elevata densità di energia, l'assenza di effetti di memoria nella struttura

(anche se questo aspetto sembra superato) e la ridotta auto-scarica che compromette l'efficienza della batteria. Poiché il catione  $\text{Li}^+$  possiede solo due elettroni, i raggi X possono essere insufficienti a identificarne la presenza e la posizione. Infatti, la diffrazione X è proporzionale al numero di elettroni degli atomi. Per questo gli studi si avvalgono spesso di diffrazione di neutroni, particelle prive di carica, ma con massa e raggio superiori agli elettroni. La loro sezione d'urto con i nuclei degli atomi (ossia la probabilità di essere deviati dalla materia), invece, è abbastanza elevata. Possiamo semplificare dicendo che i neutroni "vedono" i nuclei atomici, mentre i raggi X "vedono" gli elettroni. Il vantaggio dei neutroni, nel caso di atomi come il Li, è il fatto che non sono sensibili al numero di particelle che costituiscono il nucleo. Quindi, anche gli atomi che hanno un piccolo numero di massa possono diffrangere i neutroni e venire localizzati.

Se anziché osservare la diffrazione elastica (ossia senza perdita di energia da parte della radiazione dopo l'urto con gli atomi) si osserva quella inelastica, l'informazione che si può ricavare non è la struttura del solido cristallino mediata nel tempo, bensì la sua dinamica. Pertanto, è possibile impiegare questa tecnica per studiare il meccanismo di trasporto degli ioni. La tecnica è molto diffusa anche per studiare i processi di trasporto che avvengono all'interno dell'elettrolita, ossia la soluzione o il gel che consente la migrazione dei portatori di carica da un elettrodo all'altro all'interno di una batteria.

Accanto a meccanismi di conduzione legati ad un trasporto di carica "tradizionale", sono oggi conosciuti anche fenomeni molto più complessi e non facilmente prevedibili se non conoscendo gli aspetti più segreti della meccanica quantistica. Ad esempio, una nuova classe di materiali è quella degli isolanti topologici [5]. Nome curioso, attribuito a materiali che pur non avendo proprietà di conduzione al loro interno, presentano proprietà metalliche sulla superficie, che consentono la circolazione degli elettroni, eliminando i negativi effetti di diffusione che ostacolano la loro mobilità. La presenza di uno stato conduttivo in superficie è la risposta del sistema all'interruzione della regolarità periodica ed è dettata dalla necessità di



conservare la simmetria (da qui l'attributo di topologici, assegnato a questi materiali). Si tratta di un effetto quantistico previsto negli anni Ottanta [6] ma osservato solo negli anni 2000 [7] in alcune leghe metalliche (ad esempio Bi-Sb). Questi materiali trovano applicazione nell'informatica e nell'elettronica, grazie alle ideali proprietà di giuntura. Infatti, essi possono essere usati come transistor in computer quantistici oppure come materiali opto-elettronici per le telecomunicazioni.

Altri materiali cristallini, che sfruttano effetti quantistici, sono quelli impiegati nelle celle fotovoltaiche. I pannelli fotovoltaici sono noti da molto tempo e sono di relativamente facile comprensione per una certa somiglianza con i semplici pannelli solari termici. Questi ultimi, tuttavia, non sono cristalli ma spesso materiali vetrosi (quindi amorfi) e sfruttano un effetto noto sin dall'antichità, legato all'accumulo di calore come conseguenza dell'assorbimento di luce solare. Al contrario, nelle celle fotovoltaiche, un materiale semiconduttore trasforma i fotoni catturati dalla luce solare in corrente elettrica. In questo caso, i materiali sono (quasi sempre) cristallini, a partire da quello più diffuso, ossia il silicio, in forma mono- o poli-cristallina, ad eccezione dei film sottili di silicio che invece sono amorfi. L'effetto sfruttato è quantistico, poiché un fotone di luce (un quanto di energia) viene impiegato per formare una coppia elettrone-buca elettronica nel semiconduttore, un processo alla base della

conduzione di carica. La capacità di un materiale di trasformare l'energia del fotone assorbito in corrente elettrica è chiamata *efficienza quantistica*.

Il ruolo della cristallografia è ancora una volta molteplice. Per le celle a silicio, non esiste l'interesse di conoscere la struttura del materiale, già molto nota, mentre sono i meccanismi di crescita del cristallo durante la sua fabbricazione a giocare un ruolo fondamentale, in particolare il controllo della direzione di crescita e quello dei difetti reticolari che possono favorire od ostacolare l'efficienza del materiale.

Più recentemente, sono stati sviluppati nuovi materiali adatti alle celle fotovoltaiche, ad esempio le pseudo-perovskiti, ossia composti con struttura simile a quella del minerale perovskite ( $\text{CaTiO}_3$ ) (Fig. 1), caratterizzato dalla sequenza di ottaedri con ai vertici atomi di ossigeno e al centro atomi di titanio. Il catione  $\text{Ca}^{2+}$ , che si inserisce nei canali lasciati liberi dagli ottaedri, viene rimpiazzato con altri cationi, anche di natura organica, al fine di massimizzare l'efficienza quantistica. Analogamente anche Ti e O possono essere sostituiti da altri elementi, ad esempio Pb e da un alogeno (I o Br), rispettivamente [8]. In pochi anni, questa nuova classe di materiali ha superato la soglia del 25% di efficienza quantistica, che è approssimativamente il limite del silicio.

Il fatto che vi sia ancora molta distanza tra la massima efficienza fino ad ora raggiunta (di poco inferiore al 50% con materiali a giuntura basati su arseniuro di gallio) e l'ideale 100% indica quanto margine vi sia ancora per la ricerca del materiale di elezione, ossia di alta efficienza, massima durata e minimo costo.

### La spintronica

Il termine spintronica [9] è un neologismo, tratto dall'inglese spintronics, contrazione di "spin electronics". Se nell'elettronica tradizionale, si sfrutta la propagazione della carica dell'elettrone, nella spintronica è lo spin dell'elettrone (trascurato per anni) a trasmettere il segnale. La principale differenza è dovuta alla sensibilità di un apparato spintronico al campo magnetico oltre che a quello elettrico. In aggiunta, mentre la carica di un elettrone è costante, lo spin ha due possibili valori (come

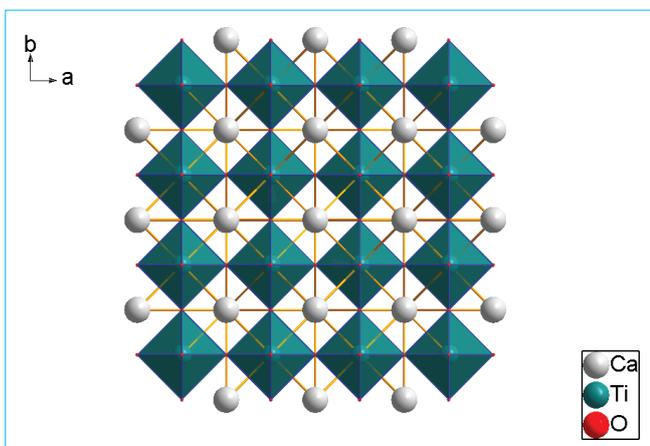


Fig. 1 - Rappresentazione di una perovskite,  $\text{CaTiO}_3$ . Al centro degli ottaedri si trovano gli atomi di Ti, ai vertici quelli di ossigeno, mentre negli spazi tra ottaedri si trovano gli atomi di Ca

visto in precedenza) corrispondenti a due diversi stati, indicati spesso come *up* e *down*, volendo rappresentare il momento di spin corrispondente a ciascuno dei due valori possibili per il numero quantico di spin. Con la spintronica, diminuisce la potenza necessaria per trasportare l'informazione, mentre aumenta la velocità.

Vi sono molti tipi di materiali e di effetti che vengono sfruttati nella spintronica, sia in alternativa che in combinazione con la propagazione della carica. Un esempio è quello dei materiali antiferromagnetici. Si tratta di composti cristallini che hanno un magnetismo locale, dovuto alla predominanza, in un atomo, di elettroni in uno stato di spin rispetto all'altro. Tuttavia, gli atomi vicini, con cui si genera un "accoppiamento" dovuto all'interazione tra i momenti magnetici, hanno spin opposto. Quindi il momento magnetico di un atomo è annullato da quello del vicino e così via. Da qui il termine anti-ferromagnetico. Nei materiali ferromagnetici, invece, i momenti magnetici sono paralleli, perché ogni atomo ha eccedenza di elettroni dello stesso numero quantico di spin. Complessivamente quindi si genera un momento magnetico.

È interessante ricordare come Louis Néel (premio Nobel nel 1970 per i suoi studi sul magnetismo) [10] definì gli antiferromagneti come "interessanti ma completamente inutili", perché non in grado di generare un momento magnetico complessivo. Tuttavia, è proprio il fatto che essi sono naturalmente privi di momento magnetico globale a renderli, oggi, molto interessanti. Infatti, sottoposti a campo magnetico, non si possono allineare ad esso e fungono quindi da eccezionali materiali per "giunture" tra strati di materiale ferromagnetico. Gli antiferromagneti trovano applicazione proprio nell'ambito dell'informatica quantistica, come memorie, e per questo motivo esiste una forte richiesta di ricerca nel settore.

I materiali antiferromagnetici di maggior impiego al momento sono semiconduttori elettronici di natura inorganica, in genere composti binari (tipo MnO, MnS, MnSe, MnTe, FeSb, FeP) o ternari (come CuFeS<sub>2</sub>, MnSiN<sub>2</sub>). Una caratteristica importante è che devono possedere un'elevata temperatura di Néel, al di sotto della quale formano un sistema antiferromagnetico ordinato e periodico. Come per

le celle fotovoltaiche, la ricerca si sta muovendo anche nei confronti di materiali ibridi e metallo-organici, sebbene al momento fortemente penalizzati da temperature di Néel piuttosto basse (inferiori a 100 K) che li rendono poco impiegabili. Tuttavia, la possibilità di modificare la temperatura di Néel di questi materiali esiste, ponendoli, ad esempio, sotto elevata pressione [11], che ha spesso la funzione di preservare gli ordinamenti magnetici an-

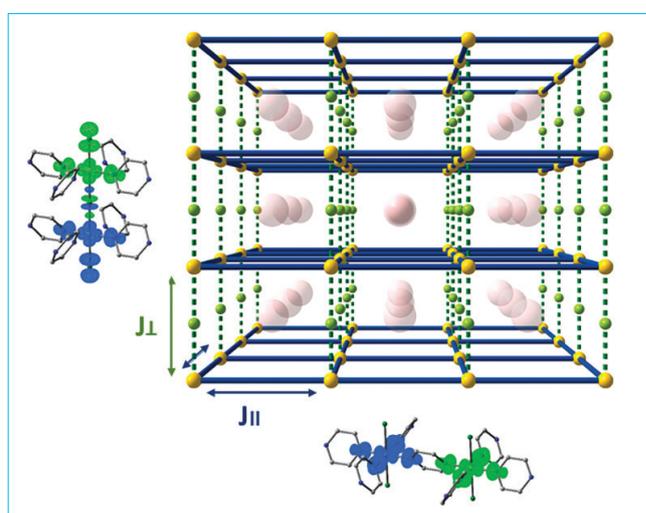
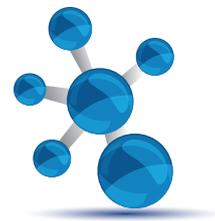


Fig. 2 - Schema della struttura magnetica in cristalli di  $[\text{Cu}(\text{pyz})_2\text{X}][\text{BF}_4]$  (pyz=pirazina,  $\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2$ ; X=Cl, Br), appartenenti al sistema cristallino tetragonale. Le sfere gialle sono atomi di  $\text{Cu}^{2+}$ , quelle verdi sono  $\text{Cl}^-$  o  $\text{Br}^-$ , che congiungono due metalli attraverso un legame perpendicolare al piano tetragonale. Le molecole di pirazina, che congiungono due atomi metallici parallelamente al piano tetragonale, sono rappresentate con una linea blu, mentre gli anioni  $\text{BF}_4^-$  sono sfere rosa al centro dei canali.  $\text{Cu}^{2+}$  è un catione magnetico, avendo un numero dispari di elettroni e quindi un eccesso di elettroni in uno dei due stati di spin. Inoltre, esso possiede una direzione sfavorevole per la coordinazione di un legante, a causa dell'effetto Jahn-Teller. La direzione debole è quella perpendicolare che connette i due metalli tramite  $\text{Cl}^-$  o  $\text{Br}^-$ . L'accoppiamento tra atomi di rame avviene necessariamente attraverso i leganti ed è di tipo antiferromagnetico. Nelle figure ai lati del reticolo si vede la distribuzione della densità di spin nelle due direzioni (le due direzioni parallele al piano sono equivalenti per simmetria). I due colori rappresentano i due possibili stati di spin, che si alternano. Inoltre, si può notare come l'eccesso di spin non sia localizzato solo sullo ione metallico, ma si delocalizza in parte anche sui leganti. A pressione ambiente, la costante di accoppiamento parallelo è di due ordini di grandezza superiore all'altra. Ad una pressione superiore a 10 GPa, tuttavia, la direzione di legame debole è notevolmente compressa e l'accoppiamento perpendicolare diviene eguale o addirittura superiore a quello parallelo, che si riduce del 50% ca. Questa modifica trasforma il reticolo magnetico quasi-bidimensionale (termine impiegato appunto per indicare l'assenza di interazione magnetica in una direzione) in reticolo magnetico tridimensionale. Per maggiori dettagli, si veda la referenza [12]



che a temperature più elevate. Inoltre, i materiali sotto pressione possono trasformarsi e modificare anche radicalmente il loro ordinamento magnetico [12], caratteristica che potrebbe essere sfruttata per fabbricare degli interruttori. Si veda un esempio di questi materiali in Fig. 2.

### Il rapporto tra cristallografia e meccanica quantistica. Quali sviluppi?

Come anticipato nell'articolo introduttivo di questo numero, la scoperta dei raggi X ha rivoluzionato la cristallografia consentendo la determinazione accurata della posizione degli atomi nel cristallo e quindi della struttura atomica di un materiale. Accanto a questo rivoluzionario percorso scientifico, già i primi scienziati pionieri della nuova tecnica - ad esempio, W.L. Bragg (da cui la famosa legge), A.H. Compton (scopritore della diffrazione anelastica) e P. Debye (noto soprattutto nell'ambito della diffrazione di policristalli) - si resero conto che la diffrazione di raggi X poteva fornire informazioni non solo riguardanti la posizione degli atomi, ma anche la loro struttura elettronica. Infatti, il fenomeno di diffusione di raggi X da parte di un atomo è dovuto all'interazione dei suoi elettroni, carichi negativamente, con il campo elettrico della radiazione. Pertanto, accanto agli impieghi più noti della diffrazione di raggi X da cristalli, che hanno condotto alla determinazione della struttura del DNA, dell'emoglobina, dell'RNA ecc., si è sviluppato anche un ambito, più ristretto ma di frontiera, dedicato alla determinazione di strutture elettroniche degli atomi e delle molecole presenti nei cristalli.

Con struttura elettronica si intende sia la distribuzione degli elettroni (nello spazio delle posizioni o dei momenti) che la loro energia. Inoltre, poiché gli elettroni possiedono sia carica che spin, le analisi riguardano appunto entrambe le distribuzioni, la densità di carica elettrica e la densità di spin.

Come detto, la densità di carica elettronica viene determinata tramite la diffrazione di raggi X. Per rivelare la densità di spin, si può analizzare una (piccola) componente magnetica della diffrazione X, oppure la diffrazione di raggi di neutroni. Questi ultimi, non hanno carica né campo elettrico e quindi non sono sensibili alla densità di carica del materiale che attraversano, ma hanno uno spin come

quello degli elettroni e possono essere opportunamente polarizzati in modo da rivelare la densità di spin nel cristallo e gli accoppiamenti magnetici nei materiali impiegati per la spintronica.

Le potenzialità della cristallografia quantistica [13] non finiscono qui. Nonostante sia sempre stato ritenuto concettualmente impossibile determinare la funzione d'onda di un elettrone (e quindi quella di un atomo, di una molecola e di un cristallo), perché essa non è un'osservabile in senso fisico, alcune moderne metodologie [14] consentono di ottenere una buona approssimazione della stessa. Questo è vero sia per il cristallo nel suo complesso (il cosiddetto bulk), che per molecole ancorate sulla superficie di un cristallo [15].

Cosa significa conoscere la funzione d'onda? Come anticipato precedentemente, in termini quantomeccanici la funzione d'onda è "tutto", poiché essa descrive lo stato di un sistema e consente di calcolarne qualunque proprietà.

Gli studi nell'ambito della cristallografia quantistica sono ancora agli albori, ma la tendenza quantistica nella moderna scienza dei materiali sembra avere esattamente bisogno di questo tipo di approccio scientifico.

### Conclusioni

I materiali impiegati nell'informatica e nelle telecomunicazioni stanno diventando sempre più *quantistici*. Secondo Samarth [16], sono materiali quantistici quelli che mostrano proprietà non spiegabili con la fisica classica, ad esempio la natura topologica della funzione d'onda (isolanti e semimetalli topologici), proprietà dovute al fenomeno di intreccio (in inglese, *entanglement*) di stati quantistici, la superconduzione, ecc. Una vasta parte di questi materiali sono di natura cristallina, pertanto richiedono un notevole impiego dell'esperienza maturata nell'ambito cristallografico per la crescita di cristalli, per la determinazione della struttura interna o di quella superficiale, per lo studio delle caratteristiche e delle proprietà ottiche, elettroniche e magnetiche.

L'intreccio tra cristallografia e meccanica quantistica è sempre stato molto saldo, soprattutto per la formazione di conoscenze utili al progresso della scienza di base, in particolare per la chimica e la

fisica. Oggi questa simbiosi è sempre più importante anche per lo sviluppo tecnologico.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] L. De Broglie *Nature*, 1926, **118**, 441.
- [2] E. Schrödinger *ann. Phys.*, 1926, **384**, 361.
- [3] W. Heisenberg *Z. Phys.*, 1927, **43**, 172.
- [4] K. Mizushima *et al.*, *Mater. Res. Bull.*, 1980, **15**, 783.
- [5] J.E. Moore, *Nature*, 2010, **464**, 194.
- [6] O.A. Pankratov *et al.*, *Solid State Communications*, 1987, **61**, 93.
- [7] M. König *et al.* *Science*, 2007, **318**, 766.
- [8] A. Kojima *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, **131**, 6050.
- [9] S.A. Wolf *et al.*, *Science*, 2001, **294**, 1488.
- [10] L. Néel, "Magnetism and the local molecular field", Nobel Lectures, Physics 1963-1970, 1970.
- [11] B. Wehinger *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, 2018, **121**, 117201.
- [12] R. Scatena *et al.*, *Inorg. Chem.*, 2020, **59**, 10091.
- [13] P. Macchi, *Quantum Crystallography*, De Gruyter, 2021, in pubblicazione.
- [14] D. Jayatilaka, *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **80**, 798.
- [15] A. Bellec *et al.*, *Nano Lett.*, 2009, **9**, 144.
- [16] N. Samarth, *Nature Materials*, 2017, **16**, 1068.

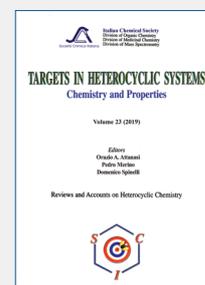
### Quantum Crystallography: Applications in Electronics and Spintronics

Crystallography and Quantum mechanics are tightly connected, since the early days of quantum theory, that took advantage from a number of observations of X-ray diffraction from crystals and that returned important functions necessary to determine crystal structures. There are crystalline materials, which are quantum materials. In this context, excellent new opportunities emerge, thanks to the progresses in the field of spintronics, which is fundamental for the new quantum computers and other quantum-related technologies. Which role plays crystallography in this field?

## LIBRI E RIVISTE SCI

### Targets in Heterocyclic Systems Vol. 23

È disponibile il 23° volume della serie "Targets in Heterocyclic Systems", a cura di Orazio A. Attanasi, Pedro Merino e Domenico Spinelli  
[http://www.soc.chim.it/it/libri\\_collane/th/vol\\_23\\_2019](http://www.soc.chim.it/it/libri_collane/th/vol_23_2019)



Sono disponibili anche i volumi 1-22 della serie.

I seguenti volumi sono a disposizione dei Soci gratuitamente, è richiesto soltanto un contributo spese di € 10:

- G. Scorrano "La Storia della SCI", Edises, Napoli, 2009 (pp. 195)
- G. Scorrano "Chimica un racconto dai manifesti", Canova Edizioni, Treviso, 2009 (pp. 180)
- AA.VV. CnS "La Storia della Chimica" numero speciale, Edizioni SCI, Roma 2007 (pp. 151)
- AA.VV. "Innovazione chimica per l'applicazione del REACH" Edizioni SCI, Milano, 2009 (pp. 64)

Oltre "La Chimica e l'Industria", organo ufficiale della Società Chimica Italiana, e "CnS - La Chimica nella Scuola", organo ufficiale della Divisione di Didattica della SCI ([www.soc.chim.it/riviste/cns/catalogo](http://www.soc.chim.it/riviste/cns/catalogo)), rilevante è la pubblicazione, congiuntamente ad altre Società Chimiche Europee, di riviste scientifiche di alto livello internazionale:

- ChemPubSoc Europe Journal
- Chemistry A European Journal
- EURJOC
- EURJIC
- ChemBioChem
- ChemMedChem
- ChemSusChem
- Chemistry Open
  
- ChemPubSoc Europe Sister Journals
- Chemistry An Asian Journal
- Asian Journal of Organic Chemistry
- Angewandte Chemie
- Analytical & Bioanalytical Chemistry
- PCCP, Physical Chemistry Chemical Physics

**Per informazioni e ordini telefonare in sede,  
06 8549691/8553968, o inviare un messaggio  
a [ufficiocongressi@soc.chim.it](mailto:ufficiocongressi@soc.chim.it)**