

## Actualité scientifique INSIS

16 février 2015

**Réseaux supramoléculaires sur une surface : moins le réseau est compact et plus les molécules sont liées entre elles !**

**Sur une surface inerte de silicium, une même molécule peut conduire à plusieurs formes cristallines. Pour certaines molécules, le cristal le plus stable, qui présente le plus grand nombre de liaisons chimiques entre molécules, est aussi celui qui correspond à une phase peu dense. Ce résultat contre-intuitif a été obtenu par des chercheurs de l'IEMN et de l'Institut FEMTO-ST en combinant observations au microscope à effet-tunnel et simulations numériques. Publié dans *Physical Review Letters*, il démontre l'influence de la surface sur le contrôle du degré de compacité et de coordination des réseaux moléculaires.**

Les molécules organiques sont connues pour s'assembler et donner des cristaux dont les propriétés physiques et chimiques sont intimement liées à l'arrangement des molécules dans le cristal. La compréhension des phénomènes de cristallisation, qui entraînent la formation préférentielle d'un cristal par rapport à un autre, est un des enjeux majeurs de secteurs comme l'électronique moléculaire et l'industrie pharmaceutique (où l'agencement peut modifier le goût ou la solubilité d'un médicament). Généralement, dans un cristal moléculaire à trois dimensions, le nombre d'interactions entre molécules croît avec la densité de molécules. C'est également ce que l'on observe dans la vie courante, par exemple dans le métro, où les interactions (ou contacts) augmentent avec la densité des personnes aux heures de pointe.

Dans cette étude, les chercheurs de l'Institut d'électronique, de microélectronique et des nanotechnologies (IEMN, CNRS/Université Lille 1/Université de Valenciennes/ISEN Lille/Ecole Centrale de Lille) et de l'Institut FEMTO-ST (CNRS/Université de Franche-Comté/Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et des Microtechnologies de Besançon) ont voulu vérifier si ce principe était également valable dans un plan moléculaire unique, à deux dimensions.

Ils ont réalisé des observations moléculaires par microscopie à effet tunnel (technique capable d'imager une seule molécule) sur des surfaces de silicium constituant un plan moléculaire unique. Ils montrent que, pour certaines molécules, le plan le plus stable consiste en une phase peu dense, qui présente plus d'interactions entre les molécules que dans la phase la plus dense. Pour comprendre l'origine de ce phénomène contre-intuitif, les chercheurs ont développé un code de simulation numérique prenant en compte les interactions entre molécules mais aussi les interactions avec la surface sur laquelle le cristal est fabriqué. Cette modélisation a mis en évidence que la surface du support contribue de manière non négligeable dans l'émergence d'un cristal en particulier.

Optimiser la structure d'assemblages supramoléculaires à la surface des matériaux est un atout pour contrôler la réactivité chimique, la mouillabilité et la réflectivité de ces surfaces. Grâce à la modélisation, il est possible de jouer sur des paramètres tels que la quantité de molécules déposées, la température ou les propriétés physico-chimiques de la surface pour passer d'une forme cristalline à une autre. Les chercheurs peuvent ainsi explorer de nouvelles formes cristallines pour finalement obtenir une forme optimale, et parfois inattendue, à moindre coût. Ce travail réalisé sur un support de silicium ouvre en outre de nouvelles perspectives pour interfacer ce matériau indispensable à l'essor des nouvelles technologies.



www.cnrs.fr

Institut des sciences de l'ingénierie et des systèmes

CNRS

3 rue Michel-Ange 75794 Paris Cedex 16

www.cnrs.fr/insis

Ces travaux ont été réalisés dans le cadre des plateformes de nanotechnologies de l'IEMN et de FEMTO-ST qui font partie du réseau Renatech (<https://www.renatech.org>).

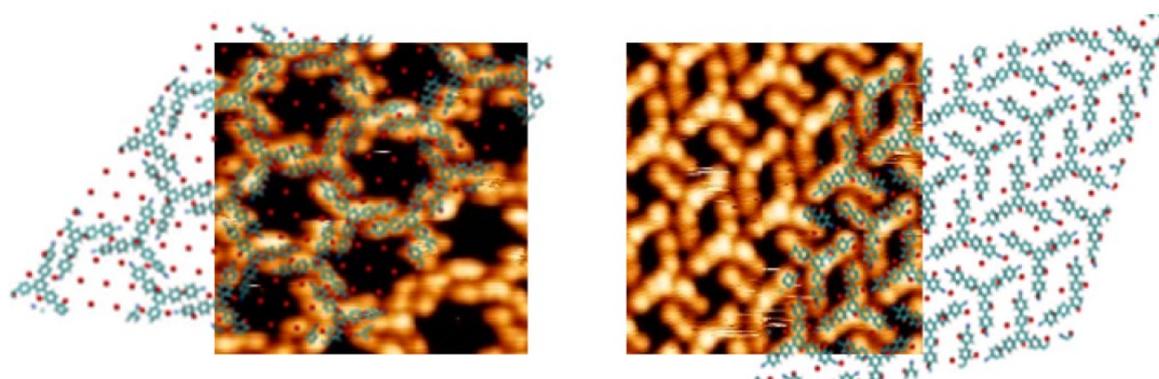
### Références :

Surface-Induced Optimal Packing of Two-Dimensional Molecular Networks

Guillaume Copie, Fabrizio Cleri, Younes Makoudi, Christophe Krzeminski, Maxime Berthe, Frédéric Chérioux, Frank Palmino, et Bruno Grandidier

*Physical Review Letters*, publié le 13 février 2015

DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.066101>



© FEMTO-ST/IEMN

A gauche, le réseau est peu compact (poreux avec des trous hexagonaux) et les interactions sont maximales.

A droite, le réseau est plus compact mais les interactions sont plus faibles.

Les modèles (en surimpression) sont en accord avec les images expérimentales obtenues par microscopie à effet tunnel avec une résolution sub-moléculaire (échelle  $10 \times 10 \text{ nm}^2$ ).

### Contacts :

Bruno Grandidier

Institut d'électronique, de microélectronique et de nanotechnologie (IEMN)

[bruno.grandidier@isen.iemn.univ-lille1.fr](mailto:bruno.grandidier@isen.iemn.univ-lille1.fr)

Frédéric Chérioux

Institut FEMTO-ST

[frederic.cherioux@femto-st.fr](mailto:frederic.cherioux@femto-st.fr)