
Etude théorique de l'auto-assemblage de molécules fonctionnelles sur les surfaces d'or Au(111) et de graphène

Mahamadou Seydou*†¹

¹Laboratoire interface, traitement, organisation et dynamique des systèmes (ITODYS) – Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, – 18, rue Jean Antoine de Baïf, France

Résumé

Ce papier présente les résultats de l'étude menée sur l'auto-assemblage de mélamine et de naphthalene tetracarboxylic diimide (NTCDI) sur la face (111) de l'or et le graphène. Cette étude a été effectuée à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT avec la prise en compte de la dispersion selon la méthode semi-empirique développée par Grimme [1].

Les résultats montrent que l'adsorption de molécules isolées est endothermique sur l'or alors qu'elle est exothermique sur le graphène. En revanche les réseaux bidimensionnels s'adsorbent favorablement sur les deux surfaces [2-3]. L'interaction entre les systèmes moléculaires et les surfaces est essentiellement dipolaire ou pi-pi. La contribution de la dispersion est très importante et compte pour 30 à 60% des énergies d'adsorption selon les systèmes moléculaires.

Pour valider, nos résultats théoriques, ils sont confrontés directement à l'expérience pour interpréter les images STM expérimentales réalisées sur les mêmes systèmes.

Grimme, S. *Journal of Computational Chemistry* **2006**, 27, 1787.

Seydou, M. ; Teyssandier, J. ; Battaglini, N. ; Kenfac G. T. ; Lang, P. ; Mayrel, F. ; Tielens, F. ; Diawara, B. ; *RSC Adv.*, 2014; DOI: 10.1039/C4RA02717E.

Mura, M.; Martsinovich, N.; Kantorovich, L. *Nanotechnology* **2008**, 19, 465704.

Mots-Clés: graphene, graphite, auto, assemblage, réseau supramoléculaire, DFT, dispersion

*Intervenant

†Auteur correspondant: mahamadou.seydou@univ-paris-diderot.fr