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

*Mahamadou Seydou1, Ambroise Quesne Turin1, François Maurel1, Boubakar Diawara2*

1Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, ITODYS, UMR 7086 CNRS, 15 rue J.-A. de Baïf, 75205 Paris cedex 13, France.

2Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris, IRCP Institut de Recherche de Chimie Paris, 11, rue Pierre et Marie Curie 75005 Paris.

**Résumé**

Ce papier présente les résultats de l’étude menée sur l’auto-assemblage de mélamine et de naphtalene tetracarboxilic 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 -. 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.

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

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

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