

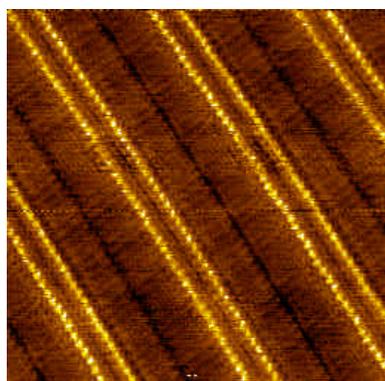
THESE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE PARIS VI

Soutenance, le 5 Octobre 2007 à 14h00
Université Paris VI Campus Jussieu, Amphi. Chouard

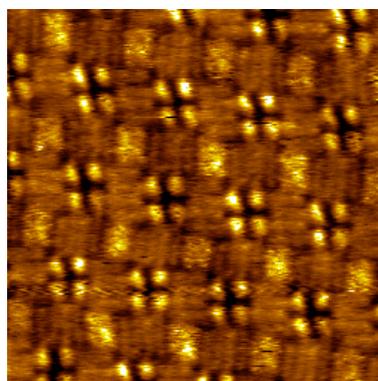
Importance des interactions faibles dans l'adsorption de molécules organiques fonctionnelles sur des surfaces atomiquement planes : approche expérimentale et théorique.

Alexandre Popoff

Le travail développé dans cette thèse porte sur l'étude du rôle joué par les interactions faibles dans l'auto-assemblage à l'échelle nanométrique de molécules organiques sur des surfaces conductrices atomiquement planes. Le terme «interactions faibles» désigne par exemple les interactions de Van der Waals ou bien encore les liaisons hydrogène. Les nanostructures formées sont étudiées dans les conditions ambiantes par microscopie tunnel à balayage (Scanning Tunneling Microscopy, STM) à l'interface liquide-solide sur des surfaces d'or Au(111) ou de graphite HOPG. Des calculs théoriques sont également menés afin de quantifier les interactions mises en jeu, notamment les liaisons hydrogènes. Dans un premier temps, l'adsorption de deux séries de molécules, des cétones propargyliques et des acides propioliques, est observée sur Au(111). Les auto-assemblages obtenus sont expliqués par la nature des groupements chimiques présents et de leur interaction avec la surface d'or. La seconde partie étudie l'importance des liaisons hydrogènes inter-moléculaires dites « faibles » au travers de systèmes aromatiques modèles de type nitro-benzène ou pyridine. Les calculs *ab-initio* permettent de déterminer les géométries d'interaction et les énergies correspondantes et donc de rationaliser les auto-assemblages observés. Dans un dernier temps, les résultats développés sont utilisés afin d'immobiliser des molécules organiques fonctionnelles sur l'or ou le graphite. Des monocouches de pro-drogues du paracétamol et de la benzocaïne sont ainsi réalisées. La formation de nanostructures à partir de dérivés de type nitroamine est également étudiée, en vue d'applications pour l'électronique moléculaire.



Monocouche de palmitamide de benzocaïne sur graphite HOPG



Monocouche en "tissu écossais" formée sous l'influence de liaisons hydrogènes "faibles"