

Les comptes des mille et

Les nanostructures formées de quelques molécules seulement sur des surfaces sont considérées comme les composants possibles de l'électronique et de l'opto-électronique du futur. Pour cela il faut toutefois connaître exactement comment ces structures se forment. Des chercheurs de l'Empa tentent de l'élucider à l'aide de simulations sur ordinateur capables de calculer le comportement de plus de 1000 atomes entre eux; ils désirent aussi trouver par là comment influencer de manière ciblée la formation de ces structures.

TEXTE: Laura Meier / PHOTOS: Empa

Des nanostructures qui s'organisent d'elles-mêmes sur des surfaces pourraient dans l'avenir donner naissance à des transistors, des diodes ou des capteurs moléculaires mais aussi à de nouvelles surfaces fonctionnelles possédant des propriétés bien définies. Pour pouvoir produire des nanocomposants à partir de ces complexes de molécules, les chercheurs doivent tout d'abord connaître comment cette auto-organisation se déroule exactement sur les surfaces.

C'est en effet la nature de la surface – plus précisément sa composition chimique, sa structure et d'autres facteurs encore – qui détermine quelles sont les réactions chimiques susceptibles de se produire ou non dans cet environnement bidimensionnel. C'est elle, par exemple, qui empêche les molécules de s'orienter au hasard sur elle. Cela entre autres du fait des forces qui agissent entre la surface et les molécules de même qu'entre les molécules entre elles et qui contraignent les molécules à occuper une position déterminée.

Simulation du comportement des molécules

Les chercheurs du laboratoire «nanotech@surfaces» de l'Empa étudient au moyen d'expériences et de simulations ces phénomènes d'auto-assemblage. Les simulations sont du ressort de l'équipe de Daniele Passerone qui procède à des calculs pour différentes molécules, telles que par exemple des polymères de type graphène, sur différentes surfaces, le plus souvent en métaux tels que l'or, l'argent ou le cuivre.

Les calculs conventionnels des propriétés de molécules reposent sur la description des mouvements de chacun de leurs électrons pris isolément, ce qui les rend très complexes dès qu'il faut prendre en compte de nombreuses molécules. Dans les années 60, le futur prix Nobel Walter Kohn a toutefois démontré qu'il n'était pas nécessaire de tenir compte des mouvements de chaque électron isolément. L'énergie et des autres propriétés du système dépendent seulement du nombre d'électrons qui se trouvent en chaque point de l'espace. Cette théorie dénommée théorie de la fonctionnelle de la densité a permis de développer des méthodes de si-

mulation plus simples qui ont permis pour la première fois d'étudier de très grosses molécules. C'est aussi sur cette théorie de la fonctionnelle de la densité que reposent les simulations qu'effectuent les chercheurs de l'Empa.

Les polymères de type graphène: élucidation des voies de réaction

Le graphène et les polymères de type graphène sont actuellement un thème de recherche très prisé. C'est ainsi que l'année dernière le «Prix Körber pour la science européenne» doté de 750 000 Euros a été attribué aux fondateurs de la recherche sur le graphène. Le graphène n'est pas seulement plus dur que le diamant et extrêmement résistant mais aussi imperméable aux gaz. Ce matériau est formé d'une couche bidimensionnelle de carbone dans laquelle les atomes de carbone sont disposés en hexagones. L'enroulement de la couche sur elle-même donne naissance à des nanotubes de carbone et son empilement, à du graphite.

Son excellente conductibilité électrique rend le graphène intéressant en électronique comme remplaçant possible du si-

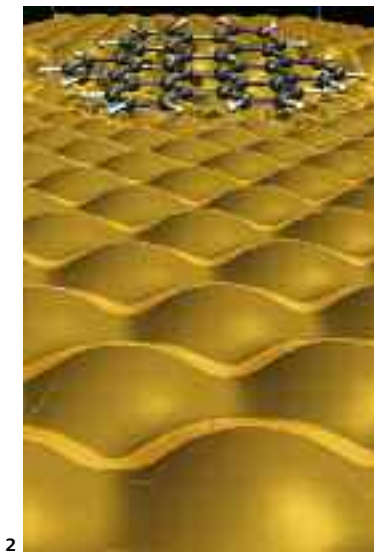
un atome

1

Leur excellente conductivité électrique fait du graphène et des polymères de type graphène des candidats intéressants pour l'électronique. Pour cela, il faudrait toutefois pouvoir moduler de manière ciblée cette conductivité – par exemple en produisant par auto-organisation à partir de molécules des polymères de type graphène présentant des trous de la «bonne» taille aux «bons» endroits. A l'aide de simulations portant sur plus de 500 atomes, des chercheurs de l'Empa étudient quelles sont les étapes intermédiaires d'un tel auto-assemblage.

licium. Pour cela, les chercheurs devraient toutefois pouvoir moduler sa conductivité – par exemple en créant de manière contrôlée des trous dans la grille de graphène ou en produisant par auto-organisation des polymères de type graphène qui présentent aux «bons» endroits des trous de la «bonne» taille.

A l'aide de simulations, l'équipe de Passerone a étudié quelles sont les étapes intermédiaires par lesquelles passe un tel auto-assemblage. Pour cela elle a effectué, en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité, des calculs portant sur plus de 500 atomes. Ces calculs ont montré que cet auto-assemblage passe aussi bien par des voies de réaction accélérées par l'action catalysatrice de la surface que par des voies de réaction qui se produisent aussi sans catalyse. Ces calculs ont aussi mis en évidence que les forces qui rendent l'auto-assemblage des systèmes ana-



2

l'or. On sait toutefois que même les surfaces les plus lisses ne sont pas réellement planes mais légèrement ondulées, comme l'avaient déjà montré des examens dans le microscope électronique. Dans une simulation, les chercheurs de l'Empa ont maintenant confirmé et démontré que les molécules ne se fixent pas partout sur une telle surface ondulée. Portant sur 1700 atomes, cette simulation est l'un des calculs ab initio de plus grande ampleur effectués jusqu'ici à l'Empa. Pour cela, il fallait aussi disposer d'un superordinateur, à savoir celui du Centre suisse de calcul scientifique à Manno.

2

Une surface d'or aussi lisse soit-elle n'est jamais vraiment plane mais légèrement ondulée. Cela du fait de l'agencement entre eux des atomes d'or. A l'aide d'une simulation portant sur 1700 atomes, les chercheurs de l'Empa ont montré que les molécules organiques ne se fixent pas n'importe où sur une telle surface ondulée.

lysés plus efficace sont les forces de van-der-Waals, une interaction relativement faible qui se produit entre les atomes et les molécules.

Des surfaces d'or fonctionnant comme pochoirs

On utilise souvent des métaux comme surface pour cet auto-assemblage, ainsi aussi de

La cause de l'ondulation des surfaces réside dans l'agencement des atomes d'or. Pour expliquer comment les atomes d'or s'agencent entre eux, on peut les considérer comme des sphères. Il existe plusieurs manières de réaliser par empilement des assemblages aussi compacts que possible, les plus connus étant l'assemblage hexagonal compact (hcp) et l'assemblage cubique à face centrée (fcc). Toutefois les atomes ne se comportent pas simplement comme des sphères car les électrons qui se déplacent librement entre les atomes agissent comme une «colle», ce qui conduit à des effets inattendus, entre autre aussi à l'alternance d'assemblages hcp et fcc qui produit cette ondulation de la surface.

La simulation effectuée par les chercheurs de l'Empa a aussi confirmé que les molécules organiques, telles que celles étudiées pour servir de semi-conducteurs, se déposent de manière préférentielle sur un de ces deux types d'assemblages. Ces connaissances fondamentales pourraient servir un jour à réaliser de manière ciblée des ondulations superficielles utilisables comme «pochoirs» pour produire par exemple des composants électroniques ou opto-électroniques. //