

## Films moléculaires quasipériodiques

É. Gaudry<sup>1</sup>, V. Fournée<sup>1</sup>, J. Ledieu<sup>1</sup>, M.-C. De Weerd<sup>1</sup>, D.M. Wu<sup>2</sup>, T. Lograsso<sup>2</sup>

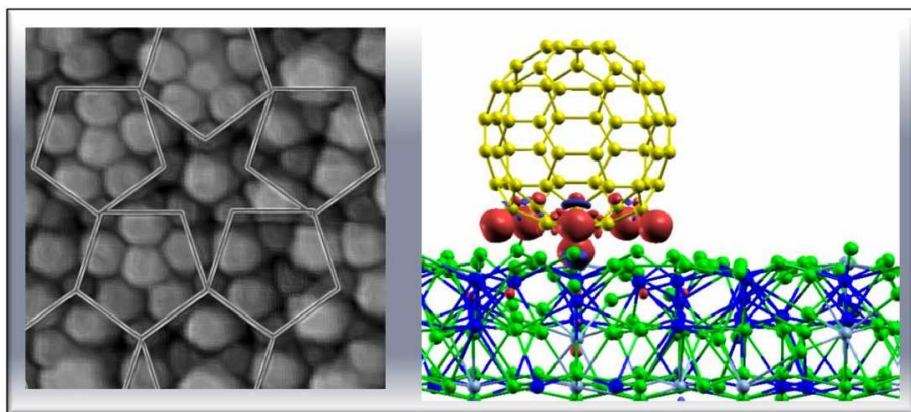
<sup>1</sup> Institut Jean Lamour, UMR 7198 CNRS-Université de Lorraine, Nancy, France

<sup>2</sup> The Ames Laboratory, Iowa State University, Ames IA 50011, USA

L'arrangement (distances intermoléculaires, orientations) de molécules  $C_{60}$  déposées sur une surface métallique est contrôlé par l'équilibre entre les interactions intermoléculaires, plutôt faibles, et les interactions molécule-substrat, généralement plus fortes, ces dernières interactions étant associées à différents types de liaisons. Si l'on exclut les reconstructions de surface, et si l'on considère uniquement la couche d'extrême surface, les surfaces compactes des métaux simples n'offrent qu'un nombre limité de symétries (miroirs et axes d'ordre 2 et 3). La correspondance des symétries de la molécule et de la surface conduit généralement à des configurations où la molécule est adsorbée sur des sites "top" ou "hollow" (face hexagonale de  $C_{60}$  contre la surface), ou sur des sites "bridge" via une liaison C-C de la molécule  $C_{60}$  [1].

Les quasicristaux icosaédriques, de structure aperiodique, possèdent les symétries de l'icosaèdre (axes d'ordre 2, 3 et 5). Lorsqu'elles sont préparées sous ultra-vide, leurs surfaces résultent d'une troncature du système massif, avec une sélection en surface de plans spécifiques comme terminaison de surface [2]. Ces plans de surface comprennent notamment des configurations locales de symétrie d'ordre 5, et l'on peut ainsi imaginer la croissance de nouvelles structures moléculaires quasipériodiques à partir de ce type de substrat modèle. Très récemment, des films moléculaires quasipériodiques ont été réalisés expérimentalement avec des molécules  $C_{60}$  sur différents types de substrats quasicristallins.

Dans cet exposé, nous montrons que la structure de ces films moléculaires peut être décrite par un pavage quasipériodique de molécules, ces dernières étant adsorbées sur des sites spécifiques. La configuration des molécules sur la surface, ainsi que la nature de la liaison chimique molécule-substrat, est étudiée en utilisant des calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle de densité incluant la prise en compte de la dispersion. Pour chacun des deux types de sites d'adsorption considérés, la configuration la plus stable correspond à la molécule de  $C_{60}$  adsorbée avec une face pentagonale sur la surface. Les modifications de la densité électronique à la surface, après adsorption, montrent deux types d'interaction molécule-substrat pour les deux types de sites considérés.



**Figure:** (Gauche) Image de microscopie à effet tunnel ( $8.8 \times 8.8 \text{ nm}^2$ ) du film moléculaire (molécules  $C_{60}$ ) formé sur la surface quasicristalline de Al-Cu-Co. Le pavage quasipériodique superposé montre des polygones de côté mesurant 2 nm. (Droite) Image résultant d'un calcul de différence de charges, montrant l'accumulation de charge (zones en rouge sur la version couleur) le long de liaisons Al-C.

[1] X.-Q. Shi, M. A. Van Hove and R.-Q. Zhang, *J. Mater. Sci.*, **47**:7341-7355 (2012)

[2] P. A. Thiel, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **59**:129 (2008)

[3] Fournée et al., *Isr. J. of Chem.*, **51**:1326 (2011)