

## SEMINAIRE ISMO

*Philippe Sonnet*  
*Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M)*  
*Université de Haute Alsace – CNRS LRC 7228*

### **Molécules de grande taille sur différentes surfaces de semiconducteur: apport des simulations numériques à l'échelle atomique**

Le carbure de silicium est un semi-conducteur à grand gap biocompatible, présentant de nombreux intérêts dans des domaines d'application tels que l'électronique et la biophysique. Sa réactivité étant moins importante que celle d'une surface de silicium, il est tout de même possible d'adsorber des molécules de grande taille sur la surface de  $6H\text{-SiC}(0001)3\times 3$  [1-2]. Ce travail, effectué par le groupe de G. Dujardin à l'aide d'un microscope à effet tunnel (STM), concerne la molécule de phthalocyanine hydrogénée et la molécule de PTCDI (pérylène 3.4.9.10 tétracarboxylique diimide). Cependant, la détermination précise de la conformation et de l'arrangement des molécules adsorbées sur la surface reste un point clef qui va influencer fortement les propriétés physiques et chimiques de l'interface organique-inorganique. Nous avons donc réalisé une étude théorique, dans le cadre de la fonctionnelle de la densité (DFT), des structures atomique et électronique de l'adsorption de ces deux molécules sur SiC.

En ce qui concerne la phthalocyanine, un nouveau mécanisme d'adsorption, proche d'une cyclo-addition [10+2] impliquant la formation de deux liaisons covalentes Si-N entre le substrat et la molécule, a été observé [1-2]. Pour la molécule de PTCDI, l'adsorption s'effectue, d'autre part, via deux atomes d'oxygène formant deux liaisons Si-O.

Des calculs analogues ont été effectués sur l'adsorption de la phthalocyanine hydrogénée sur la surface  $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}R30\text{-Bore}$  notés SiB[3]. Cette surface présente une structure atomique proche du SiC mais avec une structure électronique différente (passivée en surface). Ce travail, réalisé avec le groupe de F. Palmino (FEMTO-ST), montre le rôle joué par le substrat lors de la cyclo-addition [10+2].

Finalement, ces études ouvrent de nouvelles perspectives pour accrocher des molécules organiques sur des surfaces de semiconducteur à grand gap (SiC) ou passivé (SiB) et permet d'explorer de nouvelles propriétés pour ce type de système hybride.

[1]G. Baffou, A. Mayne, G. Comtet, G. Dujardin, Ph. Sonnet, L. Stauffer, Applied Physics Letters 91 (2007) 073101

[2]G. Baffou, A.J. Mayne, G. Comtet, G. Dujardin, L. Stauffer et Ph. Sonnet, J. Am. Chem. Soc. 131 (2009) 3210-3215

[3]M. El Garah, Y. Makoudi, F. Palmino, E. Duverger, Ph. Sonnet, L. Chaput, A. Gourdon, F. Cherioux, ChemPhysChem 10 (2009) 3190-3193

\* \* \* \* \*

**Mardi 22 juin 2010 à 11 h 00**

*Bât 351 - 2<sup>ème</sup> étage*  
*Université Paris-Sud 91405 ORSAY Cedex*