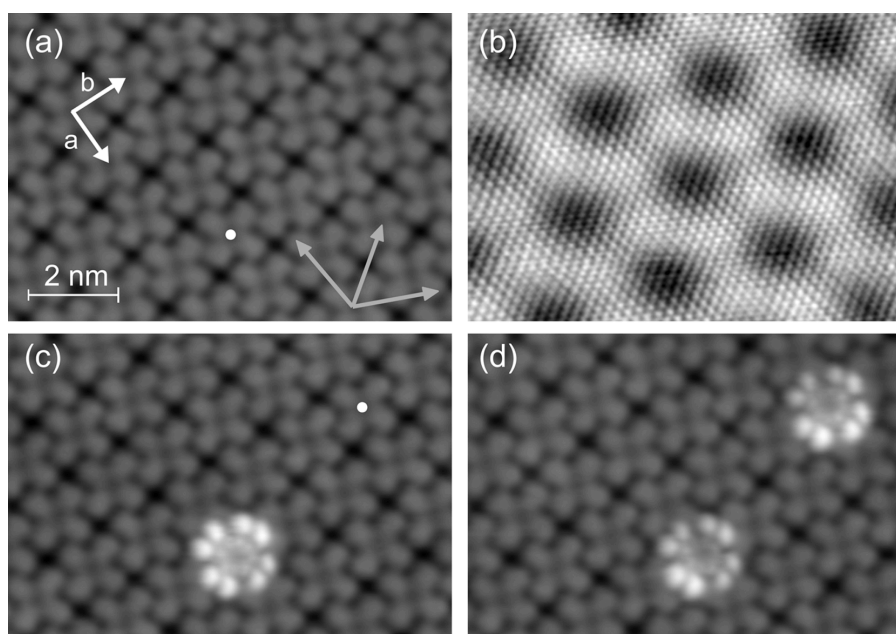


De la chimie « mono-moléculaire » sur graphène

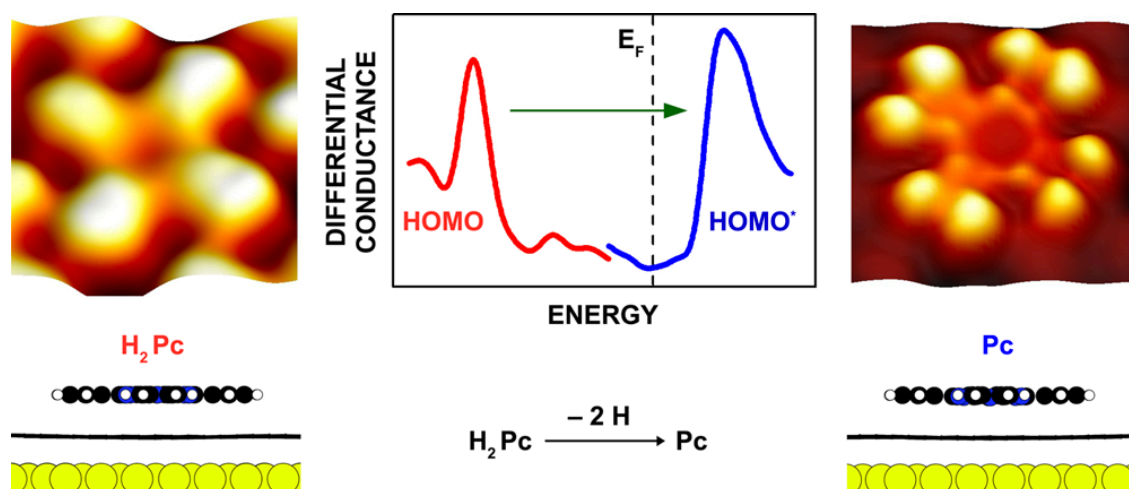
Parmi les modes d'utilisation de la microscopie par effet tunnel (« Scanning Tunneling Microscopy » - STM), l'utilisation d'impulsion via la sonde locale est fascinante lorsqu'il s'agit de créer des réactions chimiques contrôlées à l'échelle d'une molécule. En d'autres termes, il est possible par STM de manipuler la matière en jouant sur le mouvement d'un seul atome parmi un édifice moléculaire !

Ce travail de modélisation mené par le Pôle de Physico-Chimie Théorique (UMR 8640 PASTEUR – ENS/PSL/CNRS/UPMC) concerne l'étude de déshydrogénations ciblées de molécules de phthalocyanine (H_2Pc) déposées sur graphène épitaxié sur une surface métallique d'Iridium en collaboration avec des manipulations par impulsion STM réalisées dans le groupe de Jörg Kröger à Ilmenau (Allemagne).

Par application d'une impulsion STM, il devient possible de commuter une à une des molécules de phthalocyanines (H_2Pc) en déshydrogénant sélectivement leurs positions pyrroliques (au centre de la cavité).



Cette déshydrogénation ne modifie pas leur géométrie d'adsorption ce qui était inattendu. Lors de ce processus, la molécule résultante Pc est très peu modifiée en géométrie et reste à la même distance d'interaction sur le graphène.



Un mécanisme de transfert d'électrons $\sigma - \pi$ explique le changement de contraste STM associé car les deux états se retrouvent à la même énergie par cette réaction radicalaire.

En déplaçant la sonde locale STM sur toute la surface, il devient donc possible de convertir l'ensemble des molécules H_2Pc en Pc , obtenant ainsi un rendement de réaction de déshydrogénation de 100% !

Source :

Depopulation of Single-Phthalocyanine Molecular Orbitals upon Pyrrolic-Hydrogen Abstraction on Graphene

Nicolas Néel[†], Marie Lattelais[‡], Marie-Laure Bocquet[‡], and Jörg Kröger[†]

[†]Institut für Physik, Technische Universität Ilmenau, D-98693 Ilmenau, Germany

[‡]Department of Chemistry, UMR ENS-CNRS-UPMC 8640, Ecole Normale Supérieure, F-75005 Paris, France

ACS Nano 2016, 10, 2010–2016

doi: 10.1021/acsnano.5b06153

Contact Chercheur :

Marie-Laure BOCQUET, DR CNRS
UMR 8640 PASTEUR (ENS/PSL/CNRS/UPMC)
marie-laure.bocquet@ens.fr

Contact Communication Chimie :

Nicolas LEVY, Responsable Communication Chimie,
Département Chimie ENS (www.chimie.ens.fr)
nicolas.levy@ens.fr