

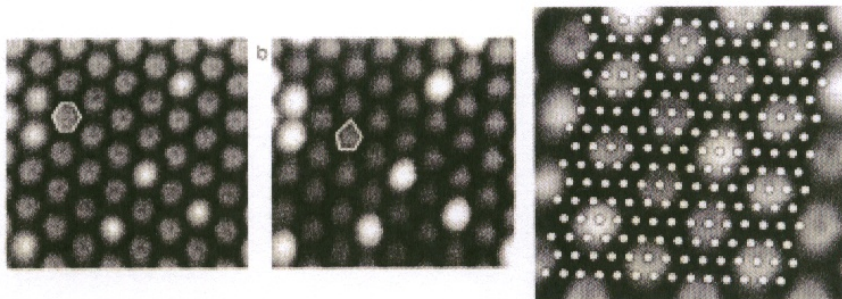
Autoassemblage (M. Henry) : 1h

Notes de cours autorisées

Les questions peuvent être traitées dans n'importe quel ordre

1. La réaction entre le nitrate de cuivre(II) hydraté et l'acide 1,3-benzenedicarboxylate (*m*-BDC) dans un mélange ethanol/DMF conduit à un objet autoassemblé de formule $[\text{Cu}_{24}(\text{m-BDC})_{24}(\text{DMF})_{20}(\text{H}_2\text{O})_{60}(\text{EtOH})_6]$ (voir cours). Évaluez la courbure combinatoire de cet objet en chacun de ses sommets. En déduire le genre de l'objet. Quel type de liaison chimique est à l'origine de l'autoassemblage et combien de liaisons sont formées à cette occasion? Quel potentiel thermodynamique atteint son minimum dans cet autoassemblage? Quel est le rôle joué par la DMF, l'eau et l'éthanol dans cet autoassemblage?

2. La vitamine D3 est une molécule présentant les caractéristiques géométriques suivantes : volume de 415 \AA^3 , aire de tête polaire de $22,3 \text{ \AA}^2$ et longueur de queue hydrophobe de $10,1 \text{ \AA}$. Quel type d'autoassemblage attendez-vous pour cette molécule en solution aqueuse? À quelle molécule bien connue ressemble-t-elle ? En déduire le lieu de stockage préférentiel de cette molécule dans le corps humain.



3. La figure ci-dessus représente une image STM d'une surface Au(111) couverte de molécules de C_{60} . Les petits cercles sur l'image de droite représentent la position des atomes d'or. L'image de gauche est obtenue pour un potentiel de -2 V (sondage de la HOMO concentrée dans les doubles liaisons entre hexagones) tandis que celle du centre est obtenue pour un potentiel de $+1,5 \text{ V}$ (sondage de la LUMO concentrée dans les simples liaisons entre pentagones et hexagones). Quel type de réseau forme cet auto-assemblage de molécules C_{60} ? Sachant que de telles images sont observées quelque soit le taux de couverture (absence de molécules C_{60} isolées), que pouvez dire de la nature de l'interaction Au(111)... C_{60} . La molécule C_{60} possède-t-elle des axes d'ordre 6? La molécule s'adsorbe-t-elle via les faces hexagonales ou les faces pentagonales ?