

Le cristal impossible

Des molécules qui possèdent une symétrie pentagonale s'ordonnent sous forme de cristaux bidimensionnels – bien que cela soit théoriquement impossible. Les chercheurs de l'Empa et de l'Université de Zurich ont récemment trouvé une explication à cela en suivant à l'aide du microscope à effet tunnel les processus complexes de cette cristallisation.

TEXTE: Martina Peter

Ce que nous faisons n'est en fait théoriquement pas du tout possible», explique en riant Karl-Heinz Ernst du laboratoire «Nanoscale Materials Science» de l'Empa qui parle ici de ses molécules à symétrie pentagonale qui se disposent de manière aussi compacte que possible sur une surface pour former des cristaux bidimensionnels. Une chose considérée comme impossible en cristallographie – cela pour la même raison qu'un assemblage de carreaux en forme de pentagones réguliers ne permet pas de réaliser un pavage exempt de lacunes. A moins que d'utiliser d'autres formes géométriques pour obtenir un plan complet.

Avec Jay Siegel de l'Institut de chimie de l'Université de Zurich, Ernst a étudié des molécules de corannulène. Ces molécules, qui possèdent une symétrie pentagonale, présentent une forme bombée – comme une coupe – et sont considérées comme étant des fragments de molécules de fullerène de Buckminster, aussi dénommés buckyballs, et elles sont ainsi aussi désignées sous le nom buckybowls. Les atomes de carbone des molécules de corannulène sont ordonnés en cinq hexagones autour d'un anneau central pentagonal. Les

chercheurs pensent que le corannulène et ses dérivés pourraient jouer un rôle important dans le développement de nouveaux matériaux, en particulier pour la photovoltaïque et l'électronique.

Une grille cristalline presque régulière

Pour observer comment des molécules présentant une symétrie pentagonale s'ordonnent pour former des cristaux bidimensionnels sur une surface, les chercheurs de l'Empa ont eu recours au microscope à effet tunnel. Ils s'attendaient à voir soit une structure irrégulière, soit un agencement parfait des molécules mais alors avec une symétrie de la grille cristalline différant de l'ordre cinq. En réalité les molécules «trichaient» pour atteindre un assemblage aussi compact que possible sur la surface et «basculaient» pour abandonner la symétrie d'ordre cinq.

«Dans une expérience suivante nous avons utilisé des molécules possédant des groupes latéraux volumineux empêchant ce basculement et qui contraignaient les molécules à conserver une symétrie d'ordre cinq», explique Ernst. Malgré cela ces molécules formaient un assemblage compact et se disposaient dans une grille hexagonale dans le cristal bidimensionnel qui présentait alors une symétrie d'ordre six. Cependant par rapport aux molécules possédant une symétrie hexagonale, les molécules de corannulène se différencient dans leur agencement parallèle à la surface. Les résultats de ce travail, publiés récemment dans la revue scientifique «Journal of the American Chemical Society», avaient été prédits aussi bien par des simulations mathématiques qu'à l'aide de modélisations mécaniques simples avec des pentagones de polystyrène expansé ou d'aluminium placés sur des coussins d'air ou sur une table vibrante. //

1 Les molécules de «buckybowl» ne sont pas les seules à posséder une symétrie d'ordre cinq; en coupe, les capsules d'okra elles aussi présentent une telle symétrie. (Photo: iStock)

2 Exemple d'un ordonnancement de dérivés du penthaméthylcorannulène: les atomes en noir montrent la grille de symétrie hexagonale régulière autour de laquelle les molécules de symétrie d'ordre cinq «s'agglutinent». (Photo: Empa)

