

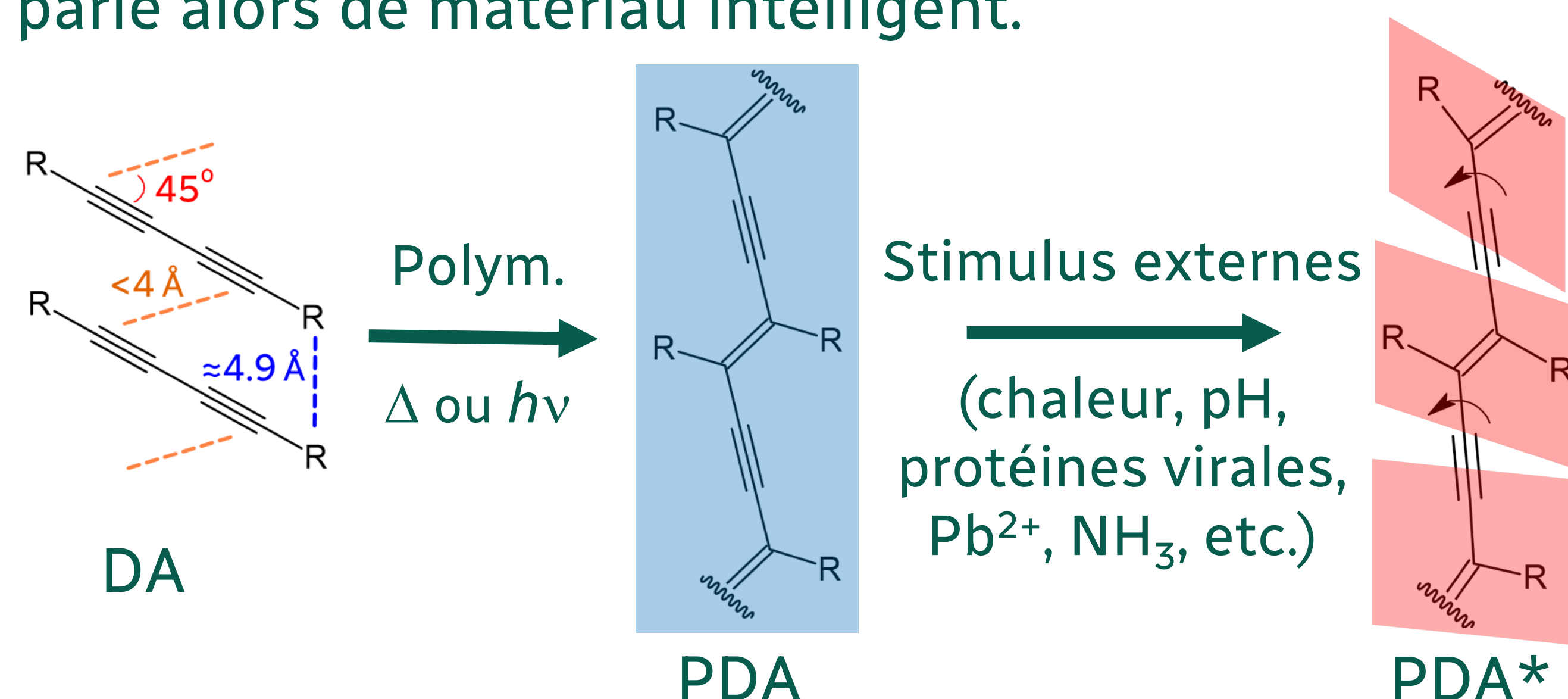
Portrait de l'empilement des molécules dans un matériau intelligent

Pierre Baillargeon¹, Raphaël Robidas², Olivier Toulgoat¹, Zacharie Michaud¹, Claude. Y. Legault², Tarik Rahem¹.

¹ Cégep de Sherbrooke, 475 rue du Cégep, Sherbrooke (QC), J1E 4K1 ² Université de Sherbrooke, 2500 boul. de l'Université, Sherbrooke (QC), J1K 2R1

1. Introduction

Les diacétylènes (DA) sont de petites molécules qui, lorsqu'elles sont empilées adéquatement, peuvent subir une réaction de polymérisation, c'est-à-dire qu'elles peuvent se combiner chimiquement ensemble. Les longues molécules résultantes, les polydiacétylènes (PDA), ont la propriété de changer de couleurs sous l'effet de stimulus externes; on parle alors de matériau intelligent.

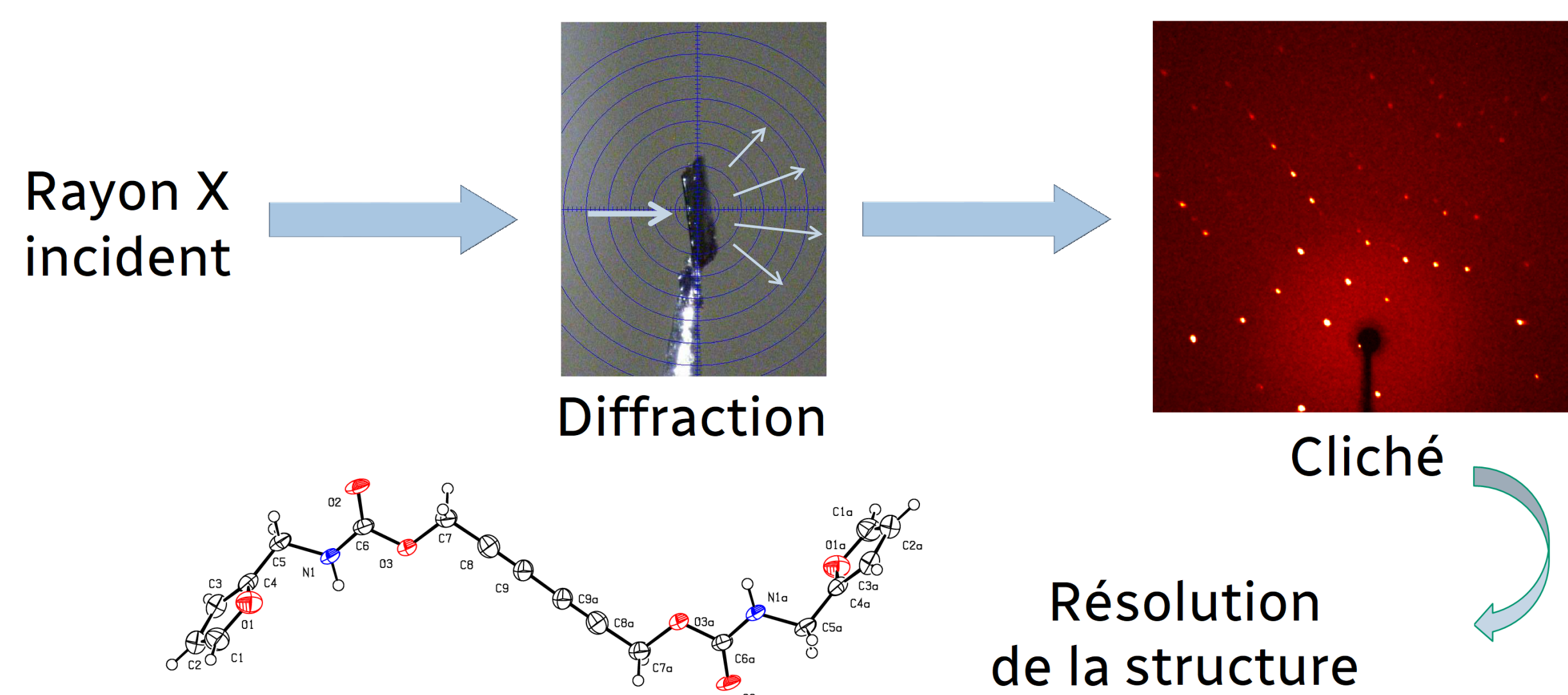


Ce type de matériau est à l'étude dans divers domaines, en particulier ceux impliquant des dispositifs permettant la détection d'entités chimiques ou biologiques diverses (plomb dans l'environnement, virus, bactéries, etc.).

Si on veut optimiser les performances de ces nouveaux dispositifs, une connaissance approfondie et un contrôle sur l'empilement et l'orientation des molécules est souhaitable, car les propriétés des matériaux dépendent grandement de leur organisation à l'échelle moléculaire.

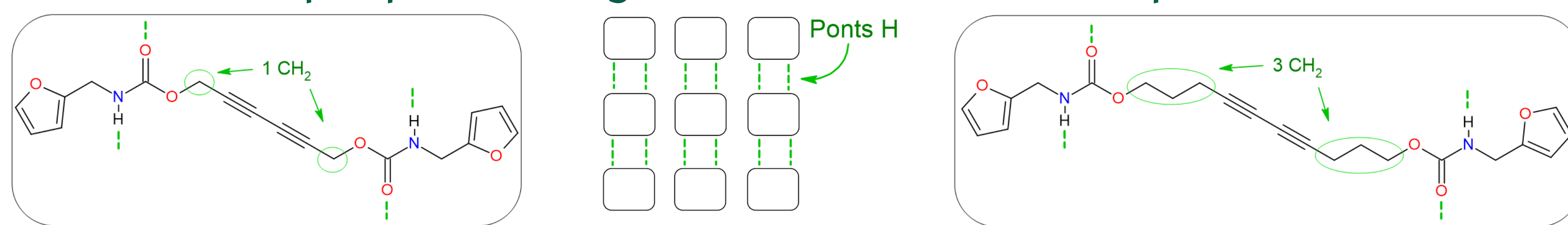
2. Comment étudier l'empilement 3D des molécules?

L'analyse structurale par diffraction des rayons X (DRX) sur les monocristaux nous permet d'obtenir la position exacte des atomes au sein d'un matériau.

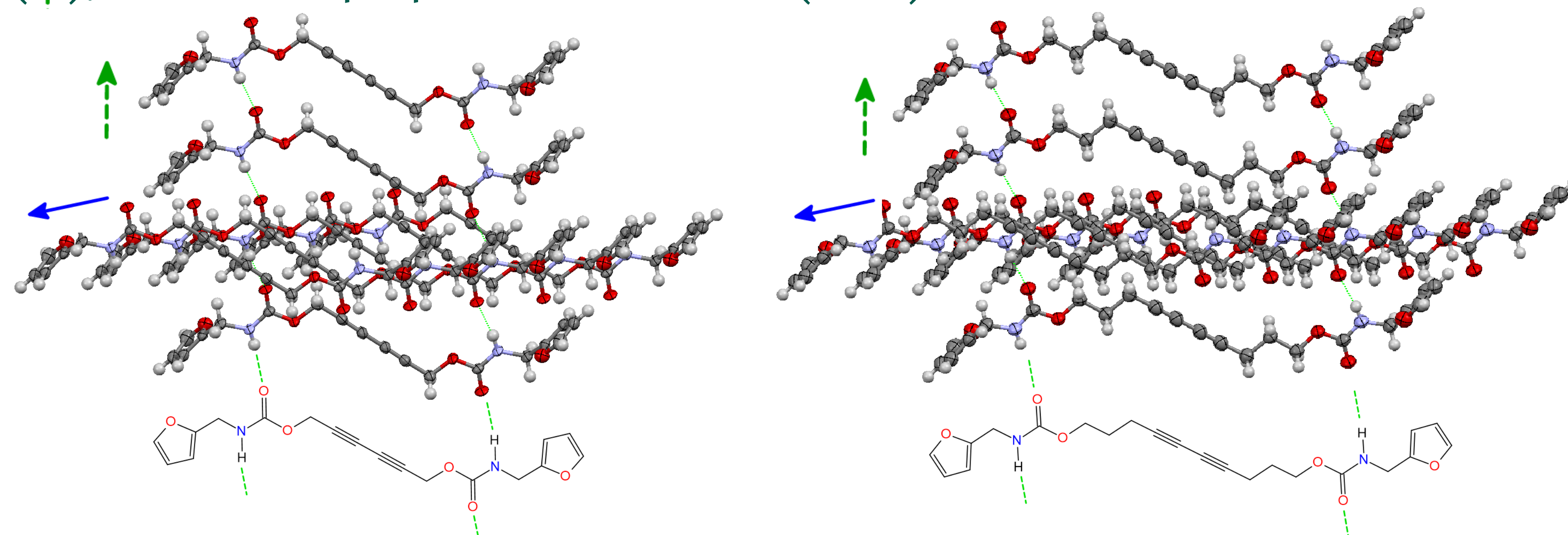


3. Nos résultats

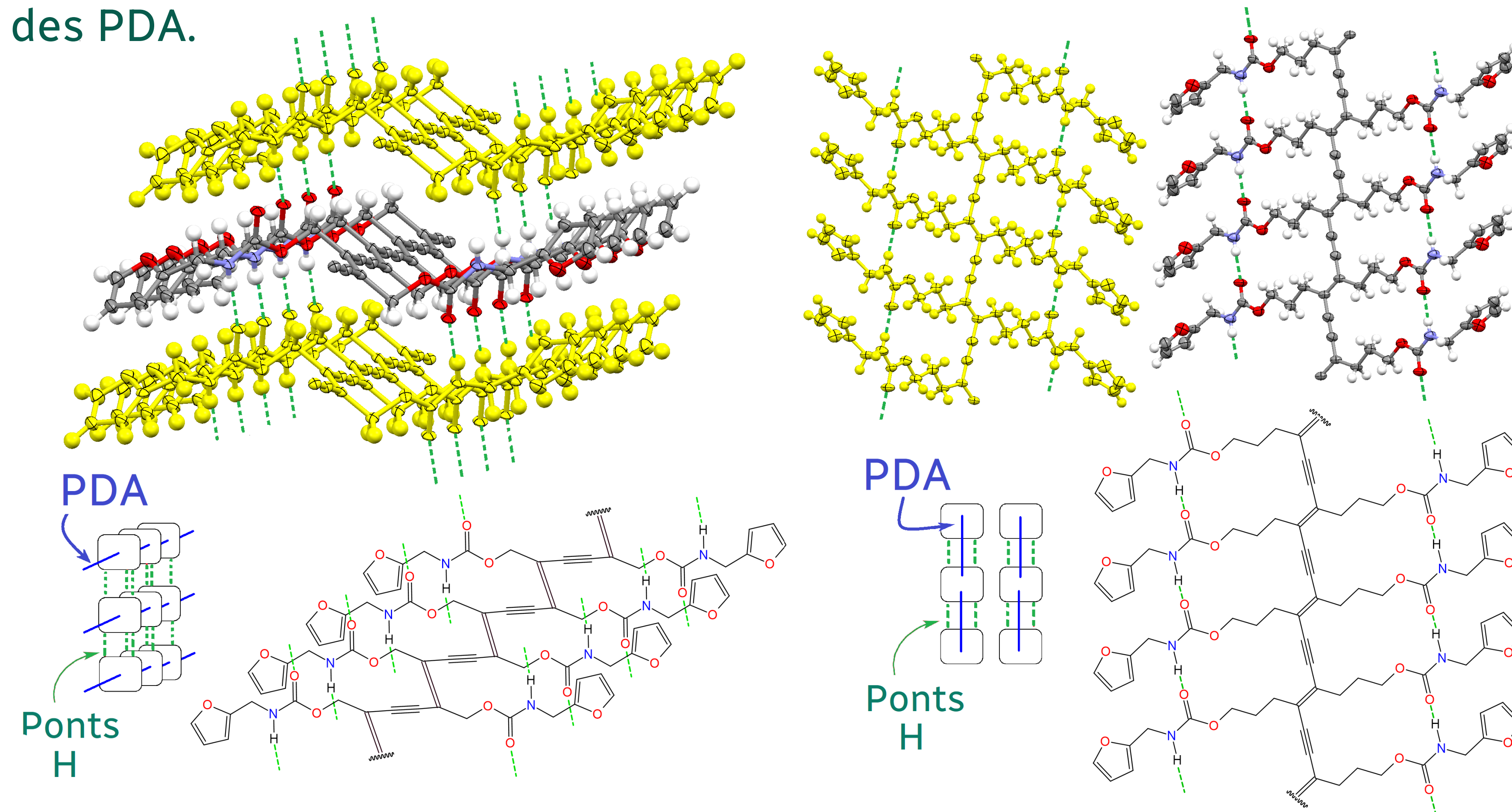
Nous avons développé deux nouvelles molécules de DA en exploitant les interactions ponts H pour favoriser leur empilement. Les deux composés ne diffèrent que par une légère modification chimique.



L'analyse structurale par DRX nous démontre que dans les deux cas, les molécules de DA sont empilées de telle sorte qu'elles ont la possibilité de générer les PDA non seulement dans le sens des interactions ponts H (\uparrow), mais aussi perpendiculairement (\leftarrow) à celles-ci.



Après polymérisation, l'orientation des PDA dans les deux matériaux n'est pas la même. D'autres études seront nécessaires pour comprendre l'origine de cette différence et pour évaluer l'impact sur les propriétés des PDA.



4. Conclusion

Nous avons démontré qu'il était possible d'influencer l'orientation des PDA par une simple modification chimique des DA. Cette découverte a le potentiel de permettre d'ajuster et d'optimiser les propriétés optiques et électroniques de ces matériaux uniques!

Affiche présentée lors du Colloque de l'ARC dans le cadre du 90^e Congrès de l'Acfas, HEC Montréal, 8 mai 2023

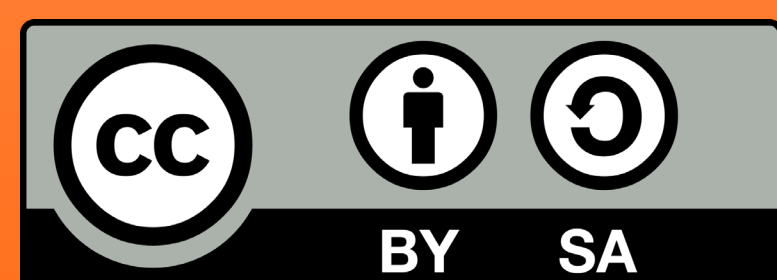
Sources de financement

- P. Baillargeon : - Fonds de Recherche du Québec - Nature et Technologies (FRQNT, 2022-CO-302716 et 2019-CO-254502)
- Programme d'aide à la diffusion des résultats de recherche au collégial (PADRRRC)
- C.Y. Legault : - Calcul Québec et Calcul Canada
- R. Robidas : - Programme de bourses d'études supérieures du Canada au niveau de la maîtrise (BESC-M du CRSNG)
- Bourses de 2^e et 3^e cycles - FRQNT (B1X/B2X)
- Bourses de recherche (Hydro-Québec et Université de Sherbrooke)



Référence:

Crystal Growth & Design 2022, 22, 2812
(<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c00307>)



(<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>)

Pierre Baillargeon.
Ce travail est sous
licence CC BY-SA 4.0



Cégep
Sherbrooke