

Comment la structure microscopique définit la dimension des hémimicelles d'alcane semi-fluorés à la surface de l'eau

Les alcanes semi-fluorés (FnHm) présentent un fort potentiel d'applications dans le domaine biomédical, par exemple comme substitut du sang [1]. Des chercheurs de l'équipe Physico-chimie et dynamique des surfaces de l'INSPI¹ ont montré qu'au contact de l'eau, ces molécules s'auto-assemblent sur des cercles concentriques avec une inclinaison qui augmente régulièrement formant ainsi des domaines (hémimicelles) dont le diamètre est déterminé par la longueur de la molécule.

Nous avons démontré par diffusion des rayons x rasants sur surface liquide que lorsqu'ils sont déposés à la surface de l'eau, les alcanes semi-fluorés s'auto-assemblent en domaines (hémimicelles) qui peuvent former des réseaux très organisés [2]. Cependant, les principes régissant la formation et la structure de ces hémimicelles n'était pas compris, en particulier l'augmentation de leur diamètre avec la longueur de la molécule. Nous avons donc utilisé la simulation par dynamique moléculaire pour étudier les FnHm à la surface de l'eau [3]. On retrouve l'auto-assemblage en domaine des molécules et on observe qu'elles s'organisent selon une structure complexe formée de cercles concentriques sur lesquels elles sont inclinées dans la direction radiale extérieure. Cette inclinaison augmente régulièrement quand on s'éloigne du centre avec un pas constant mais qui varie avec la longueur de la molécule. Ce résultat explique la variation de diamètre observée, ce dernier étant déterminé par la distance entre molécules couchées en contact avec l'eau.

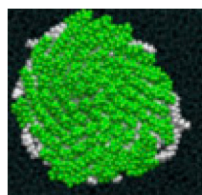


Figure 1
Vue de dessus d'un domaine de 100 molécules de F_8H_{16} à la surface de l'eau. Les blocs fluorés et hydrogénés sont en vert et gris respectivement.

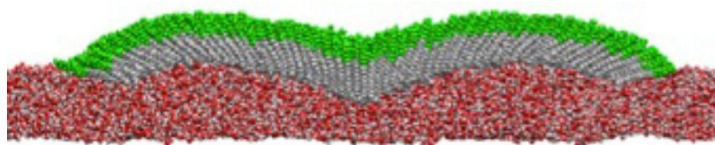


Figure 2
Section d'un domaine de 2 500 molécules de F_8H_{16} à la surface de l'eau. Le diamètre est déterminé par le nombre de molécules nécessaires pour atteindre l'eau avec un pas constant.

Cette organisation où les molécules ne présentent pas un ordre translationnel mais variant régulièrement induit un signal très similaire à un pic de diffraction, en accord avec les mesures de diffusion des rayons x. La simulation indique également une déformation de l'interface entre le domaine et l'eau ce qui devra être validée par de nouvelles expériences.

Références

[1] Perfluorocarbons, life sciences and biomedical uses, Krafft M.P., Riess J.G., J. Polym. Sci. Part A: Polymer Chem., 45, 1185. (2007)

[2] Long Range Nanometer Scale Organization of Semi-Fluorinated Alkane Monolayers at the Air/Water Interface, Lisa Bardin, Marie-Claude Fauré, Denis Limagne, Corinne Chevillard, Oleg Konovalov, Eduardo J. M. Filipe, Gilles Waton, Marie Pierre Krafft, Michel Goldmann, Philippe Fontaine, Langmuir, 27, 13497 (2011)

[3] Self-assembled hemimicelles of perfluoroalkylalkane surfactants: Spontaneous formation and structure by molecular dynamics simulations G. M. C. Silva, P. Morgado, P. Lourenço, M. Goldmann and E. J. M. Filipe, PNAS 116, 14868 (2019)

Contact

michel.goldmann@insp.jussieu.fr