

# Vers une meilleure compréhension des mécanismes de croissance à l'échelle moléculaire de nanoparticules métalliques : approches combinées reposant sur l'expérience et la théorie.

J.-Y. Piquemal,<sup>1</sup> C. Michel,<sup>2</sup> P. Sautet<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, ITODYS, CNRS UMR 7086, 15 rue J.-A. de Baïf, 75205 Paris Cedex 13, France. Contact : [jean-yves.piquemal@univ-paris-diderot.fr](mailto:jean-yves.piquemal@univ-paris-diderot.fr)

<sup>2</sup>Université de Lyon, CNRS, Institut de Chimie de Lyon, ENS Lyon, Laboratoire de Chimie, 46 Allée d'Italie, 69364 Lyon Cedex 07, France.

Il est indéniable que des progrès très importants ont été réalisés ces dernières années pour la préparation de nanoparticules de taille et de forme contrôlées. Ces progrès ont été motivés par le fait qu'à côté de la structure cristalline, de la taille et de la nature chimique des objets, l'habitus cristallin peut aussi avoir une influence considérable sur les propriétés recherchées, qu'elles soient magnétiques, optiques ou catalytiques. Les méthodes de synthèse par voie de solution, simples à mettre en œuvre, ont été largement utilisées et ont permis d'accéder à de très nombreuses morphologies telles que des cubes, des cuboctaèdres, des fils ou bâtonnets présentant des sections carrées, pentagonales ou octogonales ou encore des plaquettes à base triangulaire, hexagonale, etc.<sup>1</sup> Afin d'orienter la croissance des objets vers la morphologie désirée, le chimiste dispose d'une panoplie de ligands organiques à longue chaîne tels que des amines, des phosphines ou encore des carboxylates. Pour rendre compte du contrôle de la morphologie observé, l'hypothèse très souvent avancée est que ces ligands à longue chaîne s'adsorbent préférentiellement sur certaines faces cristallographiques en croissance, favorisant ainsi le développement de certaines faces au détriment d'autres.

Pour autant, l'optimisation de la taille et surtout de la forme des particules résulte bien souvent de processus d'essais-erreurs chronophages ou les différents paramètres expérimentaux (nature du précurseur et des additifs organiques, rampe de montée en température et température finale, etc.) sont variés de façon systématique de façon à déterminer les conditions de formation optimales des objets. La compréhension, à l'échelle de moléculaire, du rôle de ces ligands à longue chaîne dans la formation des particules s'avère capitale afin d'obtenir, à terme, un meilleur contrôle de leur structure et de leurs propriétés.

Dans cette présentation, nous montrerons, sur la base de plusieurs exemples, l'intérêt de faire appel aux méthodes et aux outils de la chimie théorique et de mener des études combinées alliant l'expérience et la théorie.<sup>2-5</sup> L'examen des données de la bibliographie montre en effet que ce type d'approche est de plus en plus utilisée afin de mieux comprendre les mécanismes de nucléation-croissance, à la base de la formation des nanoparticules.

## Références

1. Y. Xia, Y. Xiong, B. Lim, S. E. Skrabalak, *Angew. Chem. Int. Ed. Eng.*, **2009**, 48, 60.
2. A.-X. Yin, W.-C. Liu, J. Ke, W. Zhu, J. Gu, Y.-W. Zhang, C.-H. Yan, *J. Am. Chem. Soc.*, **2012**, 134, 20479.
3. N. Aguilera-Porta, M. Calatayud, C. Salzemann, C. Petit, *J. Phys. Chem. C*, **2014**, 118, 9290.

4. K. Aït Atmane, C. Michel, J.-Y. Piquemal, P. Sautet, P. Beaunier, M. Giraud, M. Sicard, S. Nowak, R. Losno, G. Viau., *Nanoscale*, **2014**, 6, 2682.