



## Synthèse automatisée de nanoparticules

**Spécialité** Chimie des matériaux

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [NIMBE/LIONS](#)

**Candidature avant le** 30/04/2021

**Durée** 6 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [CARRIERE David](#)

+33 1 69 08 54 89

[david.carriere@cea.fr](mailto:david.carriere@cea.fr)

**Autre lien** <http://iramis.cea.fr/Pisp/olivier.tache>

### Résumé

Le contrôle de la taille de nanoparticules synthétisées en solution reste un défi. Il s'agit de mettre ici au point une synthèse pilotée par une mesure de taille en temps réel par diffusion des rayons X aux petits angles.

### Sujet détaillé

La taille réduite des nanoparticules leur confère des propriétés exceptionnelles intéressantes pour une large gamme d'applications en optique, production et stockage d'énergie, et médecine pour n'en citer que quelques-unes. Très souvent, de telles applications nécessitent en retour un contrôle très fin de la taille, de la structure et de l'état d'agrégation des nanoparticules. Mais actuellement, ce contrôle n'est qu'approximatif et repose essentiellement sur des approches par essai et erreur.

Dans ce contexte, nous développons une approche où la synthèse de nanoparticules en solution est suivie en temps réel par diffusion de rayons X aux petits angles in situ (SAXS). L'objectif à long terme est de maîtriser les nanoparticules finales en réalisant un montage de synthèse automatisée, avec une boucle de rétroaction entre la taille, le nombre et l'état d'agrégation des nanoparticules mesurées par SAXS, et les paramètres opérationnels de la synthèse (injection de réactif, pH, température).

Le but de ce stage est de construire et valider le montage en synthétisant des nanoparticules modèles (SiO<sub>2</sub>), avec une précision sub-nanométrique sur la taille, et sans agrégation. Il consistera à 1) compléter la comparaison en temps réel des modèles SAXS avec des modèles physiques, 2) comprendre la dépendance des taux de nucléation, de croissance et d'agrégation avec les paramètres opérationnels en utilisant ou en améliorant les théories actuelles, et 3) utiliser cette compréhension fondamentale pour construire la boucle de rétroaction.

### Mots clés

---

Nanoparticules, diffusion des rayons X, théories de la nucléation / croissance

**Compétences**

Diffusion des rayons X aux petits angles, codage en Python, théories de la nucléation / croissance

**Logiciels**

Python

---

## Automatized synthesis of nanoparticles

### Summary

The control over the size of nanoparticles synthesized in solution remains a major challenge. Here, we will design a synthesis controlled by a real-time size measurement by small-angle X ray scattering.

### Full description

Owing to size reduction, nanoparticles have outstanding properties suitable for a broad range of applications, like optics, energy production and storage, and medicine to name a few. Such applications often require in turn a very delicate control over the size, structure and aggregation state of the nanoparticles. But currently, this control is only approximate and essentially relies on trial-and-error approaches.

In this context, we develop an approach where the synthesis of nanoparticles in solution is monitored in real time by in situ, small-angle X-ray scattering (SAXS). The long-term objective is to master the final nanoparticles by making an automatized synthesis setup, with a feedback loop between the size, number and aggregation state of the nanoparticles as measured by SAXS, and the operational parameters of the synthesis (injection of reactant, pH, temperature).

The aim of this internship is to build and validate the setup by synthesizing model nanoparticles (SiO<sub>2</sub>), with a sub-nanometer-scaled accuracy on the size, and no aggregation. It will consist in 1) completing the real-time comparison of SAXS patterns with physical models, 2) understand the dependency of the rates of nucleation, growth and aggregation with the operational parameters by using or improving current theories, and 3) use this fundamental understanding to build the feedback loop.

### Keywords

Nanoparticles, X-ray scattering, nucleation / growth theories

### Skills

Small-angle X-ray scattering, Python coding, nucleation/growth theories

### Softwares

Python