



## La synthèse automatisée des nanoparticules

**Spécialité** Chimie-physique

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [NIMBE/LIONS](#)

**Candidature avant le** 01/04/2024

**Durée** 6 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [Levenstein Mark](#)  
+33 1 69 08 57 34  
[mark.levenstein@cea.fr](mailto:mark.levenstein@cea.fr)

### Résumé

Ce stage se concentre sur l'avancement de la synthèse des nanoparticules grâce à une surveillance en temps réel utilisant la diffusion des rayons X aux petits angles (SAXS). L'objectif est d'établir un système de contrôle précis des propriétés des nanoparticules en créant une configuration de synthèse automatisée avec une boucle de rétroaction entre les mesures de SAXS et les paramètres de synthèse. Le stagiaire travaillera sur la synthèse de nanoparticules modèles (SiO<sub>2</sub>) avec une précision sub-nanométrique, analysera les motifs de SAXS, comprendra l'impact des paramètres opérationnels sur les taux de nucléation et d'agrégation, et construira finalement une boucle de contrôle de rétroaction pour produire des nanoparticules de tailles prédéterminées.

### Sujet détaillé

En raison de la réduction de taille, les nanoparticules présentent des propriétés exceptionnelles adaptées à une large gamme d'applications telles que l'optique, la production et le stockage d'énergie, et la médecine, pour n'en nommer que quelques-unes. Ces applications nécessitent souvent un contrôle très précis de la taille, de la structure et de l'état d'agrégation des nanoparticules. Actuellement, ce contrôle est approximatif et repose essentiellement sur des approches d'essais et d'erreurs.

Dans ce contexte, nous développons une approche où la synthèse des nanoparticules en solution est surveillée en temps réel par diffraction des rayons X aux petits angles (SAXS) in situ. L'objectif à long terme est de dicter précisément les propriétés des nanoparticules finales en mettant en place une synthèse automatisée avec une boucle de rétroaction entre la taille, le nombre et l'état d'agrégation des nanoparticules mesurés par SAXS et les paramètres opérationnels de la synthèse (par exemple, injection de réactif, pH, température).

L'objectif de ce stage est de construire et de valider la configuration en synthétisant des nanoparticules modèles (SiO<sub>2</sub>), avec une précision sub-nanométrique sur la taille et sans agrégation. Il consistera à 1) synthétiser des nanoparticules de SiO<sub>2</sub> en solution, 2) compléter la comparaison en temps réel des motifs de SAXS avec des modèles physiques, 3) comprendre la dépendance des taux de nucléation, de croissance et d'agrégation par l'utilisation ou l'amélioration des théories actuelles, et 4) utiliser cette compréhension fondamentale pour construire la

---

boucle de contrôle de rétroaction et produire des nanoparticules de taille prédéterminée.

### **Mots clés**

Nanoparticules, diffusion des rayons X, théories de nucléation/croissance, systèmes de contrôle

### **Compétences**

Chimie en solution, diffusion des rayons X aux petits angles, codage Python, théories de nucléation/croissance, microscopie électronique en transmission, apprentissage machine.

### **Logiciels**

Python, Excel, pySAXS

---

## Automated synthesis of nanoparticles

### Summary

This internship focuses on advancing nanoparticle synthesis through real-time monitoring using in situ small-angle X-ray scattering (SAXS). The goal is to establish a precise control system for nanoparticle properties by creating an automated synthesis setup with a feedback loop between SAXS measurements and synthesis parameters. The intern will work on synthesizing model nanoparticles (SiO<sub>2</sub>) with sub-nanometer accuracy, analyzing SAXS patterns, understanding the impact of operational parameters on nucleation and aggregation rates, and ultimately building a feedback control loop for producing nanoparticles with predetermined sizes.

### 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 very precise 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 are developing 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 precisely dictate the properties of the final nanoparticles by making an automated synthesis set-up, 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 (e.g., 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 sub-nanometer accuracy on the size, and no aggregation. It will consist in 1) solution-based synthesis of SiO<sub>2</sub> nanoparticles, 2) completing the real-time comparison of SAXS patterns with physical models, 3) understanding the dependency of the rates of nucleation, growth, and aggregation on operational parameters by using or improving current theories, and 4) using this fundamental understanding to build the feedback control loop and produce nanoparticles with pre-determined size.

### Keywords

Nanoparticles, X-ray scattering, nucleation / growth theories, control systems

### Skills

Solution chemistry, small-angle X-ray scattering, Python coding, nucleation/growth theories, transmission electron microscopy, machine learning.

### Softwares

Python, Excel, pySAXS