

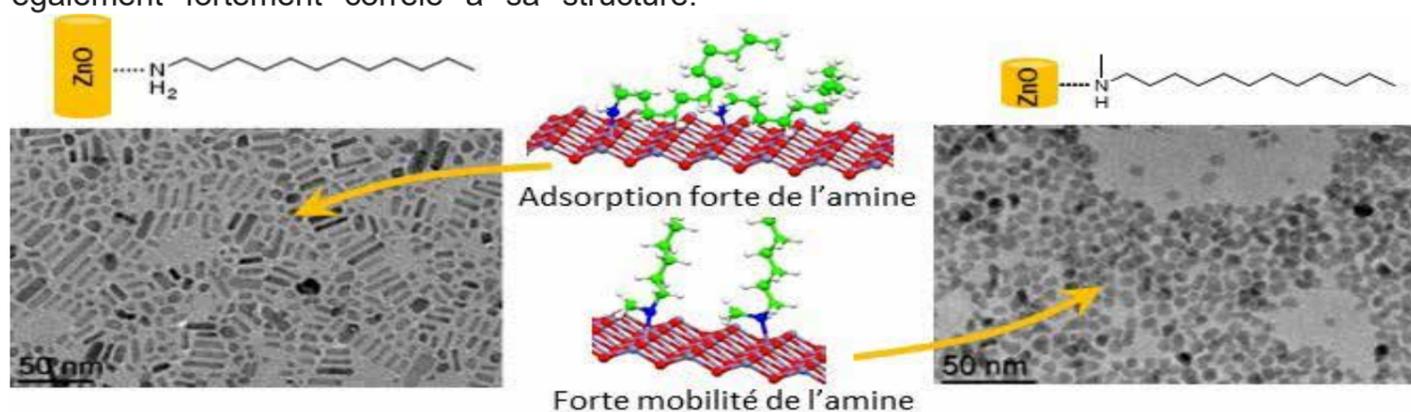
III. Chimie et matériaux

La force cachée des liaisons H faibles !

Mots-clés : Nanochimie, DFT, spectroscopie RMN

Les tensioactifs aminés jouent un rôle clé sur la croissance anisotrope contrôlée des nanoparticules de ZnO obtenues par hydrolyse organométallique dans des conditions douces. L'influence des substituants alkyles présents sur l'atome d'azote des amines est analysée à la fois sur le plan théorique par modélisation DFT et sur le plan expérimental par spectroscopie RMN multinucléaire (^1H , ^{13}C et ^{17}O). Dans les étapes initiales menant à la croissance de particules colloïdales de ZnO, la nature des espèces moléculaires qui sont impliquées dans la solution dépend fortement de la structure du tensioactif aminé. En utilisant des amines primaires, secondaires ou tertiaires, nous obtenons respectivement des adduits stables entre l'amine et le zinc formant des oligomères, des adduits faibles qui n'oligomérisent pas, ou des adduits très faibles. Ensuite, lors du suivi de la réaction, nous avons montré que sur les surfaces des nanocristaux de ZnO en croissance le comportement dynamique de l'amine est également fortement corrélé à sa structure.

Nous avons identifié qu'en présence d'amines tertiaires, secondaires ou primaires, soit aucune adsorption significative de $[\text{Zn}\dots\text{N}]$, soit une adsorption de surface avec une mobilité de surface notable, soit une adsorption très forte se met en place, respectivement. Ce comportement dynamique de surface joue un rôle prédominant dans la croissance des nanocristaux et l'orientation de la morphologie finale des nanocristaux de ZnO. En formant des liaisons hydrogène à la surface des nanoparticules pendant le processus de croissance, les amines primaires conduisent spécifiquement à la formation de nanobatonnets. Inversement, des nanoparticules et des agrégats isotropes sont obtenus lorsque des amines secondaires et tertiaires sont utilisées, respectivement. Ces résultats mettent en lumière le rôle des interactions faibles en surface, ici les liaisons H, qui régissent la croissance des nano-objets, et qui sont donc cruciales à identifier, étudier et contrôler.



© Myrtil Kahn / LCC Toulouse

Référence

Anisotropic Growth of ZnO Nanoparticles Driven by the Structure of Amine Surfactants: The Surface Dynamic on Nanocrystal Rules, Yiping Whang, Zhihua Zhao, Yannick Coppel, Christine Lepetit, Christophe Mingotaud, and Myrtil L. Kahn, *Nanoscale Advances* **2021**, 3, 6088 – 6099, <https://doi.org/10.1039/D1NA00566A>

Collaborations

Laboratoire des interactions moléculaires et réactivités chimiques et photochimiques IMRCP, Toulouse

Financements

CNRS, CSC (Chinese Science Council).

Équipe

Nanochimie, organisation et capteurs