

MASTER DE CHIMIE DE PARIS CENTRE - M2S2

Proposition de stage 2020-2021

Internship Proposal 2020-2021

Parcours type(s) / Specialty(ies) :

- Chimie Analytique, Physique et Théorique / *Analytical, Physical and Theoretical Chemistry* :
 Chimie Moléculaire / *Molecular Chemistry* :
 Chimie et Sciences Du Vivant / *Chemistry and Life Sciences* :
 Chimie des Matériaux / *Materials Chemistry*:
 Ingénierie Chimique / *Chemical Engineering*:

Laboratoire d'accueil / Host Institution

Intitulés / *Name* : Laboratoire de Chimie Théorique

Adresse / *Address* : tour 13-12 4^e étage

Directeur / *Director (legal representative)* : PIQUEMAL, Jean-Philip

Tél / *Tel* :

E-mail : jpp@lct.jussieu.fr

Equipe d'accueil / Hosting Team : Modélisation des surfaces et interfaces- *Modelling surfaces and interfaces*

Adresse / *Address* : LCT 13-12 4^e étage

Responsable équipe / *Team leader* : CALATAYUD Monica

Site Web / *Web site* : <https://sites.google.com/site/calatayudantonino/home>

Responsable du stage (encadrant) / *Direct Supervisor* : CALATAYUD Monica

Fonction / *Position* : Full Professor

Tél / *Tel* : 0144272505

E-mail : calatayu@lct.jussieu.fr

Période de stage / *Internship period* * : janvier-juin 2021 (*january-july 2021*)

Dévoiler la réactivité des surfaces des nanoparticules d'oxyde : de la catalyse à la nanotoxicité
Revealing surface reactivity of metal oxide nanoparticles : from catalysis to nanotoxicity

Projet scientifique (1 page maximum) / Scientific Project (maximum 1 page):

1. Description du projet / Description of the project

Les matériaux nanostructurés présentent des propriétés inédites dû à leur petite taille. Ils font partie d'avancées technologiques et médicales et, de plus en plus, des produits quotidiens comme les cosmétiques et le dentifrice. Leur réactivité est intimement liée à leur topologie de surface, et une description à l'échelle atomique est nécessaire pour comprendre et envisager de nouvelles applications. Dans ce stage nous allons étudier les nanoparticules à base d'oxyde métallique TiO₂ et SiO₂, en abordant l'influence de la topologie de surface sur les propriétés acido-basiques et redox, dans le contexte de 2 applications :

La photocatalyse, qui permet de générer H₂ et O₂ à partir de l'eau

La nanotoxicité, qui est gouvernée par la réactivité surfacique des nanomatériaux

* min. 5 mois à partir du 18 janv 2021 / *min. 5 months not earlier than January, 18th 2021.*

Fin de stage au plus tard le 16/07/2021 ou le 30/09/2021 (dates de validation de diplôme). / *End of internship at the latest July 16, 2021 or Sept. 30, 2021 (dates of graduation).*

Des collaborations avec des réseaux européens sont prévues dans le cadre de projets H2020 en cours RIA Nanoinformatix (prédiction de la nanotoxicité) et RIA CHARISMA (Raman des nanoparticules).

Nanostructured materials have outstanding properties due to their small size. They are present in technological and medical advances and, increasingly, of everyday products like cosmetics and toothpaste. Their reactivity is intimately linked to their surface topology, and an atomic-scale description is needed to understand and envision new applications. In this internship we will investigate nanoparticles based on TiO_2 and SiO_2 , focusing on the influence of surface topology on acid-base and redox properties, in the context of 2 applications:

Photocatalysis, which generates H_2 and O_2 from water

Nanotoxicity, which is governed by the surface reactivity of nanomaterials

Collaborations with European networks are planned within the framework of ongoing H2020 projects RIA Nanoinformatix (prediction of nanotoxicity) and RIA CHARISMA (Raman of nanoparticles).

2. Techniques ou méthodes utilisées / *Specific techniques or methods*

Les méthodes de la modélisation quantique de la matière seront utilisées. Des modèles structuraux adaptés seront construits (voir Figure ci-contre), analysés et l'aide des outils de pointe dans le domaine : logiciels de manipulation et visualisation, calcul de structure électronique (DFT VASP).

The methods based on quantum modeling of matter will be used. Appropriate structural models will be built (see Figure on the right), analyzed and computed using state-of-the-art tools: manipulation and visualization software, electronic structure calculation (DFT VASP).

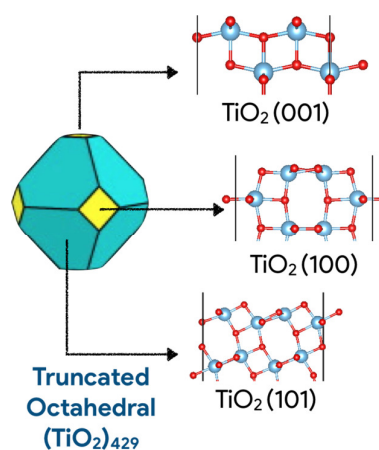


Figure: une nanoparticule octaédrique d'oxyde de titane peut être modélisée par un agrégat $(\text{TiO}_2)_{429}$, et ses facettes par de slabs périodiques
an octahedral titania nanoparticle can be modelled by a $(\text{TiO}_2)_{429}$ cluster, and its facets by periodic slabs

3. Références / *References*

Stability of mixed-oxide titanosilicates: dependency on size and composition from nanocluster to bulk
A. Cuko, M. Calatayud*, S. Bromley* *Nanoscale*, 10 (2018) 832 DOI: [10.1039/C7NR05758J](https://doi.org/10.1039/C7NR05758J)

Understanding the role of Rutile TiO_2 Surface Orientation on Molecular Hydrogen Activation
B. Wei, F. Tielens, M. Calatayud* *Nanomaterials* 9 (2019) 1199 doi:[10.3390/nano9091199](https://doi.org/10.3390/nano9091199)