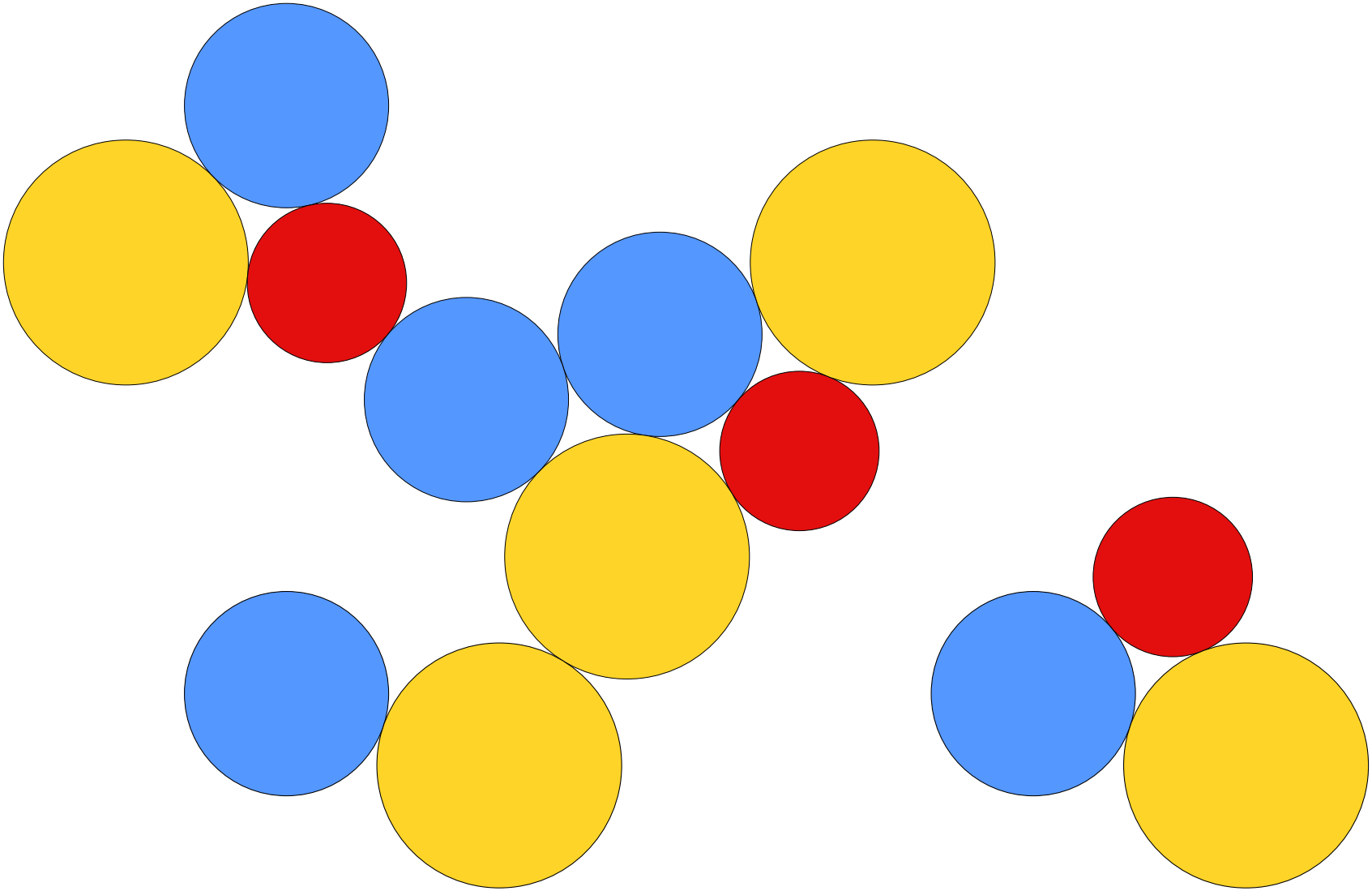
Des Empilements de Disques aux Nanoparticules

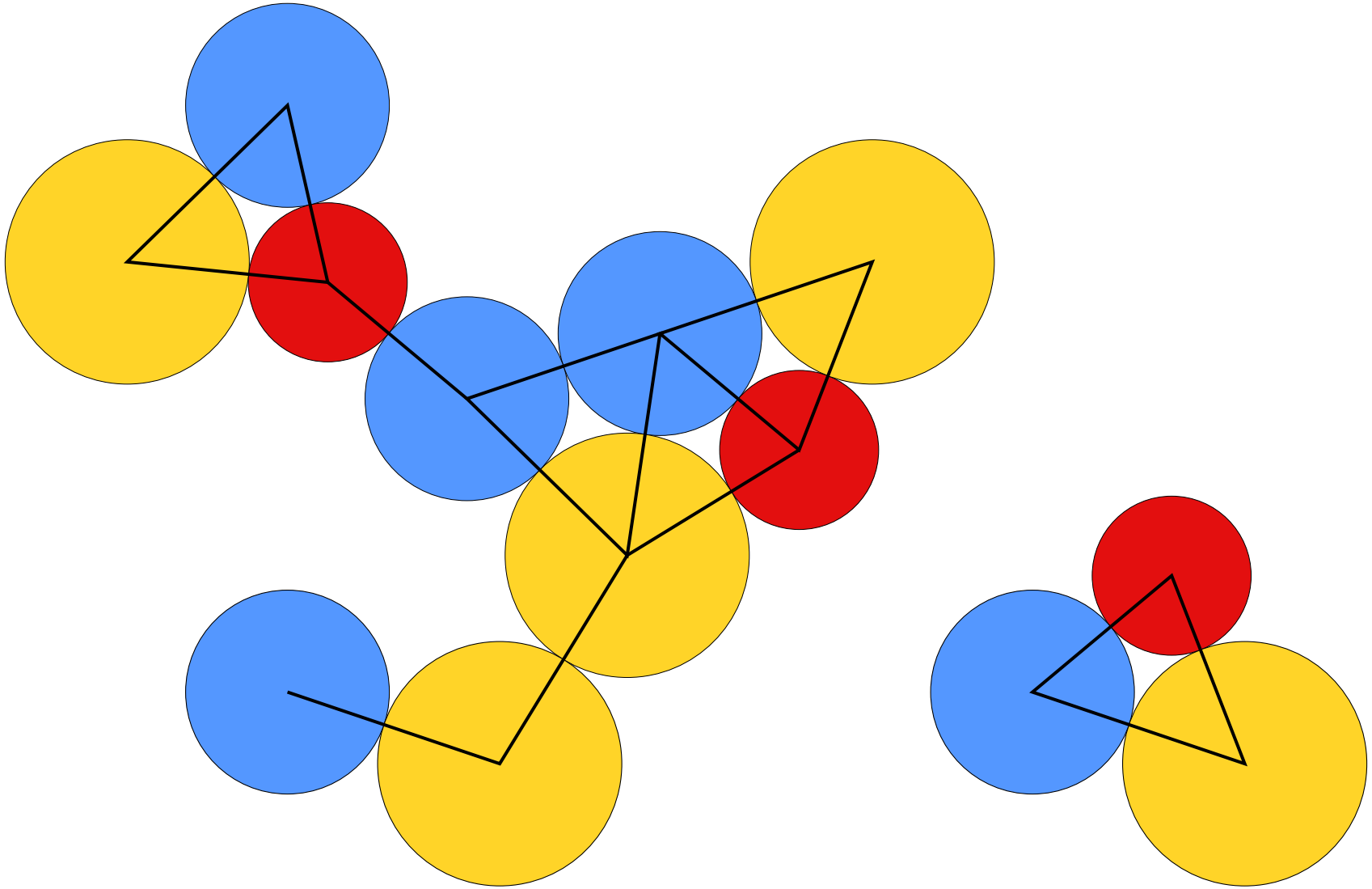
Thomas Fernique
CNRS & Université Paris Nord

Empilements de disques



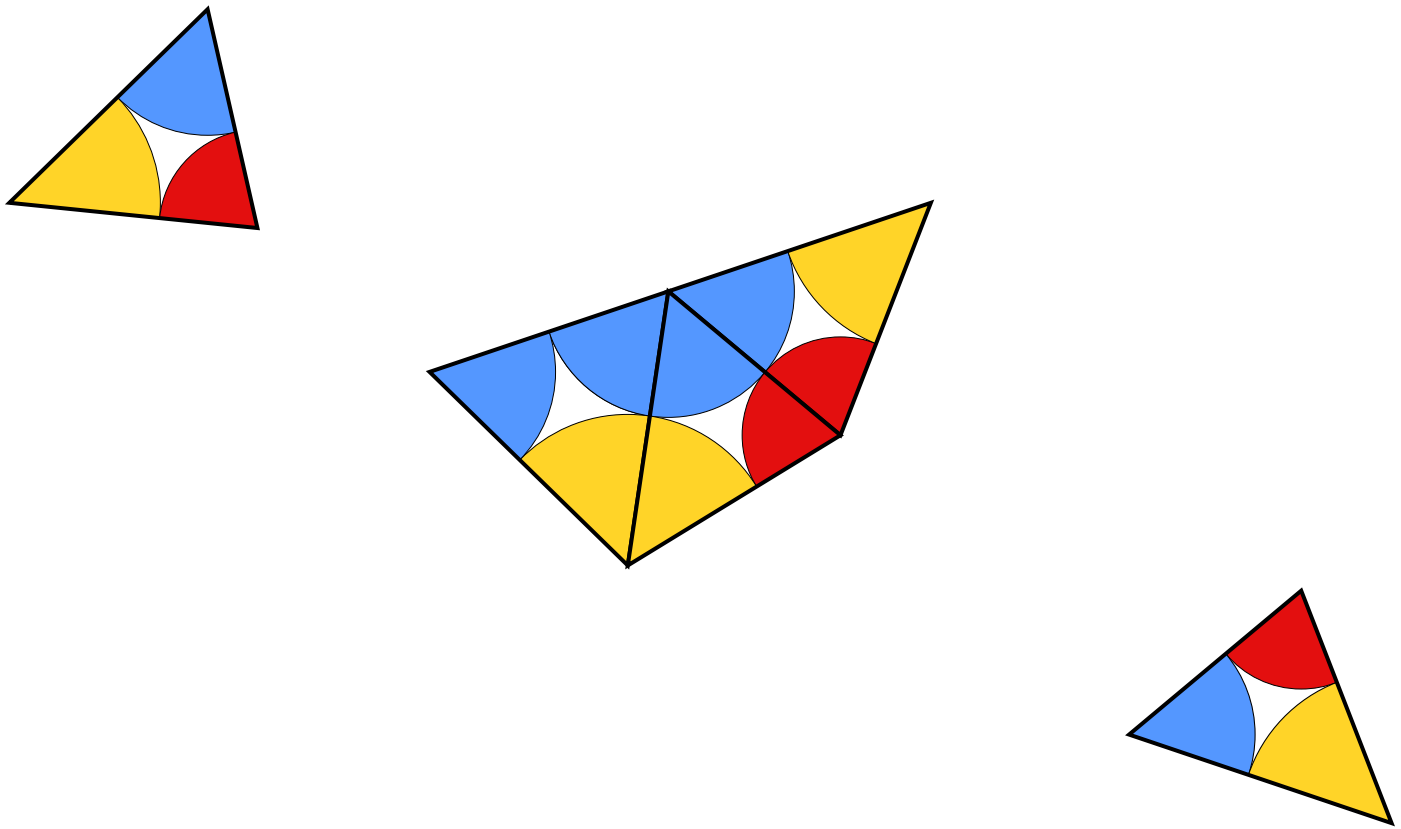
Empilement : disques du plan deux-à-deux d'intérieurs disjoints.

Empilements de disques



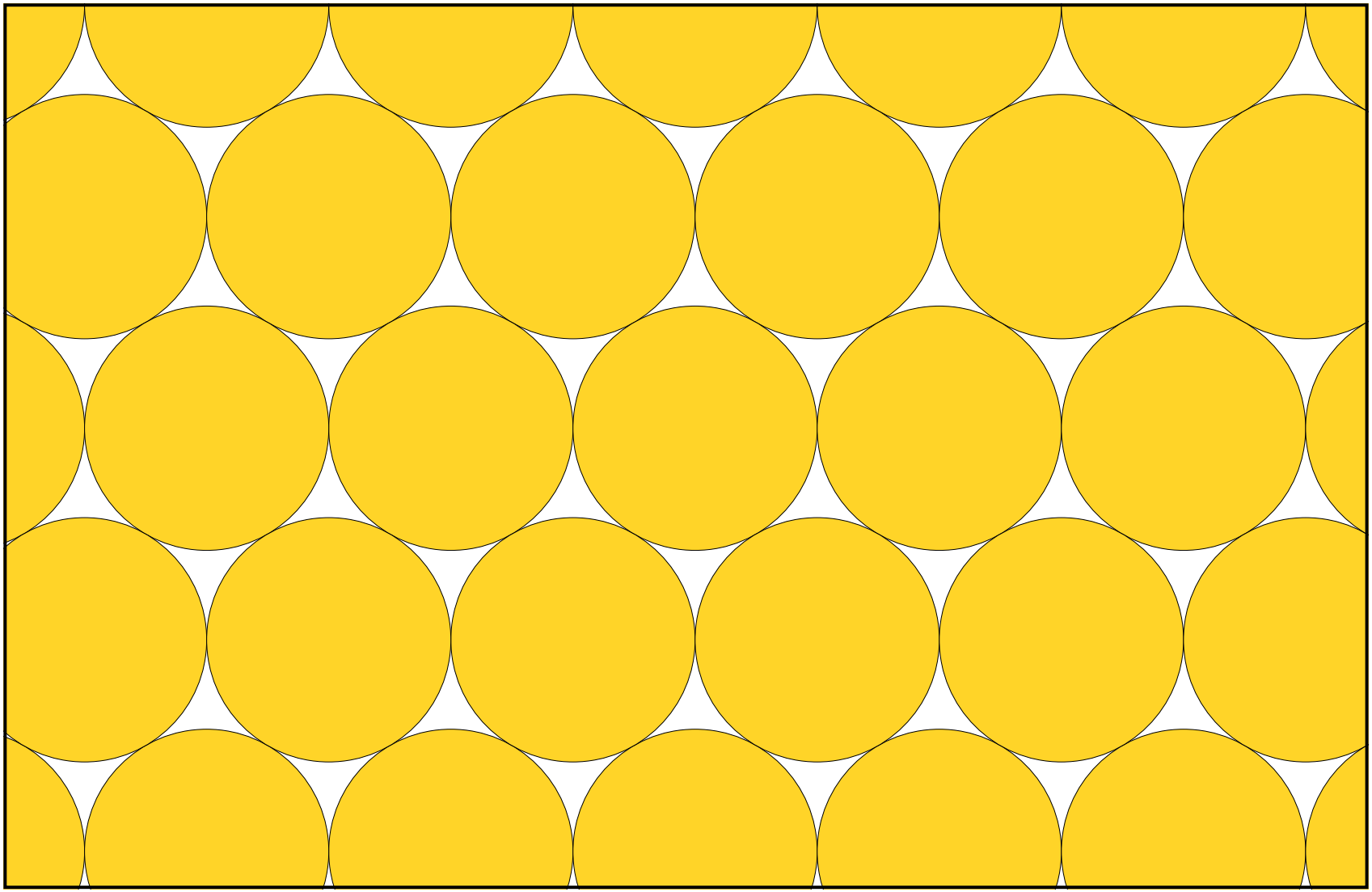
Empilement triangulé : graphe de contact triangulé.

Empilements de disques



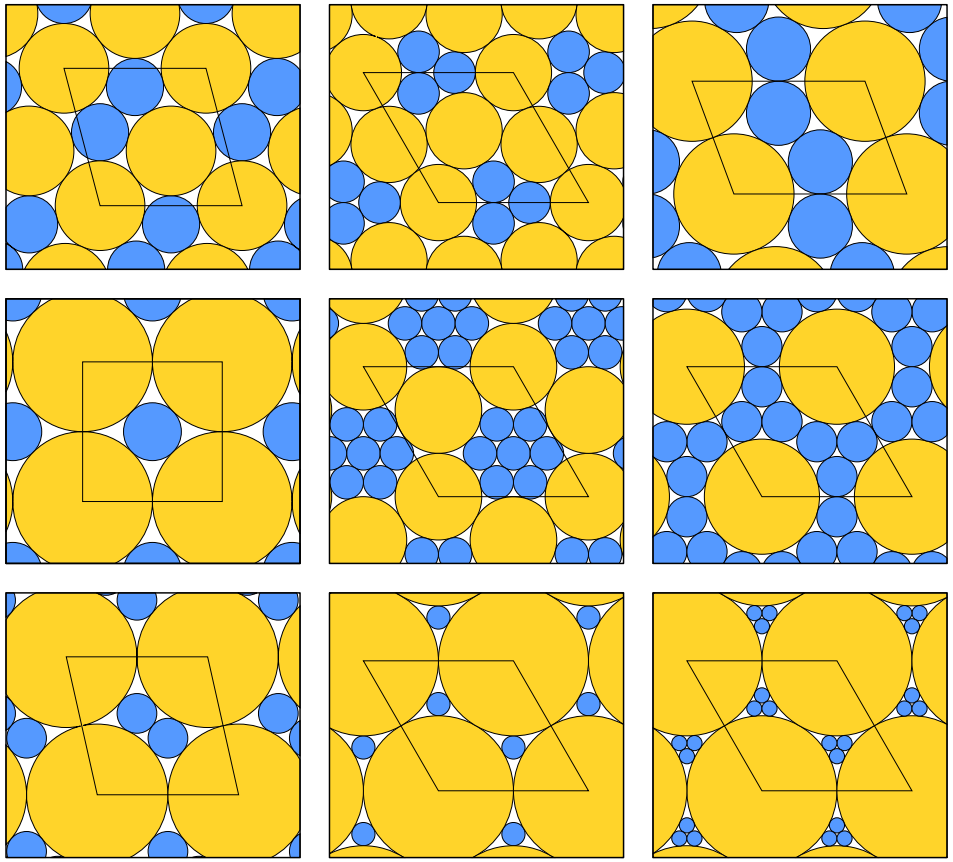
Empilement triangulé $\sim$ puzzle (pavage) de triangles.

Empilements de disques



Exemple triangulé trivial : empilement hexagonal compact (HCP).

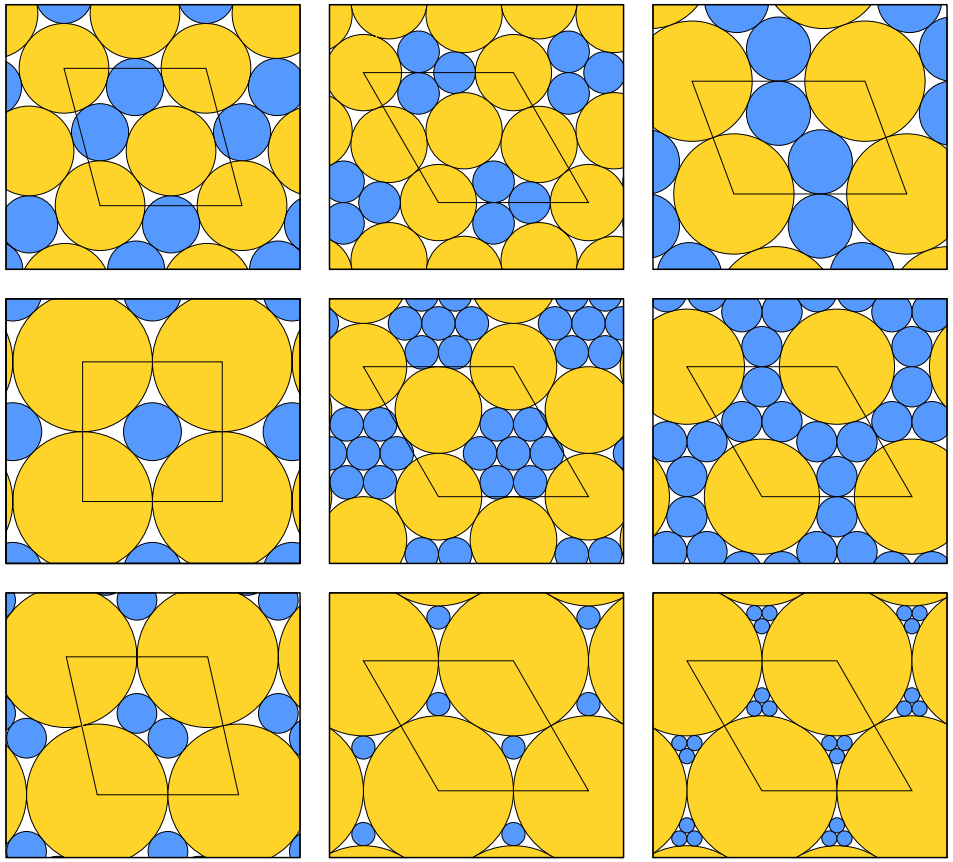
Empilements binaires de disques



Théorème (Kennedy'06)

Il y a exactement 9 valeurs $r < 1$ permettant un empilement triangulé avec des disques de taille 1 et r.

Empilements binaires de disques



Théorème (Kennedy'06)

Il y a exactement 9 valeurs $r < 1$ permettant un empilement triangulé avec des disques de taille 1 et r.

Pour chaque valeur, il existe un empilement *périodique*.

Apériodicité

Question 1

Existe t-il des tailles $r_1 < \ldots < r_k = 1$ de disques qui ne permettent que des empilements triangulés *apériodiques* ?

Apériodicité

Question 1

Existe t-il des tailles $r_1 < \ldots < r_k = 1$ de disques qui ne permettent que des empilements triangulés *apériodiques* ?

Faux pour $k = 2$ (transparent précédent).

Apériodicité

Question 1

Existe t-il des tailles $r_1 < \ldots < r_k = 1$ de disques qui ne permettent que des empilements triangulés *apériodiques* ?

Faux pour $k = 2$ (transparent précédent).

Faux pour $k = 3$:

Théorème (F.-Hashemi-Sizova'21)

Il y a exactement 164 valeurs $s < r < 1$ permettant un empilement triangulé avec des disques de taille 1, r et s.

Pour chaque valeur, il existe un empilement périodique.

Apériodicité

Question 1

Existe t-il des tailles $r_1 < \ldots < r_k = 1$ de disques qui ne permettent que des empilements triangulés *apériodiques* ?

Faux pour $k = 2$ (transparent précédent).

Faux pour $k = 3$:

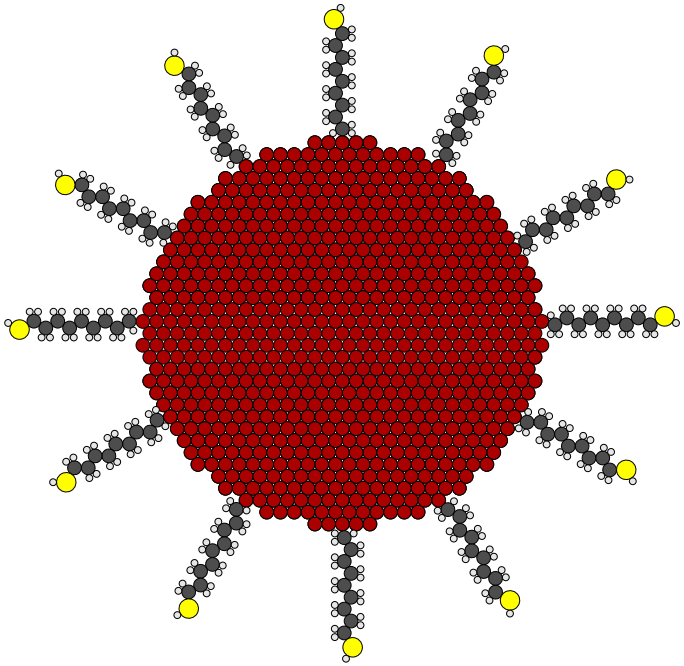
Théorème (F.-Hashemi-Sizova'21)

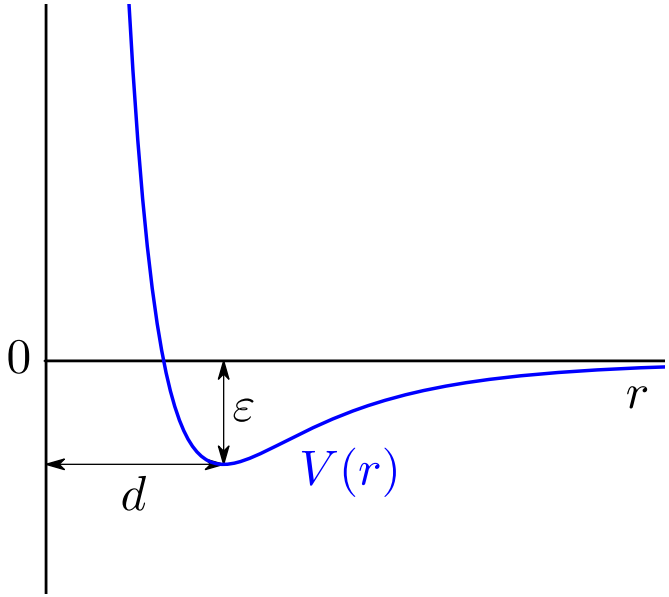
Il y a exactement 164 valeurs $s < r < 1$ permettant un empilement triangulé avec des disques de taille 1, r et s.

Pour chaque valeur, il existe un empilement périodique.

Vraisemblablement faux pour $k = 4$ (travail en cours)

Nanoparticules

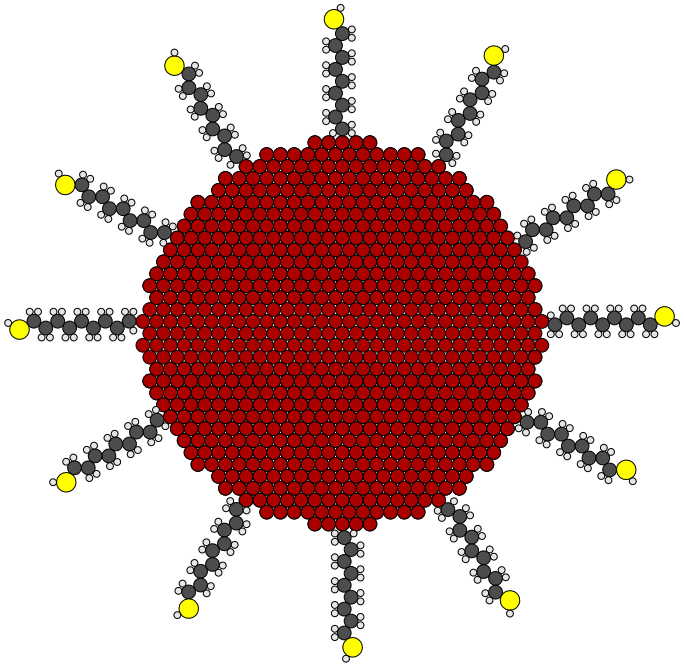


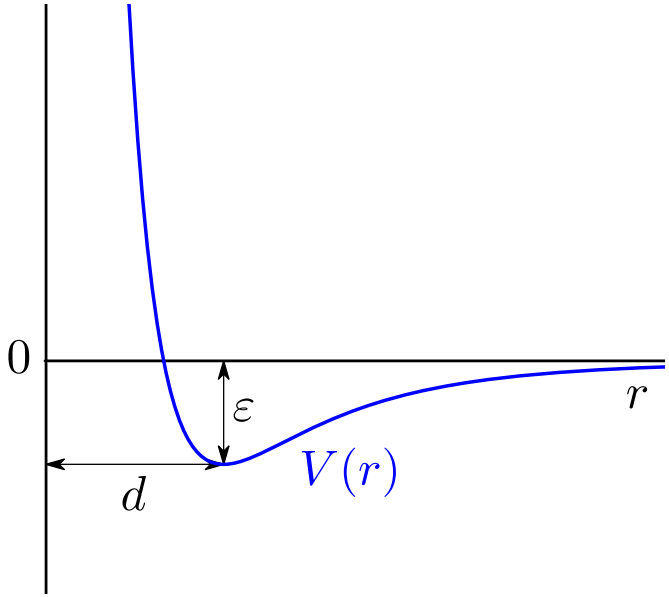


- cœur dur cristallin (or, ruthénium) ;
- couche molle de ligands (thiols) ;
- en solution (hexane).

Évaporation + potentiel d'interaction $\rightsquigarrow$ auto-assemblage (ou pas).

Nanoparticules



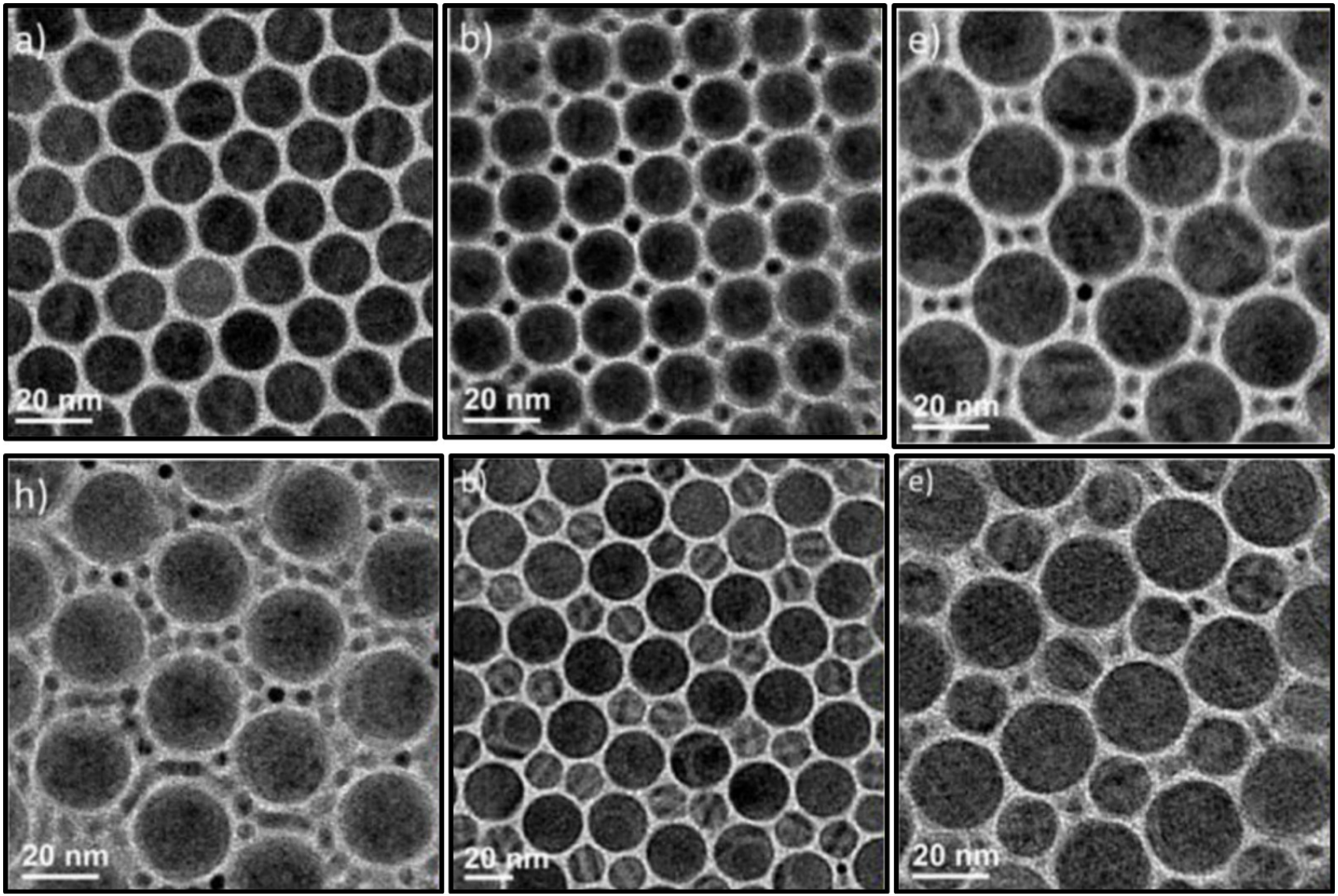


- cœur dur cristallin (or, ruthénium) ;
- couche molle de ligands (thiols) ;
- en solution (hexane).

Évaporation + potentiel d'interaction $\rightsquigarrow$ auto-assemblage (ou pas).

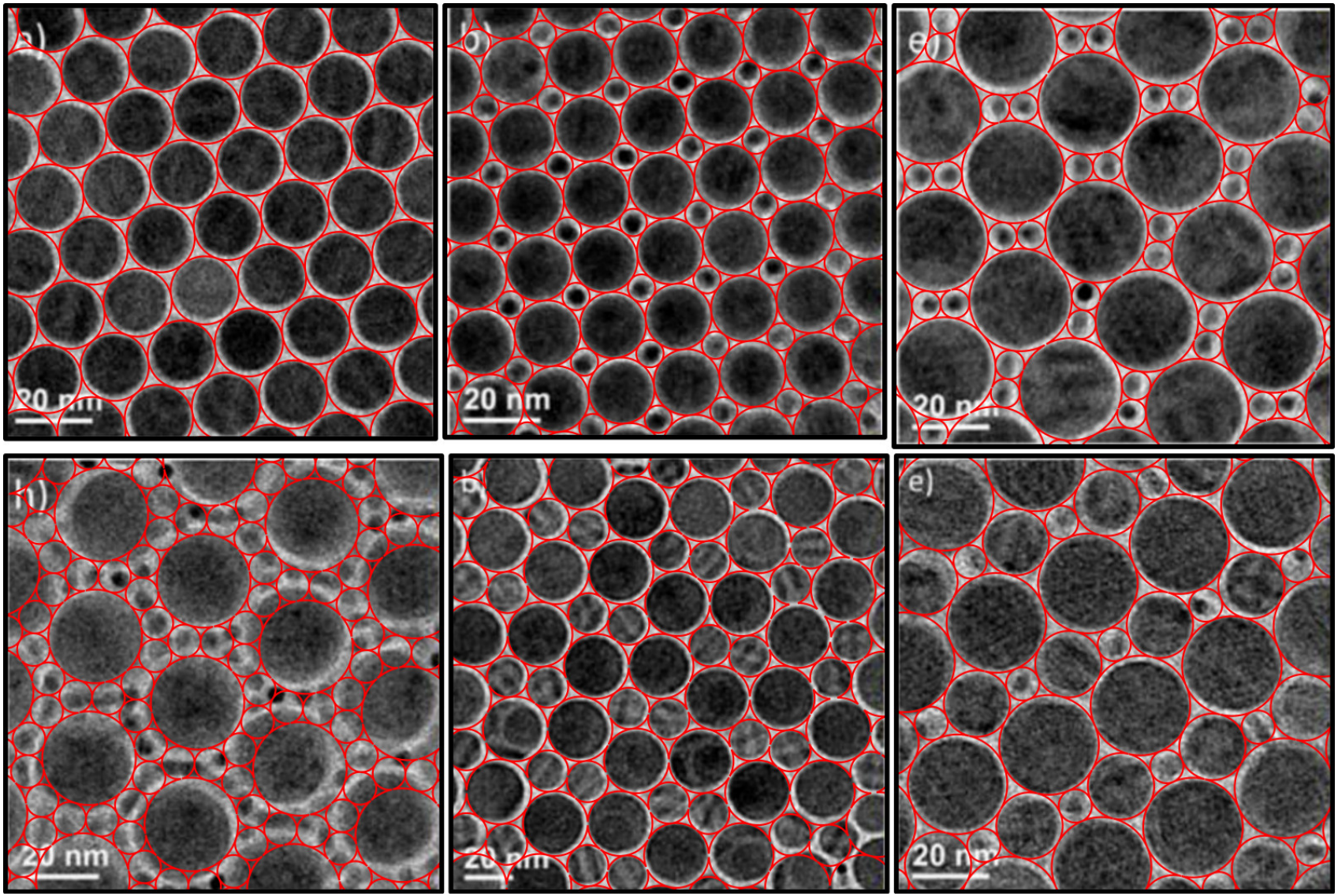
Objectif : combiner les propriétés de différents matériaux.

Supercristaux de nanoparticules



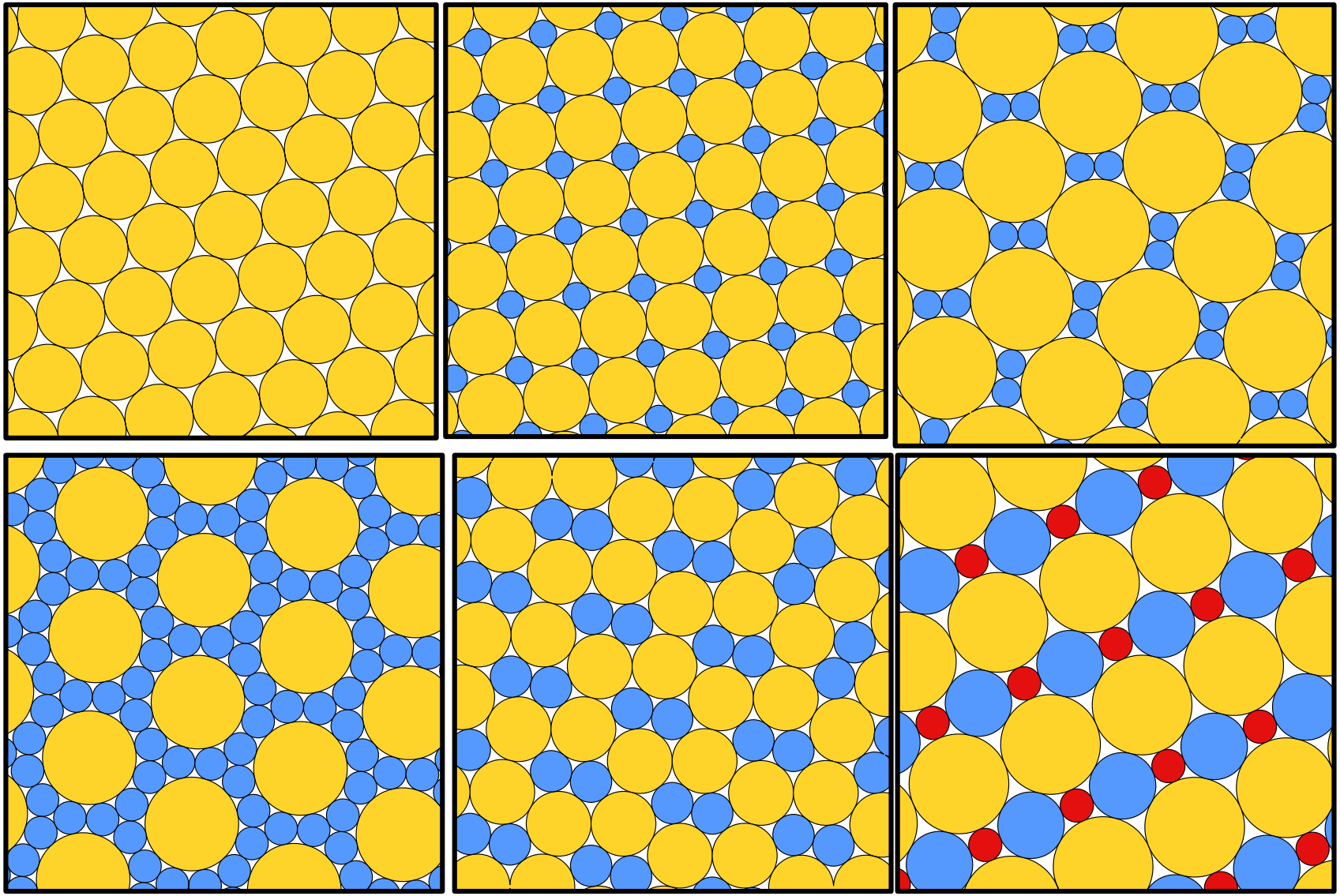
T. Paik, B. Diroll, C. Kagan, Ch. Murray J. Am. Chem. Soc. **137**, 2015.
Binary and ternary superlattices self-assembled from colloidal nanodisks and nanorods.

Supercristaux de nanoparticules



T. Paik, B. Diroll, C. Kagan, Ch. Murray J. Am. Chem. Soc. **137**, 2015.
Binary and ternary superlattices self-assembled from colloidal nanodisks and nanorods.

Supercristaux de nanoparticules



T. Paik, B. Diroll, C. Kagan, Ch. Murray J. Am. Chem. Soc. **137**, 2015.
Binary and ternary superlattices self-assembled from colloidal nanodisks and nanorods.

Pourquoi ça marche ?

Théorème (Tóth'43 / Heppes'03)

HCP / les 4 empilements binaires précédents maximisent la densité.

Pourquoi ça marche ?

Théorème (Tóth'43 / Heppes'03)

HCP / les 4 empilements binaires précédents maximisent la densité.

Question 2

Quels empilements de disques maximisent la densité ?

Pourquoi ça marche ?

Théorème (Tóth'43 / Heppes'03)

HCP / les 4 empilements binaires précédents maximisent la densité.

Question 2

Quels empilements de disques maximisent la densité ?

Question 3

Maximiser la densité $\Leftrightarrow$ minimiser un potentiel d'interaction ?

Pourquoi ça marche ?

Théorème (Tóth'43 / Heppes'03)

HCP / les 4 empilements binaires précédents maximisent la densité.

Question 2

Quels empilements de disques maximisent la densité ?

Question 3

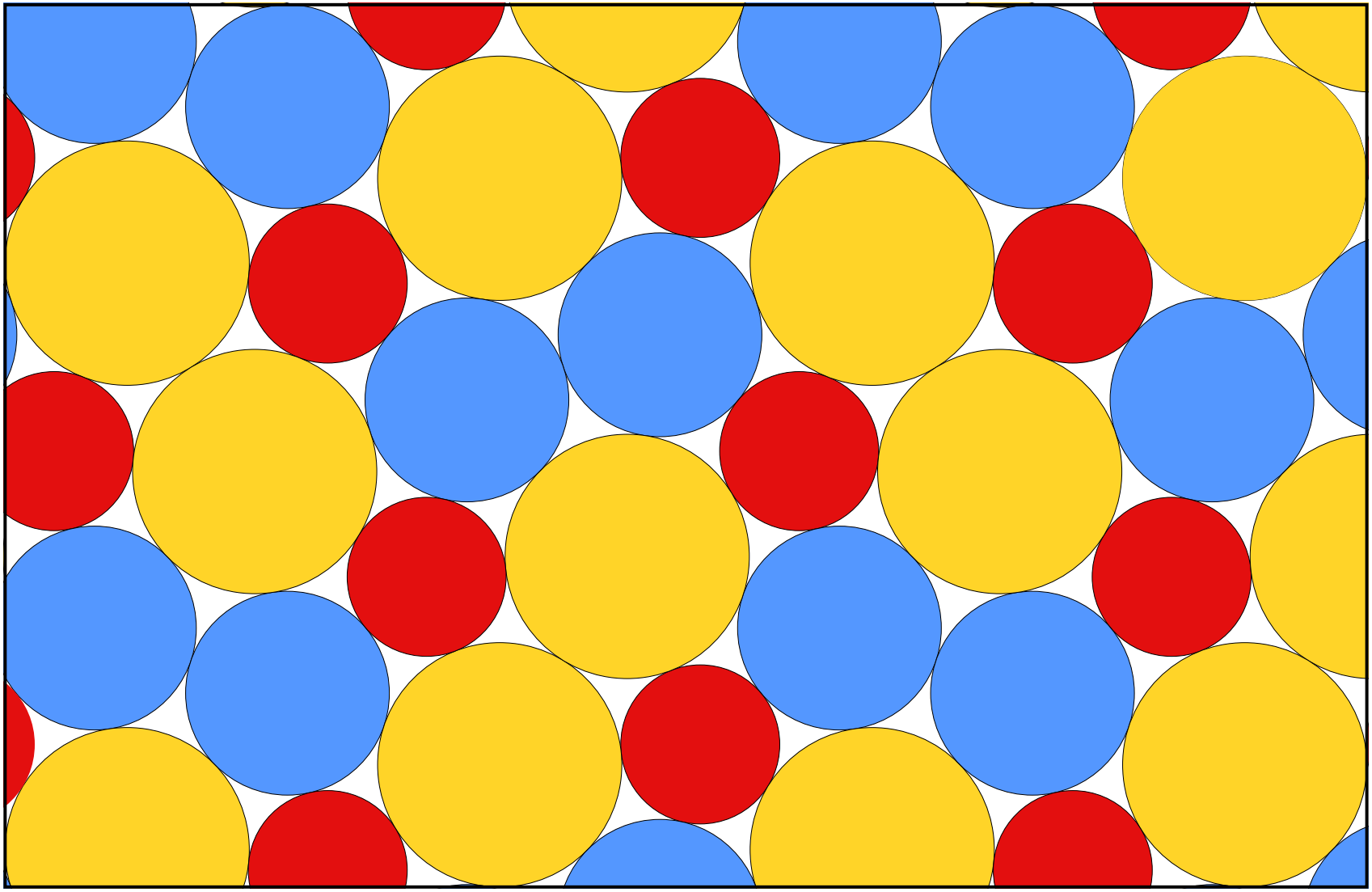
Maximiser la densité $\Leftrightarrow$ minimiser un potentiel d'interaction ?

Question 4

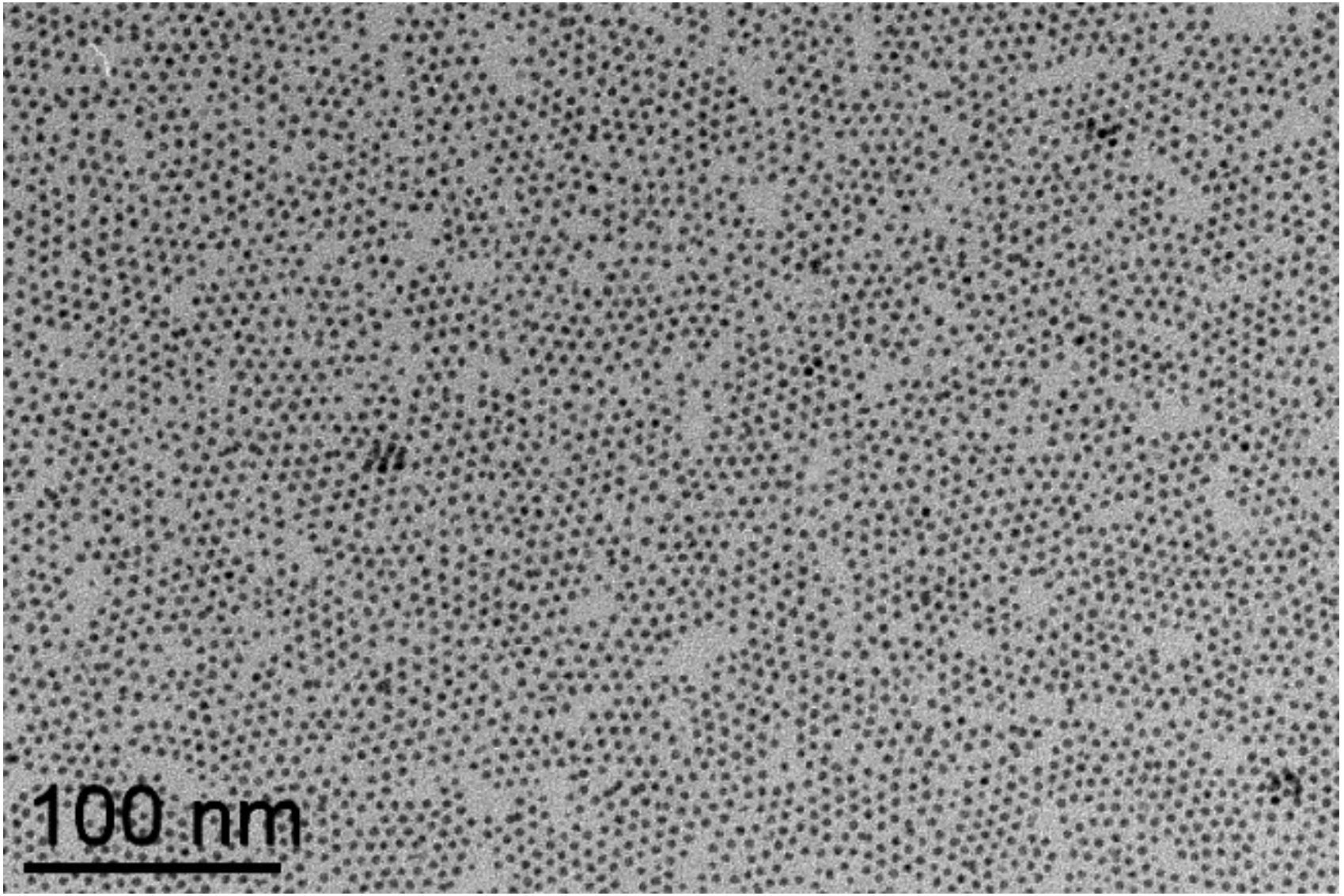
Synthèse de matériaux correspondant aux empilements denses ?

$\rightsquigarrow$ Collab. avec le Labo de Physique et Chimie des Nano Objets.

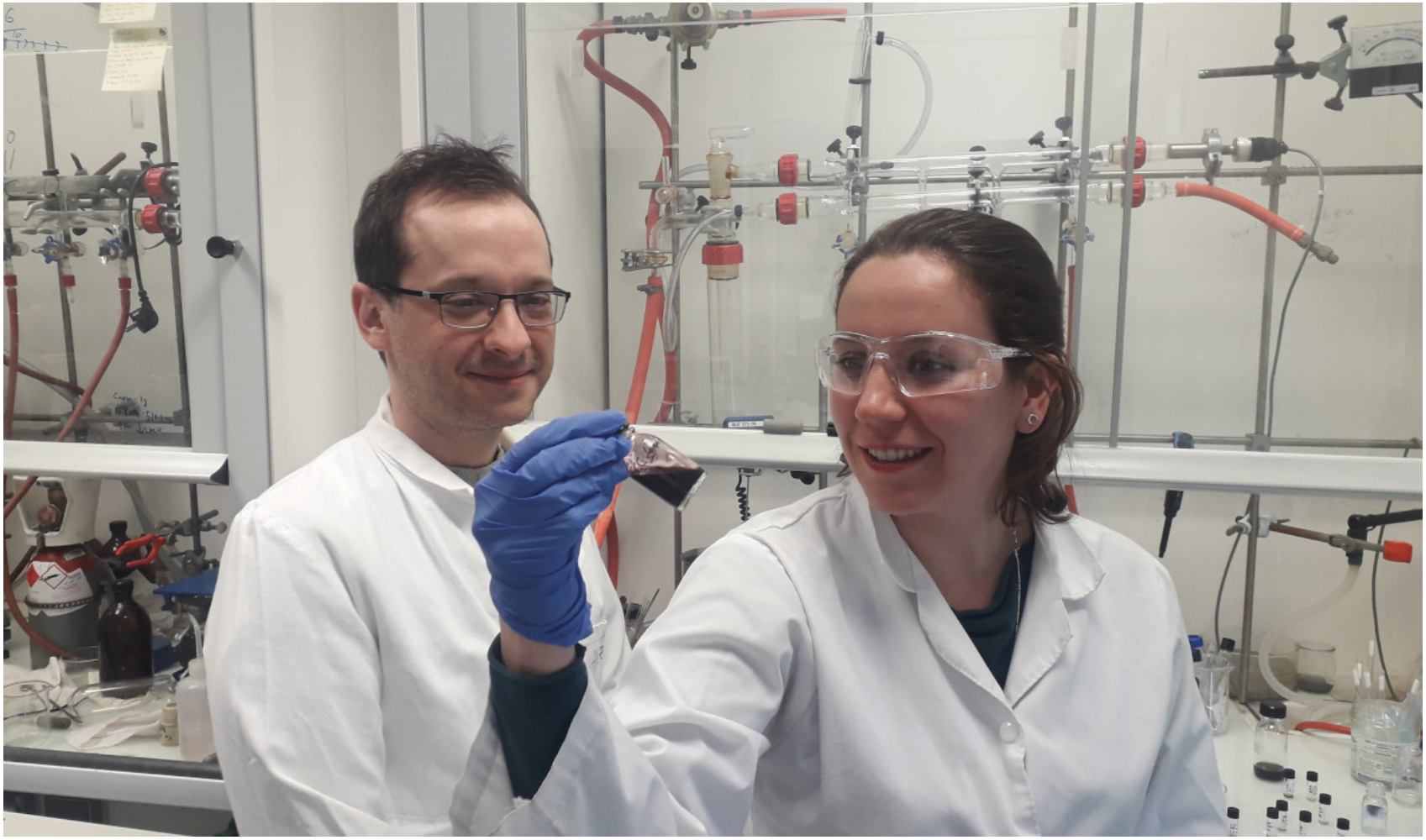
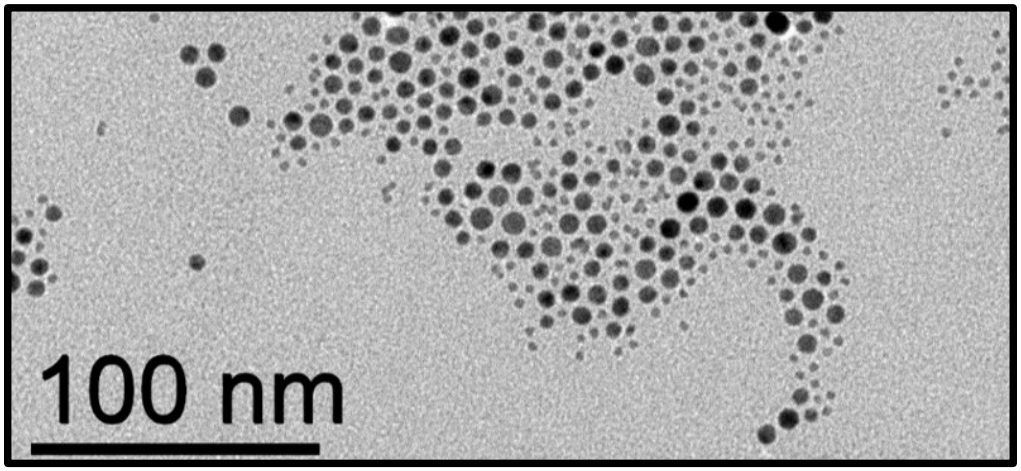
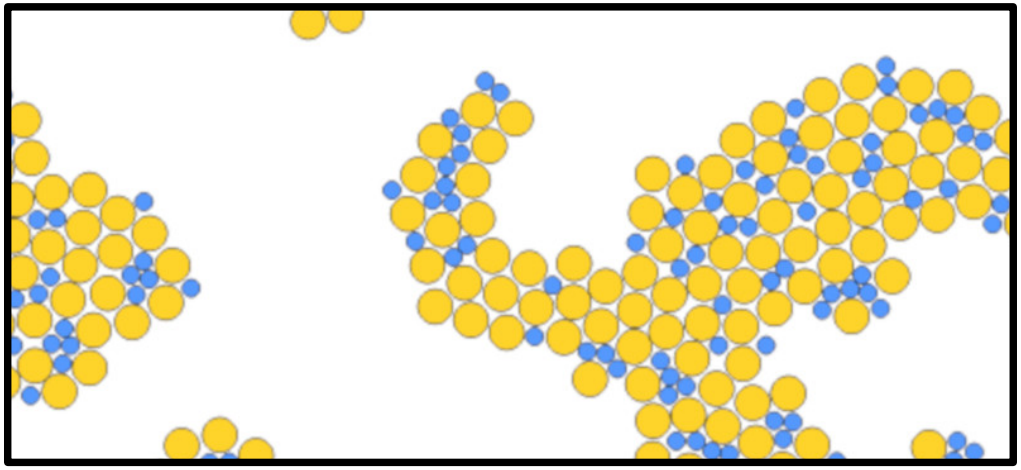
Solution du puzzle du début



NP de ruthénium 3.7 ± 0.3nm synthétisées au LPCNO



Les chimistes du LPCNO (S. Tricard et C. Chinaux-Chaix)



De la théorie à la pratique. . .