



CYCLE DE CONFÉRENCES DE CHIMIE

*Avec le concours de : Manufacture Française des Pneumatiques MICHELIN
Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Clermont-Ferrand
Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF UMR 6296)
U.F.R.S.T. Département de Chimie*

Mercredi 27 Novembre 2013 à 15h30

Amphi de Chimie Paul REMI - (Site des Cézeaux)

Dr. Christel Gervais

Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée de Paris, Collège de France, 75005 Paris

CARACTERISATION PAR RMN D'INTERFACES ORGANIQUES INORGANIKES DANS DES MATERIAUX HYBRIDES A BASE DE SILICE : APPROCHE COMBINEE ENTRE EXPERIENCES ET CALCULS AB-INITIO

Un certain nombre d'applications innovantes de la silice sont liées à ses propriétés de surface, et plus précisément à l'interaction de cette dernière avec la matière organique et/ou biologique. La RMN haute résolution à l'état solide s'avère une technique de caractérisation privilégiée de ces matériaux hybrides puisqu'elle permet d'étudier à la fois la surface de silice, les molécules adsorbées/encapsulées et les interactions entre les deux. En parallèle des expériences de RMN, une surface de silice amorphe hydroxylée a été modélisée en utilisant une approche *ab initio* périodique [1] pour tenter de mieux caractériser les sites réactifs et de comparer divers modes d'adsorption des molécules étudiées afin d'en déduire les plus favorables énergétiquement. De plus, les paramètres RMN associés à ces différents modèles ont été calculés en utilisant également une approche *ab initio* périodique [2] afin de les comparer aux données expérimentales et déterminer ainsi les modèles les plus pertinents.

Cette approche combinant expériences et théorie sera illustrée à l'aide de différents exemples de systèmes hybrides tels que des molécules encapsulées dans des silices mésoporeuses (glycine [3], ibuprofène...), l'interface entre un phospholipide et une coque de silice [4] ou encore des nanoparticules de silice fonctionnalisées par des ligands imidazolium.

[1] F. Tielens, C. Gervais, J.-F. Lambert, F. Mauri, D. Costa *Chem. Mater.* 20 (2008) 3336

[2] C. Bonhomme, C. Gervais, F. Babonneau, C. Coelho, F. Pourpoint, T. Azaïs, S. E. Ashbrook, J. M. Griffin, J. R. Yates, F. Mauri, C. J. Pickard *Chem. Rev.* 112 (2012) 5733

[3] N. Folliet, C. Gervais, D. Costa, G. Laurent, F. Babonneau, L. Stievano, J.-F. Lambert, F. Tielens *J. Phys. Chem. C* 117 (2013) 4104

[4] N. Folliet, C. Roiland, S. Bégu, A. Aubert, T. Mineva, A. Goursot, K. Selvaraj, L. Duma, F. Tielens, F. Mauri, G. Laurent, C. Bonhomme, C. Gervais, F. Babonneau, T. Azaïs *J. Am. Chem. Soc.* 133 (2011) 16815

Coordinatrice : Christine MOUSTY, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF-UMR 6296)

Université Blaise Pascal, 24, avenue des Landais, BP 80026 63171 Aubière cedex-France

☎ 33 473 407 598 – fax : 33 473 407 108 courriel : Christine.Mousty@univ-bpclermont.fr