

Quantification des facettes cristallographiques de surface pour les nanoparticules étudiées par tomographie électronique

BAAZIZ Walid | ERSEN Ovidiu | VALETTE Sebastien | MAXIM Voichita | TOTH Reka | DE-KERGOMMEAUX Antoine | AIRIAU Marc

IPCMS | IPCMS | CREATIS | CREATIS | Solvay | Solvay | Solvay

Symposium **COMMUN : Microscopies 3D Multi-Echelles**

La cristallographie de surface de nanoparticules est un paramètre essentiel qui gouverne leurs propriétés physico-chimiques dépendant du type d'atome en surface, de leur densité et de l'environnement local. L'exemple typique est celui de la catalyse hétérogène où les propriétés d'activité et sélectivité sont étroitement liées aux plans cristallographiques de surface. Pour permettre leur quantification, la tomographie électronique est indispensable en raison de la résolution nanométrique nécessaire pour les identifier. Cependant, il s'agit généralement d'une étude sur des particules individuelles et une approche statistique s'impose pour transposer les résultats obtenus aux propriétés d'une assemblée de particules. Nous avons donc développé une approche de quantification 3D permettant de découper la surface des nanoparticules dans des plans correspondant à des facettes cristallographiques. Les données d'entrée sont les modélisations 3D des nanoparticules issues de la segmentation des reconstructions calculées par tomographie en champ sombre annulaire (STEM-HAADF), pour réduire l'influence du contraste de diffraction. Cette classification des voxels de surface est basée sur l'orientation relative de leurs normales et peut être facilement appliquée à un grand nombre de particules.

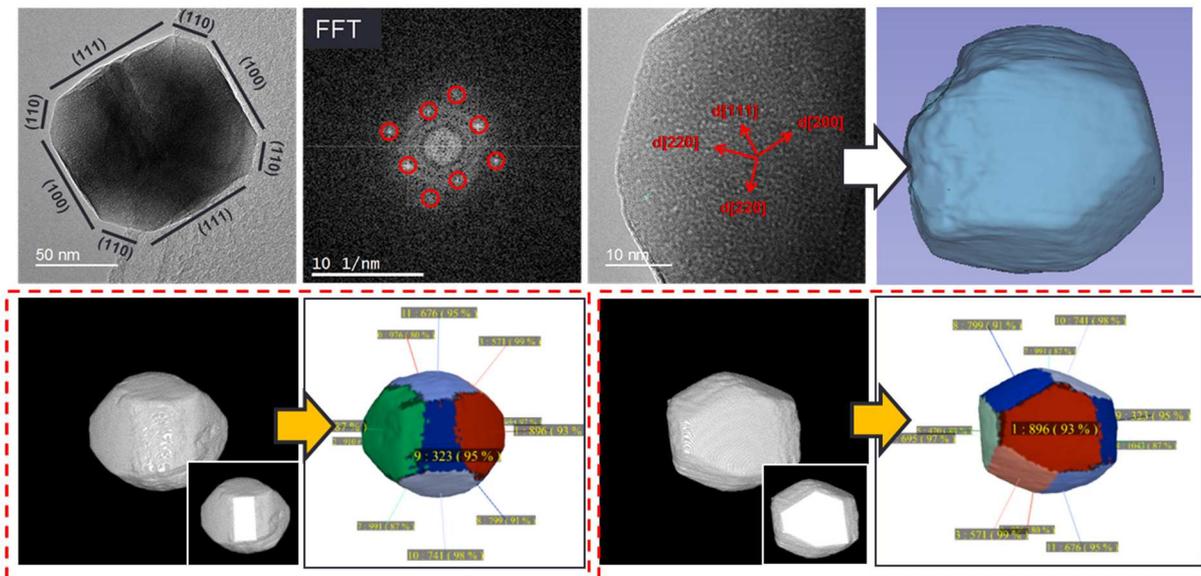


Figure : Illustration de la procédure utilisée pour découper la surface 3D d'une nanoparticule déterminée par tomographie électronique les facettes cristallographiques les plus favorables énergétiquement.