

Séminaire SOLEIL

Structure et durabilité de verres d'intérêt géologique, historique et environnemental

Stéphanie ROSSANO

(Laboratoire Géomatériaux et Environnement, Université Paris-Est Marne la Vallée)

&

Modélisation *ab initio* de spectres XANES

Delphine CABARET

(IMPMC, Université Pierre et Marie Curie)

Lundi 6 septembre à 14h00

Grand Amphi SOLEIL

Invitées par Anne Marie FLANK

Structure et durabilité de verres d'intérêt géologique, historique et environnemental

Une connaissance approfondie de la structure des verres, via notamment les comportements des différents oxydes qui les composent, s'avère indispensable pour mieux contraindre les modèles géochimiques de description du comportement dynamique de notre planète, pour maîtriser les propriétés des verres technologiques et en concevoir de nouvelles, pour comprendre les phénomènes d'altération des verres sous l'action de divers agents altérants et pour prévoir la durabilité des matériaux actuels et du patrimoine. Après une brève présentation du matériau Verre, quelques exemples d'études de la structure de verres d'intérêt géologique seront présentés. Enfin, l'influence de l'activité bactérienne sur l'altération de matériaux du patrimoine (vitrail) et d'intérêt environnemental (scories) sera exposée.

Modélisation *ab initio* de spectres XANES

Dans cet exposé, je parlerai des récents développements effectués à l'IMPMC pour modéliser de façon *ab initio* les spectres d'absorption des rayons X au seuil K. Depuis toujours, notre objectif est de comprendre, analyser, interpréter le plus finement possible les structures de seuil (préseuil compris) avec des outils de plus en plus performants. Je montrerai des exemples d'application (impuretés dans les cristaux, protéines, verres, minéraux) illustrant les diverses potentialités de notre code (Xspectra de quantum-espresso). Je terminerai par une étude originale, initiée il y a un an, permettant de prendre en compte les vibrations atomiques dans le calcul des structures de préseuil.

Formalités d'entrée : accès libre dans l'amphi du Pavillon d'Accueil. Si la manifestation a lieu dans le Grand Amphi Soleil du Bâtiment Central, merci de vous munir d'une pièce d'identité (à échanger à l'accueil contre un badge d'accès).

SYNCHROTRON SOLEIL

Division Expériences - L'Orme des merisiers - Saint-Aubin - BP 48 - 91192 GIF S/YVETTE Cedex

<http://www.synchrotron-soleil.fr/Soleil/ToutesActualites>

Secrétariat Division Expériences : sandrine.vasseur@synchrotron-soleil.fr