

Etude de la structure de verres magnésio-silicates par spectroscopie raman, absorption des rayons-X et modélisation

N. TRCERA

(Université Paris-Est Marne la Vallée, Laboratoire Géomatériaux et Géologie de l'Ingénieur (G2I), Marne la Vallée, France)

Invité par la ligne LUCIA
dans le cadre d'une bourse post-doctorale

Lundi 30 juin à 11h00
Petit Amphi Soleil – Bat Accueil

Le magnésium est l'un des quatre éléments majeurs sur Terre. Il est présent dans différentes proportions dans les verres industriels et naturels (jusqu'à 30 poids% dans les komatiites, verres ultramafiques d'âge archéen). Sa présence semble influencer les propriétés physico-chimiques des verres et tout spécialement leur durabilité. Malgré ce comportement, le magnésium a été relativement peu étudié dans les verres et les études précédentes ont conduit à des contradictions sur son environnement (coordinance 4 et 6 par RMN et en coordinance 5 par diffraction des neutrons). Dans le but de lever ces contradictions, l'étude de la structure des verres magnésio-silicatés et de l'environnement du magnésium a été réalisée en utilisant deux méthodes complémentaires : la spectrométrie Raman et la spectroscopie d'absorption des rayons X.

La spectroscopie Raman permet d'obtenir des informations sur la structure des verres et plus spécifiquement sur la connectivité du réseau silicaté. Les variations de la région des spectres Raman comprise entre 800 et 1400 cm^{-1} illustrent l'évolution du degré de polymérisation des verres en fonction du taux de magnésium, du taux de silicium et de la nature de l'alcalin modificateur de réseau.

La spectroscopie d'absorption des rayons X au seuil K du magnésium nous a permis d'accéder à l'environnement spécifique autour de cet ion. Les spectres XANES des verres ont été comparés à ceux de références cristallines contenant du magnésium dans différents environnements (coordinance et nature des voisins notamment). Pour aller au-delà de la méthode dite « d'empreinte digitale », et extraire des informations structurales pertinentes, les spectres XANES des cristaux et des verres ont été calculés. Les calculs ont été réalisés avec un code basé sur une méthode en ondes planes, dans l'espace réciproque avec l'utilisation de potentiel non muffin-tin. L'utilisation des calculs a permis de mettre en évidence des paramètres structuraux pertinents pour expliquer la position des structures XANES. Pour les verres, les structures initiales utilisées pour les calculs ont été obtenus par dynamique moléculaire classique puis relaxée de façon *ab initio*. L'environnement du magnésium (coordinance/distorsion) peut varier en fonction de la composition du verre. De ce fait, les interprétations classiquement réalisées des spectres Raman des verres doivent être considérées avec précaution.

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/portal/page/portal/Soleil/ToutesActualites>

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