



Spectres Raman des Silicates - Vers une meilleure compréhension de l'influence du degré de polymérisation sur les intensités

Vanessa Labet, Philippe Colombar

► To cite this version:

Vanessa Labet, Philippe Colombar. Spectres Raman des Silicates - Vers une meilleure compréhension de l'influence du degré de polymérisation sur les intensités. RCTF2014 14ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Jun 2014, Paris, France. hal-01611695

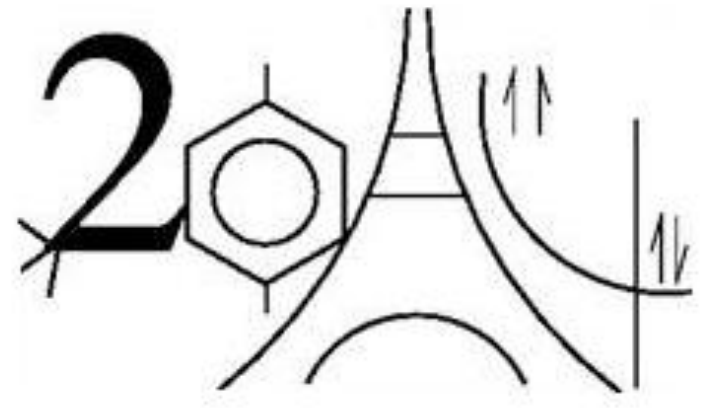
HAL Id: hal-01611695

<https://hal.sorbonne-universite.fr/hal-01611695>

Submitted on 6 Oct 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Spectres Raman des Silicates

Vers une meilleure compréhension de l'influence du degré de polymérisation sur les intensités

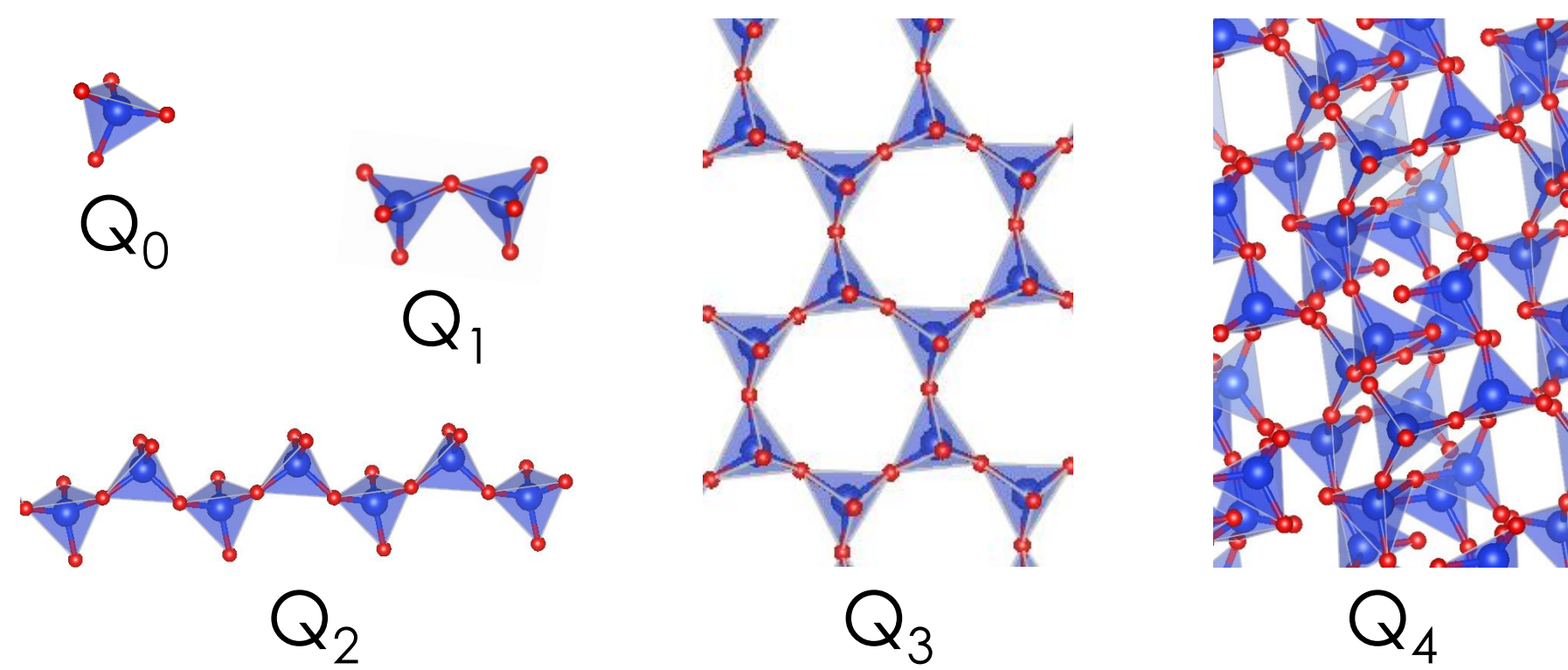
Vanessa LABET, Philippe COLOMBAN

Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 6, UMR 8233, MONARIS, 75005, Paris
CNRS, UMR 8233, MONARIS, 75005, Paris

1. Contexte

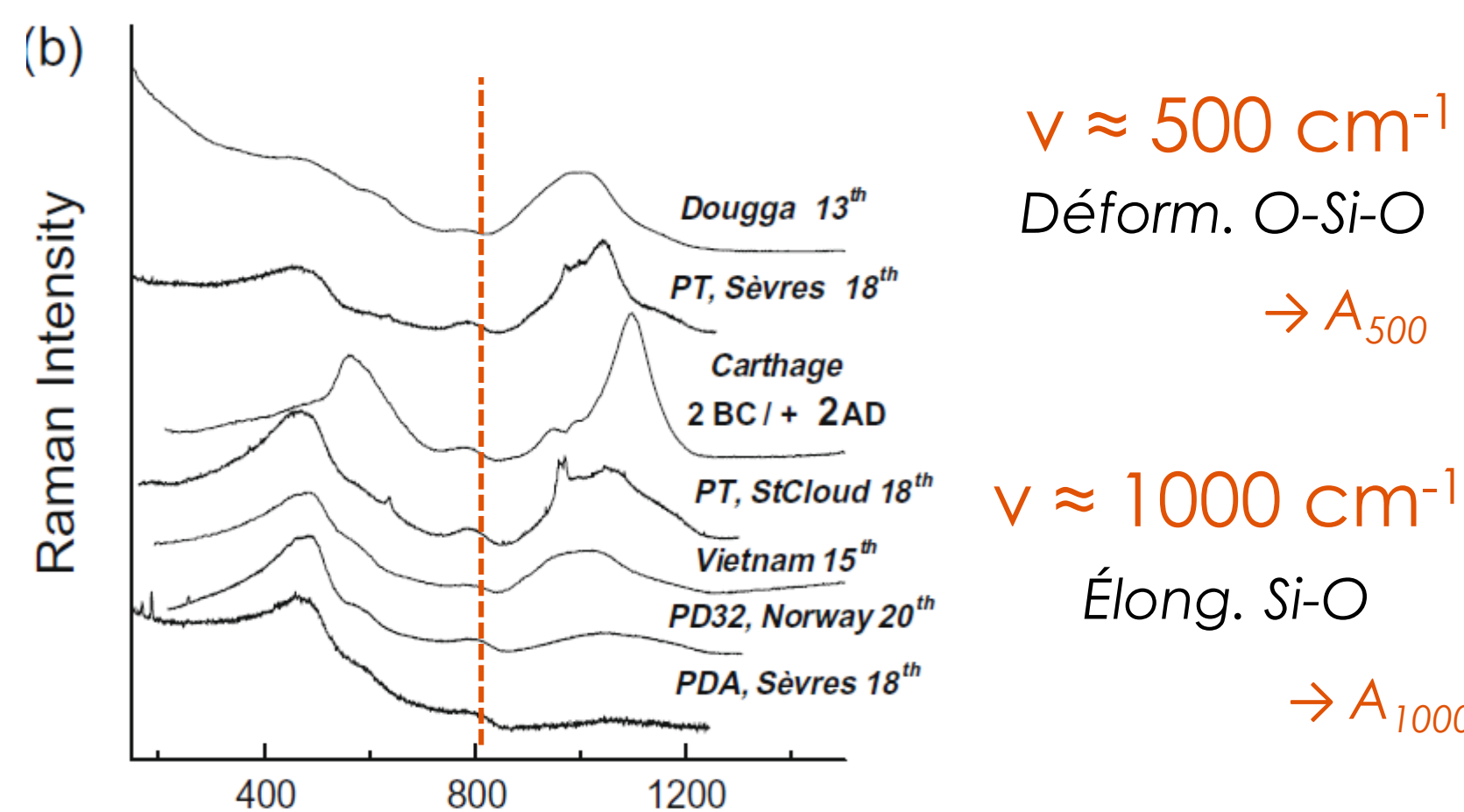
A. Classification des silicates

Basé sur le nombre d'oxygène pontant (O_{BO}) par silicium

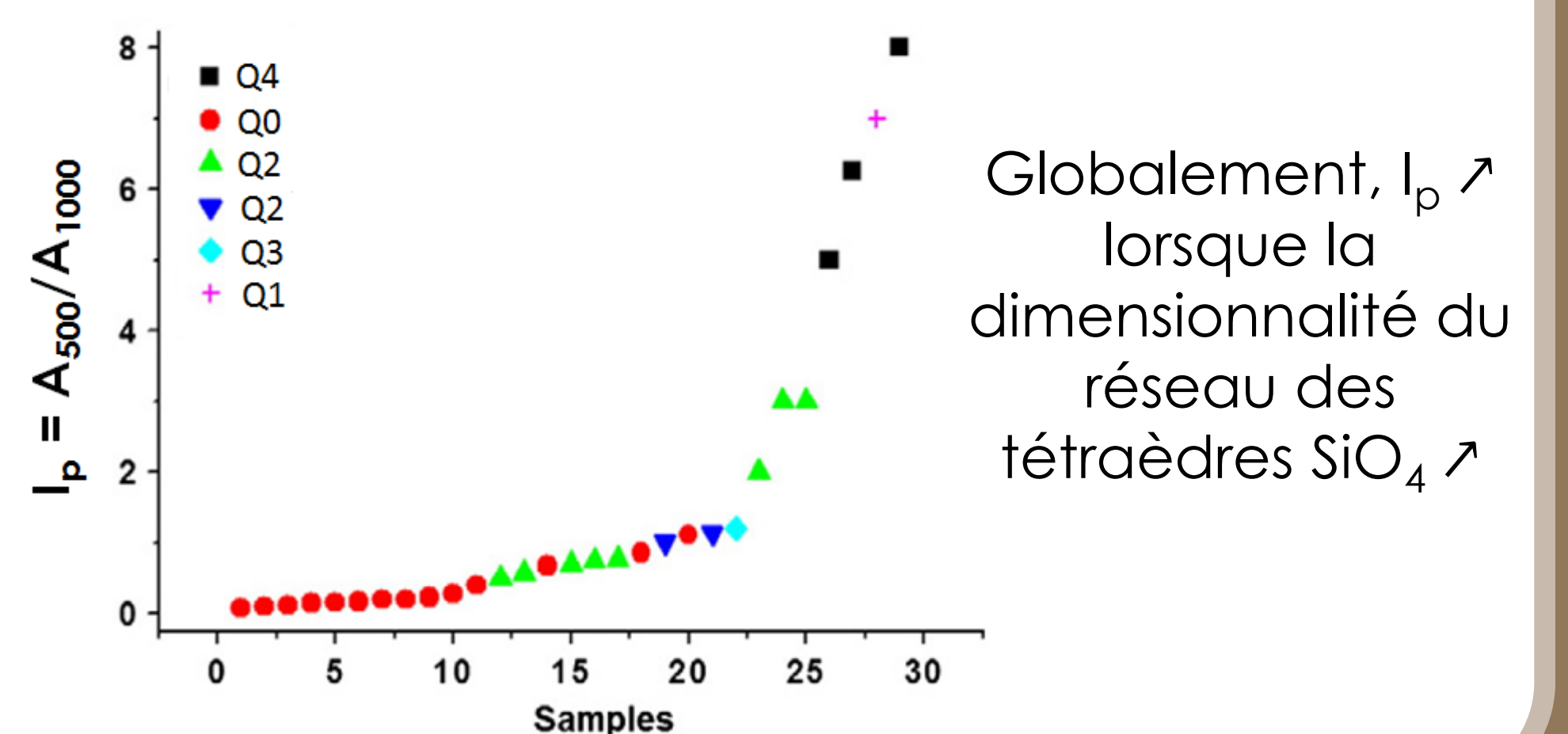


B. Spectre Raman d'un silicate amorphe

2 bandes intenses :



C. Influence du degré de polymérisation du réseau des td « SiO_4 »



2. Objectif

En pratique, l'indice I_p permet de prédire Q_n . Pourquoi ? $\Rightarrow$ **Besoin d'un support théorique !**

3. Démarche

1. Construction de modèles structuraux pour les différents types de coordination des silicates.
2. Modélisation des spectres Raman par DFT
3. Validation de la stratégie par confrontation à l'expérience (indice I_p)
4. *Décortication du modèle pour déterminer l'origine du phénomène. (en cours)*

4. Systèmes étudiés - Méthodes calc.

