



Approches Expérimentales et de Simulations des Spectroscopies RMN et Vibrationelles pour l'Etude des Matériaux

(Partie II : Résonance Magnétique Nucléaire)

<u>P. Florian</u>, F. Fayon, D. Massiot Conditions Extrêmes et Matériaux : Haute Température et Irradiation





Interaction entre un champ magnétique externe et les moments magnétiques nucléaires (spins)



Interaction avec l'environnement chimique du noyau observé







Différentes interactions noyau ↔ environnement mesurables

- Déplacement chimique (position) ↔ nuage électronique
- Interaction guadrupolaire ↔ champs électrique produit par les charges environnantes
- Interaction dipolaire ↔ distances internucléaires
- Couplage scalaire « J » ↔ échanges électroniques à travers les liaisons





Calculs de gradient de champ électrique de ²⁷Al sur des alumino-silicates





Whittaker & Muntus, *Ionic radii for use in geochemistry*, *Geochim. Cosmocchim. Acta*, 1970, **34**, 945-956



Calculs de gradient de champ électrique de ²⁷Al sur des alumino-silicates



Gaussian 03 / RHF Al, Si, O, H : 6-311+G(d) Li -> Ca : 3-21G, Y, La, Sc : LanL2DZ





Mesure de couplage scalaire *J*²⁹Si-²⁹Si sur la wollastonite CaSiO₃







Calculs de couplage scalaire *J*²⁹Si-²⁹Si dans les silicates binaires





Mesure d'angles de liaison Si-O-Si dans un verre de wollastonite CaSiO₃





Cemht