

---

# Le lien structure-propriétés dans les verres : apports des simulations moléculaires

Matthieu Micoulaut\*<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Physics, Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, Sorbonne Université (SU Paris, France) – Sorbonne Universités, UPMC, CNRS – France

## Résumé

Nous décrivons ici les principes généraux permettant de décrire les propriétés structurales, dynamiques et vibrationnelles des liquides surfondus et des verres en illustrant le propos avec des applications en direction des oxydes (silicates, borates,...), des chalcogénures (Ge-Se,...) et des verres sous conditions extrêmes.

Si la méthodologie est désormais éprouvée, qu'elle soit de nature quantique (technique *ab initio*) ou classique (champs de force), et permet en effet de lier les propriétés de la structure désordonnée des verres avec certaines de leurs propriétés, nous décrivons aussi quelques limitations importantes et pièges à éviter.

Références : *Relaxation and physical ageing in network glasses : a review*, M. Micoulaut, Report on Progress in Physics **79**, 066504 (2016)

---

\*Intervenant