
Construction ab initio d'un diagramme de phase potentiel.température : Le cas de l'interface eau/Ru(0001)

Nicolas Lespes^{*†1} and Jean-Sébastien Filhol¹

¹Institut Charles Gerhardt Montpellier - Chimie, Théorique, Méthodologies, Modélisation (ICGM-CTMM) – Aucune – Place Eugène Bataillon 34 095 Montpellier Cedex, France

Résumé

Le domaine de l'électrochimie dans les matériaux ouvre un large éventail d'applications, comme les piles, les batteries, la catalyse ou encore la corrosion des métaux. Les aspects électrochimiques naissent à une interface entre un conducteur électrique (l'électrode) et, soit un isolant électronique, soit un conducteur ionique. L'importance de la modélisation de ces interfaces électrochimiques permet la compréhension des phénomènes électrochimiques à l'échelle atomique qui sont difficilement accessible expérimentalement. Par exemple la structure d'une interface (métal-eau ou métal-solvant) peut être modifiée par le potentiel appliqué induisant ainsi une modification structurale de l'interface mais aussi de ces propriétés de solvation locales conduisant à une forte modification de la réactivité de surface.

Dans un premier temps, nous avons étudiés les effets électrochimiques sur la structure d'une monocouche d'eau sur du Ru(0001) en étudiant par des calculs DFT un ensemble de structures possibles (1-3) et observées (4-5) en fonction du potentiel appliqué (6-7). Puis à l'aide de modèles classiques de physique statistique, nous avons déterminé le diagramme de phase électrochimique en température (i.e T Vs Potentiel électrochimique) pour l'ensemble de ces phases.

L'étude des effets cinétiques isotopiques sur ce genre de système en température et en électrochimie nous a permis comprendre pourquoi l'eau lourde ne se dissocie pas sur le ruthénium.

J. Carrasco, A. Hodgson, A. Michaelides, *Nature Materials* 11 (2012) 667-674.

S. Haq, C. Clay, G.R. Darling, G. Zimbitas, A. Hodgson, *Physical Review B* 73 (2006) 115414.

P.J. Feibelman, *Science* 295 (2002) 99-102.

*Intervenant

†Auteur correspondant: lespes.nicolas@gmail.com

D.N. Denzler, C. Hess, R. Dudek, S. Wagner, C. Frischkorn, M. Wolf, G. Ertl, Chemical Physics

Letters 376 (2003) 618-624

S.Maier, I. Stass, J.I. Cerda, M. Salmeron, Physical Review Letters 112 (2014) 126101

J.S. Filhol, M.L. Doublet, Catalysis Today 202 (2013) 87-97.

M. Mamatkulov, J.S. Filhol, Physical Chemistry Chemical Physics 13 (2011) 7675-7684.

Mots-Clés: Ru(0001), monocouche d'eau, Density Functional Theory, Electrochimie, Diagramme de phase, effect isotopique, Calcul à température finie