
Potentiel d'interaction Ar-Au, Ar-Au(111) et Ar-Au(100) et TMAC de l'argon sur une surface d'or (100).

Romain Grenier^{*†1} and Céline Léonard

¹Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Echelle (MSME) – Université Paris-Est Marne-la-Vallée (UPEMLV), CNRS : UMR8208 – Université Paris-Est, 5 Bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée, Cedex 2, France

Résumé

L'étude des écoulements de gaz nobles dans des micro-conduites nécessite la connaissance des coefficients d'accommodation et de glissement à la surface. Dans cette optique nous nous sommes intéressés à la modélisation de l'interaction d'un atome d'argon sur une surface d'or à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité. Les coefficients d'accommodation sont alors obtenus par la simulation de collisions d'atomes d'argons sur une surface d'or. Les potentiels d'interaction de l'argon avec l'or étant issus des résultats de la DFT. Il n'existe pas de données bibliographiques nombreuses sur le système argon-or, nous avons donc choisi de tester différentes fonctionnelles DFT avec le code VASP [1] sur la diatomique Ar-Au. Le potentiel d'interaction diatomique est aussi déterminé très précisément au niveau RCCSD(T) afin de servir de comparaison avec la DFT. Pour la diatomique la comparaison des potentiels Coupled-Cluster et la fonctionnelle vdW OPTB86b [2] nous conforte dans le choix de l'utilisation de cette fonctionnelle pour modéliser l'interaction d'un atome d'argon avec une surface d'or. La fonctionnelle vdW-DF2 [2] permet également de modéliser correctement l'interaction de l'argon sur une surface d'or. La corrugation des surfaces d'or (111) et (100) est également examinée et un potentiel de pair utilisable dans la dynamique moléculaire est mis en place en moyennant les effets de la corrugation.

Par dynamique moléculaire, le coefficient d'accommodation tangentiel (TMAC) de l'argon sur une surface d'or parfaite est calculé en accumulant les propriétés de vitesses d'entrée et de sortie des atomes d'argon projetés suivant un angle incident à la surface.

References:

G. Kresse and J. Furthmüller. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 54, 11169 (1996), and references therein.
J. Klimeš, D.R. Bowler, and A. Michaelides, *Phys. Rev. B*, 83, 195131 (2011).

Mots-Clés: Ar, Au, adsorption, gold, TMAC

*Intervenant

†Auteur correspondant: Romain.Grenier@u-pem.fr