

---

# Physisorption d'une molécule de dihydrogène sur une surface Cu (100)

Eddy Bernard\*<sup>1</sup>, Marie Guitou\*<sup>1</sup>, Alexander Mitrushchenkov<sup>1</sup>, and Gilberte Chambaud<sup>1</sup>

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

## Résumé

Nous nous sommes intéressés à la physisorption d'une molécule de dihydrogène sur une surface de cuivre (100). Des études ont déjà été effectuées sur ce système modélisant la surface par un cluster et utilisant des méthodes de calcul hautement corrélées [1]. Cependant ce type d'approche ne permet pas d'obtenir une représentation globale de la surface d'énergie potentielle. Pour remédier à cela, nous avons utilisé le code VASP qui considère la périodicité du cristal et utilise la théorie de la fonctionnelle de la densité pour le calcul de structure électronique. Nous avons comparé les résultats obtenus avec différentes cellules unitaires et différentes fonctionnelles pour une approche où le dihydrogène est perpendiculaire à la surface. A partir des résultats expérimentaux [2], nous avons alors sélectionné pour la suite de notre étude une cellule unitaire composée de 36 atomes de cuivre formant 4 couches et la fonctionnelle vdW-DF2. Nous avons obtenu un potentiel d'interaction incluant 5 des 6 degrés de liberté du dihydrogène au-dessus de la surface. L'orientation la plus favorable correspond à la molécule de dihydrogène positionnée perpendiculairement à la surface au-dessus d'un atome de cuivre. Le rapport entre les énergies de physisorption perpendiculaire et parallèle à la surface est d'environ 1.15, ce qui peut être comparé au rapport des polarisabilités qui est de 1.30. De plus, en utilisant un potentiel moyenné à deux dimensions, nous avons étudié la spectroscopie du dihydrogène. Nous avons constaté que ce modèle simple est suffisant pour retrouver les résultats expérimentaux obtenus par Electron Energy Loss Spectroscopy [3].

: G. Cilpa and G. Chambaud, Surf. Sci, **601**, 320 (2007).

: S. Andersson, L. Wilzén and M. Persson, Phys. Rev. B, **38**, 2967 (1988).

:K. Svensson, J. Bellman, A. Hellman and S. Andersson, Phys. Rev B, **71**, 245402 (2005).

**Mots-Clés:** Physisorption, surface, spectroscopie rovibrationnelle

---

\*Intervenant