
Dynamique quantique de diffusion latérale d'hydrogène sur Pd(111)

Thiago Firmino*¹

¹Faculté de Chimie de l'Université de Strasbourg (LCQ) – université de Strasbourg – Laboratoire de Chimie Quantique - Institut de Chimie UMR 7177 UDS/CNRS 1, rue Blaise Pascal CS90032 67081 Strasbourg CEDEX, France

Résumé

Lors de l'étude de l'adsorption dissociative sur les surfaces métalliques il est intéressant de détailler comment les molécules diffusent sur les surfaces pour y réagir entre elles. Il n'y a pas beaucoup de techniques expérimentales capables de détailler le mécanisme de la diffusion latérale d'atomes ou de molécules sur une surface. Il n'y a pas beaucoup de techniques expérimentales capables de détailler le mécanisme de la diffusion latérale d'atomes ou de molécules sur une surface. Des études réalisées par spectroscopie Spin-Echo ³He [1] de la diffusion de CO sur Cu(001) ont montrés que selon les directions $\langle 110 \rangle$ et $\langle 100 \rangle$ il y a une dépendance oscillatoire de l'élargissement quasi-élastique du facteur de structure dynamique en fonction du transfert de quantité de mouvement. Cela a été modélisé par un mécanisme appelé diffusion par saut, qui relève de la mécanique classique. De ce modèle il a été conclut que la relation entre les énergies de barrières des sites "hollow" et "bridge" est environ 1. Cependant ce résultat n'est pas en accord avec les données actuelles disponibles à partir de calculs de structures électronique [2]. Nous voulons montrer qu'un traitement quantique de la diffusion pourra expliquer les données expérimentales et en même temps garder l'accord avec les calculs de structure électronique.

G. Alexandrowicz, A. P. Jardine, P. Fouquet, S. Dworski, W. Allison, and J. Ellis, Phys. Rev. Lett., 93, 156103 (2004).

R. Marquardt, F. Cuvelier, R. Olsen, E. Baerends, J. Tremblay, and P. Saalfrank, J. Chem. Phys., 132 (2010).

Mots-Clés: adsorption dissociative, diffusion quantique, MCTDH, états propres, Résonance de Fermi

*Intervenant