

# Dynamique quantique de diffusion latérale de H sur Pd (111)

T. FIRMINO, R. MARQUARDT

Laboratoire de Chimie Quantique - Institut de Chimie

UMR 7177 UDS/CNRS

1, Rue Blaise Pascal, 67081 Strasbourg, France

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. Des études réalisées par spectroscopie Spin-Echo  $^3\text{He}$  [1] de la diffusion de CO sur Cu(001) ont montrées 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 modélisée 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  $\frac{E_{\text{H}}}{E_{\text{B}}} \approx 1$ . 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. Dans ce travail, nous abordons pour ce faire, le cas H sur Pd (111) [3, 4]. On constate qu'après avoir ajouté l'énergie de vibration point zéro (EPZ) à la barrière électronique, la barrière effective augmente de  $3,2 \text{ kJ mol}^{-1}$  ( $\sim 256 \text{ hc cm}^{-1}$ ). Cela est déjà un phénomène quantique constaté dans ce travail.

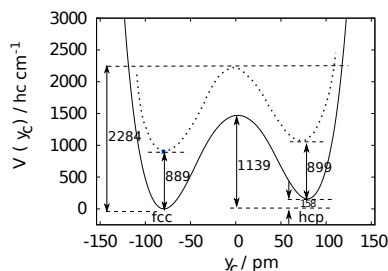


FIGURE 1 – Coupe unidimensionnelle de la surface d'énergie potentielle (SEP) le long de  $y_c$ , quand  $x_c$  vaut 137,5 pm. La courbe pointillée représente le premier canal adiabatique quand on ajoute l'EPZ des coordonnées autres que celle montrées.

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

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

[3] Y. Xiao, W. Dong, and H. Busnengo, J. Chem. Phys., **132** (2010).

[4] W. Dong and J. Hafner, Phys. Rev. B, **56**, 15396 (1997).