

Etude théorique de la dynamique d'abstraction de l'hydrogène sur des surfaces de tungstène

Rémi Pétuya^{1*}, Cédric Crespos¹, Pascal Larrégaray¹, Heriberto Fabio Busnengo² et Alejandra Martínez²

1. Institut des Sciences Moléculaires (ISM), Université de Bordeaux / CNRS, 351 cours de la libération, 33405 Talence cedex

2. Instituto de Fisica Rosario (IFIR) CONICET-UNR. Ocampo y Esmeralda (2000) Rosario, Argentina

* remipetuya@gmail.com

La compréhension intime des processus élémentaires hétérogènes tels que l'adsorption, la désorption ou encore la recombinaison est un thème majeur de la physico-chimie des surfaces. Ces dernières années, l'augmentation considérable de la puissance informatique a permis une description théorique toujours plus détaillée de la dynamique de ces actes chimiques à partir des principes fondamentaux de la physique (approches *ab initio*). En particulier, nous nous intéressons à la dynamique des collisions, réactives ou non, d'atomes et de molécules diatomiques avec des surfaces métalliques. Notre approche consiste à décrire, dans un premier temps, les interactions atome/molécule-surface par la construction de surfaces d'énergie potentielle globale reposant sur des calculs de structure électronique (ici théorie de la fonctionnelle densité, DFT) pour ensuite simuler le mouvement des atomes dans le formalisme classique. Cette démarche est ici utilisée pour rationaliser la réaction d'abstraction, par l'hydrogène atomique, d'atomes d'hydrogène chimisorbés sur les surfaces de tungstène — W(100) et W(110) —, systèmes chimiques pertinents pour la compréhension de l'interaction plasma/paroi dans les technologies de fusion thermonucléaire. Après avoir détaillé la réaction dite de « Eley-Rideal (ER) » — formation de H_2 par abstraction directe d'un adsorbat par un atome de la phase gazeuse —, nous nous pencherons sur les processus dits « d'atomes chauds » — recombinaison après diffusion hyperthermique sur la surface — pour lesquels la prise en compte de la couverture en atomes préalablement chimisorbés est nécessaire.

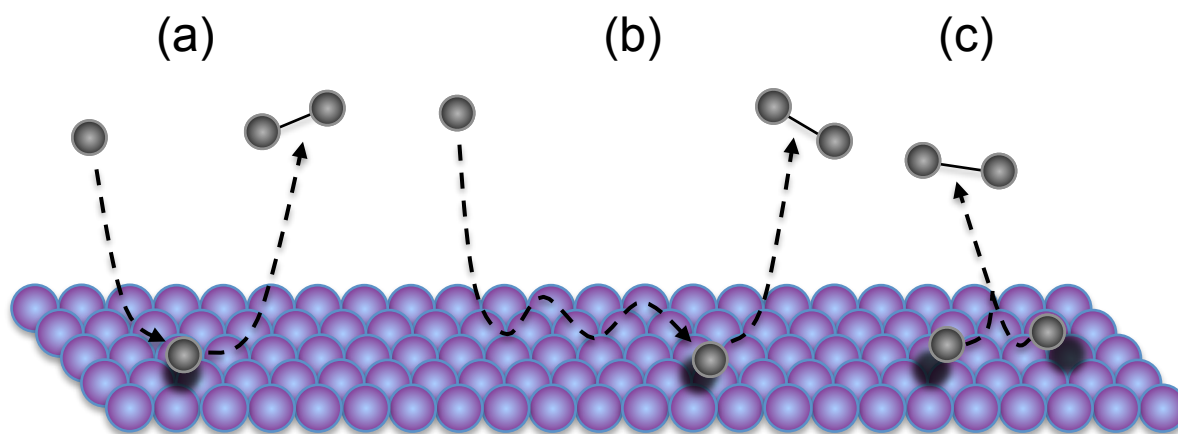


Fig. 1: Mécanismes de recombinaison moléculaire : (a) Recombinaison Eley-Rideal ; (b) Recombinaison d'atomes chaud ; (c) Recombinaison Langmuir-Hinshelwood