

## SEMINAIRE ISMO

### Relaxation vibrationnelle de la molécule de NO au voisinage d'une surface d'or: structure électronique et dynamique.

**Serge Monturet**

*Universität Potsdam, Institut für Chemie*

Nous examinons les limites de l'approximation de Born-Oppenheimer dans le cas de molécules diffusant sur des surfaces. Par exemple, une molécule de NO préparée dans un état vibrationnel très excité peut échanger de l'énergie avec les électrons d'un métal en créant des paires électron-trou [1]. La grande perte d'énergie observée, environ 1.5 eV soit 7 quanta de vibration, montre que près de la surface les effets non-adiabatiques sont importants et peuvent gouverner la dynamique du processus de diffusion. Pour étudier ce phénomène, nous avons calculé une surface de potentiel avec la théorie de la fonctionnelle de la densité, ainsi que des durées de vie vibrationnelles dépendantes de la distance molécule-surface [2]. Finalement, nous présentons les résultats d'une étude de dynamique nucléaire quantique capable de décrire la relaxation vibrationnelle. Nous avons choisi un modèle colinéaire simple pour simuler l'approche de la molécule de NO à la surface, en utilisant une méthode basée sur le formalisme de la matrice densité [3]. Un terme dissipatif est inclus dans le formalisme de Liouville-Von Neumann à l'aide d'opérateurs de Lindblad [4].

[1] N. H. Nahler et al, Science, 321, 1191 (2008); J. D. White et al. Nature, 433, 503 (2005); H. Huang et al. Science, 290, 111 (2000)

[2] N. Lorente, M. Persson, Faraday Discuss. 117, 277 (2000)

[3] P. Saalfrank, R. Kosloff, J. Chem. Phys. 105, 2441 (1996)

[4] P. Saalfrank, Chem. Rev. 106, 4116 (2006)

\* \* \* \* \*

**Mardi 4 mai 2010 à 11 h 00**  
**Bibliothèque du Bât 351 - 2<sup>e</sup> étage**  
**Université Paris-Sud 91405 ORSAY Cedex**