

SEMINAIRE ISMO

Sabine Morisset

Laboratoire de Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires (PIIM)

Université de Provence - Marseille

Etude du collage d'un atome d'hydrogène sur une surface de graphène

Les mécanismes de collage d'atomes d'hydrogène sur des solides graphitiques jouent un rôle clé dans deux principaux domaines **i)** la compréhension de la présence de fortes concentrations de molécules H_2 dans le milieu interstellaire, encore largement inexplicée, **ii)** dans les réacteurs de fusion thermonucléaire (tokamaks), la détérioration des parois graphitiques induite par l'interaction de flux d'isotopes de H confinés magnétiquement, et pouvant engendrer une rétention des atomes H, D ou T. Ces effets peuvent poser de sérieux problèmes de sécurité dans le cadre du projet ITER.

Dans le milieu interstellaire, il a été montré que la formation de H_2 suivant un mécanisme Eley-Rideal requiert qu'un atome H soit initialement chimisorbé (=collé) sur la surface de graphite. L'étude du collage d'un atome avec une surface nécessite la prise en compte des modes de vibrations de la surface (phonons) dans la dynamique. Pour cela, il est nécessaire, dans un premier temps, de calculer les couplages entre le mouvement de l'atome et le bain de phonon.

Nous présenterons un modèle pour extraire le couplage entre le mouvement de l'atome et le bain de phonons. Ce couplage est calculé à l'aide de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité. Les calculs de dynamique sont effectués par une méthode mixte classique-quantique : le mouvement de l'H par rapport à la surface est traité de façon quantique tandis que les modes de vibrations de la surface sont traités de façon classique. La probabilité de collage peut ainsi être calculée. Elle décroît avec l'augmentation de la température de la surface. La contribution des bandes de phonon dans l'échange d'énergie entre H et la surface est analysée afin de comprendre le mécanisme de collision. Les résultats seront comparés aux autres travaux théoriques et expérimentaux.

* * * * *

Mardi 14 septembre à 11 h 00

Bât 210 - 2^{ème} étage - Amphi I
Université Paris-Sud 91405 ORSAY Cedex