



SEMINAIRE ISMO

Sven Nave

ISMO (Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay), Orsay

Dissociation du méthane sur Ni(111) et Pt(111): Effets de la relaxation de la surface sur la réactivité

La chimisorption dissociative du méthane sur des surfaces métalliques est l'une des réactions les plus étudiées dans le domaine de la physico-chimie des surfaces, principalement à cause de son intérêt industriel. Dans la plupart des expériences de jets moléculaires, les probabilités de dissociation du méthane ont été mesurées en fonction de l'énergie de collision et de la température de la surface. Ces expériences ont été réalisées pour plusieurs surfaces métalliques, en particulier pour Ni(111) et Pt(111).

Lors de ce séminaire, je présenterai les travaux que j'ai effectués durant mon post-doc à l'université du Massachusetts. J'ai tout d'abord réalisé des calculs de structures électroniques (méthode DFT), dans le but de modéliser plusieurs surfaces d'énergie potentielle. J'ai ensuite appliqué des méthodes de paquets d'ondes quantiques afin d'étudier les effets de la relaxation de la surface ainsi que de la température, sur la dissociation du méthane. J'ai également mis en œuvre des méthodes mixtes quantique-classique, préservant les effets tunnels importants le long des variables rovibrationnelles. L'objectif est double, d'une part améliorer l'interprétation des mécanismes collisionnels, et d'autre part valider ces approches mixtes dans le but de les appliquer à d'autres systèmes ou de pouvoir augmenter le nombre de degrés de liberté du méthane. Notre modèle présente un accord raisonnable avec les expériences pour Ni(111), mais sous-estime la réactivité pour Pt(111) ainsi que la différence de réactivité observée entre Ni(111) et Pt(111).

Mardi 17 mai 2011 à 11 h 00

Bât 351 (2^{ème} étage)

Université Paris-Sud 91405 ORSAY Cedex