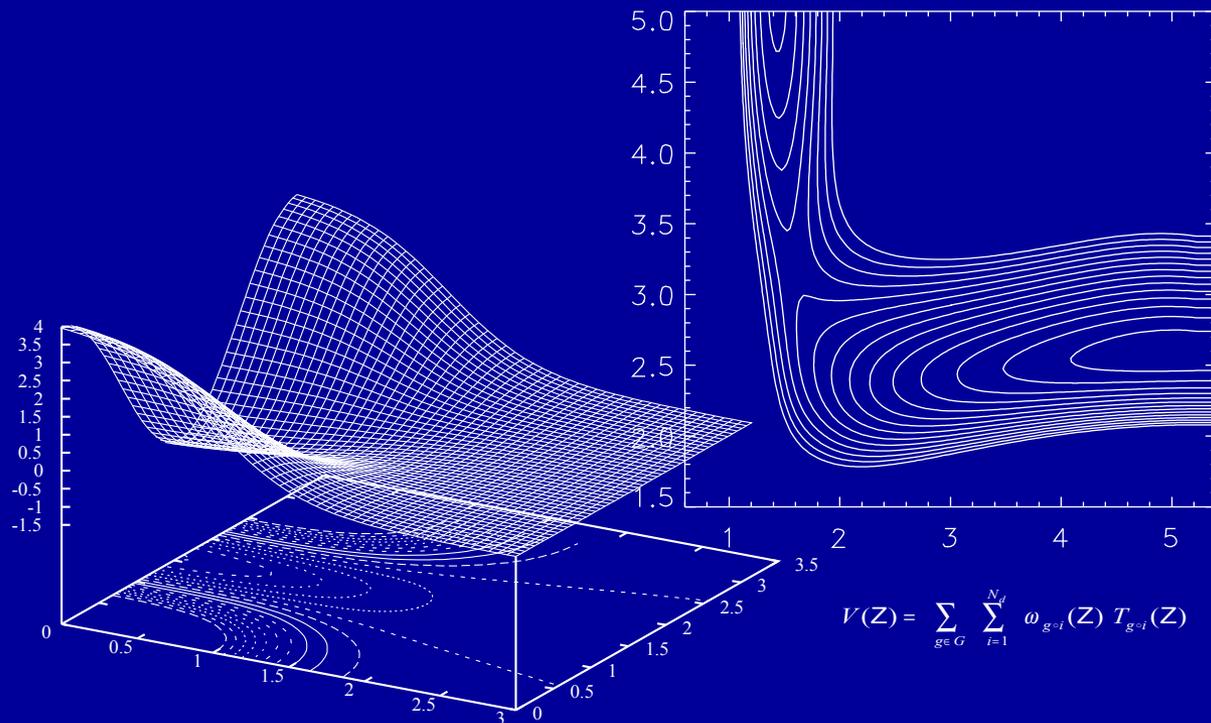


# Construction de surfaces d'énergie potentielle (PES) pour la dynamique des réactions gaz/surface

GDR collaboration : Wei Dong ( ENS Lyon ), Ludovic Martin, Pascal Larregaray, Jean-Claude Rayez, Cédric Crespos ( ISM Bordeaux )



$$V(\mathbf{Z}) = \sum_{g \in G} \sum_{i=1}^{N_g} \omega_{g \rightarrow i}(\mathbf{Z}) T_{g \rightarrow i}(\mathbf{Z})$$

La Londe les Maures, 4-7 mai 2009

## Collaboration

- Dynamique des réactions gaz/surface → construction de SEP multidimensionnelles incluant le mouvement des atomes de surface

```
graph TD; A[• Dynamique des réactions gaz/surface → construction de SEP multidimensionnelles incluant le mouvement des atomes de surface] --- B[- influence de la température  
- dissipation de l'énergie]; A --- C[- reconstructions de surface  
- effets de relaxation locale];
```

- influence de la température  
- dissipation de l'énergie

- reconstructions de surface  
- effets de relaxation locale

Problème : les méthodes usuelles sont basées sur l'interpolation de calculs DFT pour des surfaces cristallines infinies → calculs périodiques utilisant la symétrie de la surface rigide (= tous les atomes de la surface sont figés dans leur position d'équilibre).

- Deux pistes poursuivies → sur les deux sites Lyon et Bordeaux

Champs de force réactifs  
(BEBO, ReaxFF,...)

Caractéristique: SEP construite à partir de potentiels de paire qui incluent des termes à N corps.

Avantage 1: on peut aisément introduire le mouvement des atomes de surface.

Avantage 2: étudier l'effet d'atomes préadsorbés sur la réactivité.

Etat: en développement ...

Modèles analytiques de type  
LEPS périodique

Caractéristique: modèle analytique construit sur le modèle LEPS = Flexible Periodic LEPS (FPLEPS).

Avantage 1: SEP globale utilisable pour traiter un grand nombre de réactions élémentaires sur un système donné.

Avantage 2: on peut introduire le mouvement des atomes de surface.

Etat: 1 publication acceptée + 2 publications soumises