

Réactivité élémentaire gaz/solide à l'échelle moléculaire

C. Crespos, P. Larregaray, L. Martin, E.Q. Sanchez, J.C. Rayez

*Institut des Sciences Moléculaires (ISM), Université Bordeaux I, CNRS,
351 cours de la libération, 33405 Talence Cedex*

L'étude de la dynamique des réactions élémentaires à l'interface gaz/solide fournit un éclairage qui se veut interprétatif et prédictif sur de nombreux domaines de la physique et de la chimie. De telles études s'adressent traditionnellement au domaine de la catalyse hétérogène, mais également à ceux de la chimie en milieu atmosphérique et en milieu interstellaire. Plus récemment des démarches visant à explorer la réactivité au niveau moléculaire ont été développées dans le cadre d'études plus spécialisées comme le stockage de l'hydrogène (matériaux pour piles à combustibles), la détermination des flux de chaleur reçus par les boucliers thermiques des véhicules spatiaux lors d'une rentrée atmosphérique, ou encore l'analyse des effets d'exposition des parois de Tokamak à un plasma d'hydrogène, etc... La liste des applications est longue.

Après un bref rappel du contexte expérimental et théorique, notre discussion s'orientera sur les différentes possibilités de simulation de la dynamique des processus élémentaires gaz/surface qui s'offrent à nous sur le plan théorique. Nous tâcherons d'en définir les limites et les vertus. Dans une troisième partie du propos nous verrons comment il est possible d'utiliser l'information « moléculaire » pour remonter à des observables plus macroscopiques. Nous prendrons l'exemple du calcul du flux de chaleur perçu par un véhicule spatial lors d'une rentrée en atmosphère terrestre, soumis à un plasma d'atomes d'azote et d'oxygène.