

Simulations de spectres XPS pour une meilleure connaissance des surfaces désordonnées

T. DUGUET, G. DAKROUB, V. ROUESSAC, S. ROUALDES, C. LACAZE-DUFAURE.

¹ CIRIMAT, CNRS-INPT-UPS, Toulouse, France

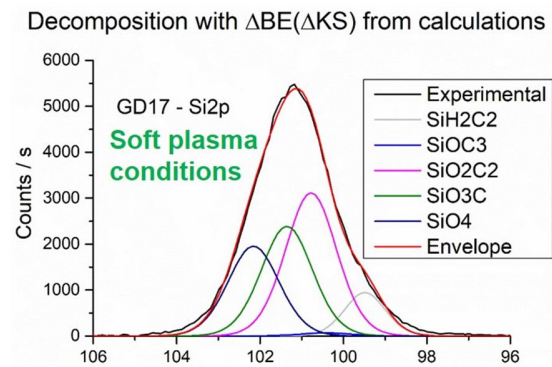
² IEM, Université de Montpellier, ENSCM, CNRS, Montpellier, France.

Contact : thomas.duguet@ensiacet.fr

Prix Poster Prix Oral

Résumé (< 200 mots, 1 Figure ou < 350 mots sans Figure):

Notre groupe a développé, avec des partenaires industriels, des procédés de dépôt par voie chimique (CVD) visant à métalliser des pièces de satellites en composite à matrice polymère. Nous avons constaté que les connaissances de ces surfaces désordonnées étaient trop empiriques et qu'il était nécessaire de modéliser leur structure et leur réactivité. On montrera ici quel peut être l'apport des calculs d'adsorption d'atomes métalliques, ainsi que des simulations des spectres XPS C1s et O1s associés. Dans un deuxième volet, une méthodologie similaire permettra de mieux définir la composition de revêtements organosiliciés hybrides dédiés à la détection des gaz BTEX, en proposant une décomposition mieux maîtrisée des spectres XPS Si2p.



Abstract (5 lines max, justified, in english):

We develop chemical vapour deposition processes for the metallization of polymeric space components, for which the knowledge of the surface is very limited. We will show how DFT calculations can help in defining nucleation and growth processes, by mapping the adsorption energy of metal atoms over the polymer surface, and by simulating the XPS C1s and O1s spectra. As an extension of this methodology, we will also show the benefits of XPS Si2p simulations to the understanding of organosilicons membranes surface.
