



CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Artículo original de investigación

Mecanismos de redistribución de energía en la dispersión de átomos de hidrógeno en superficies de tungsteno

Raidel Martín-Barrios ¹ <https://orcid.org/0009-0001-9582-2650>

Llinersy Uranga-Piña ¹ <https://orcid.org/0000-0001-5837-7204>

Aliezer Martínez-Mesa ^{1*} <https://orcid.org/0000-0002-0443-6106>

Pascal Larrégaray ² <https://orcid.org/0000-0002-1643-3164>

¹ Universidad de la Habana. La Habana, Cuba

² Universidad de Burdeos. Burdeos, Francia

* Autor para la correspondencia: aliezer@fisica.uh.cu

Editor

Lisset González Navarro
Academia de Ciencias de Cuba.
La Habana, Cuba

Traductor

Darwin A. Arduengo García
Academia de Ciencias de Cuba.
La Habana, Cuba

RESUMEN

Introducción: Se estudió la colisión y difusión de átomos de hidrógeno sobre superficies metálicas, con énfasis en materiales con aplicaciones potenciales en el diseño de componentes de los futuros reactores de fusión nuclear. **Objetivos:** Evaluar la influencia de la estructura de la superficie metálica y del grado de recubrimiento sobre la probabilidad de dispersión y la transferencia de energía durante la interacción gas-superficie. **Métodos:** De dinámica molecular con fricción electrónica. Las interacciones hidrógeno-sustrato y la densidad electrónica de la superficie se calcularon utilizando la teoría del funcional de la densidad. La posible formación de estados resonantes se describió empleando la representación de trayectorias cuánticas interactuantes. **Resultados:** Los resultados de las simulaciones reproducen las tendencias observadas en los espectros experimentales de pérdidas de energía de traslación del gas de hidrógeno incidiendo sobre superficies de tungsteno. Adicionalmente, permitieron cuantificar la influencia del recubrimiento, las interacciones hidrógeno-sustrato y la estructura de la superficie sobre la forma del espectro. **Conclusiones:** Las simulaciones realizadas proporcionan una comprensión más profunda de fenómenos que determinan, a escala microscópica, la eficiencia de la transferencia de energía durante colisiones de átomos de hidrógeno con superficies de tungsteno y su dependencia con respecto a la geometría de la superficie. La versatilidad de algunos de los métodos desarrollados permitió aplicarlos también a procesos difusivos de distinta naturaleza (por ejemplo, redes ópticas, procesos costeros).

Palabras clave: dinámica molecular; dispersión de átomos en superficies; ecuación de Langevin; método de trayectorias cuánticas; método de Lattice Boltzmann

Mechanisms of energy redistribution in the scattering of hydrogen atoms off tungsten surfaces

ABSTRACT

Introduction: It was studied the collision and diffusion of hydrogen atoms on metallic surfaces, focusing on materials with potential applications in the design of components for future nuclear fusion reactors. **Objectives:** To evaluate the influence of the structure and coverage of the metallic surface structure on the scattering probability and energy transfer during gas-surface interaction. **Methods:** It was performed molecular dynamics with electronic friction simulations. They are calculated the hydrogen-substrate interactions and the surface electron density using density functional theory. It is described the possible formation of resonant states within the Interacting Quantum Trajectories representation. **Results:** The results of the simulations reproduce the trends observed in experimental spectra of translational energy losses of hydrogen gas impinging on tungsten surfaces. Additionally, the simulations allowed to quantify the influence of surface coverage, hydrogen-substrate interactions and the surface structure on the shape of the energy loss spectra. **Conclusions:** The simulations performed provide a deeper understanding of phenomena that determine, on a microscopic scale, the efficiency of energy transfer during collisions of hydrogen atoms with tungsten surfaces, and their dependence on the surface geometry. The versatility of some of the developed methods made it possible to apply them also to diffusive processes of different nature (e.g., optical lattices, coastal processes).

Keywords: molecular dynamics; scattering of atoms off surfaces; Langevin equation; quantum trajectory method; Lattice Boltzmann method

INTRODUCCIÓN

El estudio de procesos físico-químicos que ocurren sobre sustratos sólidos es un tema de gran interés en la actualidad, debido fundamentalmente a su relevancia en procesos tecnológicos como la catálisis heterogénea, la pasivación de superficies, el almacenamiento de hidrógeno, la corrosión, la cromatografía, entre otros. ⁽¹⁾ El conocimiento detallado de los mecanismos microscópicos subyacentes en las reacciones moleculares que ocurren sobre las superficies es un requisito previo para mejorar la eficiencia de las aplicaciones asociadas. A pesar del considerable esfuerzo dedicado a la caracterización de las interacciones molécula-superficie y de los mecanismos de redistribución de la energía en la interfase gas-sólido, la elucidación de la influencia de estos factores en los pasos elementales de procesos como la adsorción, la difusión, la ruptura y formación de enlaces y la desorción, sigue planteando importantes retos a la ciencia de superficies moderna. ⁽²⁾

En particular las reacciones heterogéneas en las que interviene el hidrógeno constituyen el núcleo de varias tecnologías clave para la explotación a gran escala de las fuentes de energía renovables. ⁽³⁾ Por ejemplo, estas reacciones intervienen en la producción y almacenamiento de hidrógeno, el di-

seño de contenedores de plasma de hidrógeno en los futuros reactores de fusión nuclear y fenómenos naturales como la formación de hidrógeno molecular en el espacio interestelar.

El progreso alcanzado por los métodos experimentales y teórico-computacionales a lo largo del último medio siglo ha permitido un avance significativo del conocimiento a nivel molecular de los procesos que ocurren sobre superficies. Por un lado, el advenimiento y la progresión continua de una variedad de técnicas experimentales han proporcionado acceso a una gran cantidad de información microscópica sobre procesos en superficies con una precisión sin precedentes. Por otro lado, las simulaciones computacionales que utilizan los métodos de dinámica molecular y Monte Carlo han evolucionado hasta convertirse en potentes herramientas para racionalizar los datos experimentales y predecir las propiedades físico-químicas y las velocidades de reacción de los fenómenos fluido-superficie, a veces más allá de las resoluciones espaciales, temporales y energéticas accesibles experimentalmente. Sin embargo, persiste la necesidad de perfeccionar las herramientas computacionales disponibles en la actualidad para extender su aplicabilidad al estudio de una variedad mayor de fenómenos. Por ejemplo, los métodos teórico-com-

putacionales desarrollados antes de los trabajos que conforman la presente propuesta, no lograban describir regímenes extremos (para las partículas incidentes) como el balístico o el régimen de muy bajas temperaturas.

En este trabajo se investigan, mediante simulaciones con dinámica molecular con fricción electrónica, los mecanismos microscópicos que determinan las pérdidas de energía durante las colisiones de átomos de hidrógeno sobre superficies metálicas, en especial de tungsteno, obteniéndose resultados en excelente correspondencia con los resultados experimentales disponibles. ^(4,5,6,7) También se estudia la dependencia de los espectros de pérdidas de energía con respecto a la densidad del recubrimiento, de la geometría de la superficie, además de realizar un estudio comparativo de 2 modelos distintos para describir la interacción hidrógeno-sustrato. Se desarrollan nuevos modelos teóricos y computacionales que permiten extender el análisis en varias direcciones: la manifestación de efectos cuánticos a bajas temperaturas (por ejemplo, la presencia de resonancias de larga duración), el papel de las interacciones hidrógeno-hidrógeno para altos valores del recubrimiento, la posibilidad de emplear un campo electromagnético de baja intensidad para controlar la difusión sobre la superficie. ^(8,9,10) La versatilidad de algunos de los métodos desarrollados permitió aplicarlos a sistemas fluido-superficie de diferente naturaleza, que van desde redes ópticas hasta la dinámica de aguas costeras. ^(9,10)

MÉTODOS

Se realizó un estudio cuantitativo de la dispersión de átomos de H sobre superficies de tungsteno, a través de simulaciones computacionales empleando el método de dinámica molecular clásica. Las simulaciones se realizaron en las sedes y empleando los recursos informáticos de los grupos de investigación de física molecular y físico-química de la Universidad de la Habana y de la Universidad de Burdeos, en el período 2018-2022.

Con el objetivo de reproducir las condiciones en las que se realizan los experimentos sobre este fenómeno, las simulaciones se realizan en el ensemble canónico o NVT, donde el número de partículas (N), el volumen (V) y la temperatura (T) se mantienen constantes. Las ecuaciones de movimiento de Langevin se resuelven numéricamente para el átomo incidente y para los átomos de H adsorbidos sobre la superficie, utilizando el algoritmo de integración de Beeman. ⁽¹⁾

Los 2 canales principales de disipación de energía en los sistemas gas-metal son las excitaciones de pares electrón-hueco y de fonones. ^(11,12) En los sistemas en los que existe una gran diferencia entre las masas de los átomos del gas y los de la superficie metálica, como es el caso de la interacción del hidrógeno con superficies de tungsteno, la transferencia

de energía hacia los fonones suele ser despreciable. En este trabajo, la descripción de estos mecanismos de intercambio de energía entre los átomos del gas y el sólido se realiza dentro del marco de los modelos conocidos como aproximación de la densidad local para la fricción (LDFA, por sus siglas en inglés), para las excitaciones electrónicas, y el oscilador de Langevin Generalizado (GLO, por sus siglas en inglés), para las excitaciones de fonones.

Dentro de la LDFA, las pérdidas de energía como consecuencia de la excitación de pares electrón-hueco en el metal se simulan a través de fuerzas de fricción. El coeficiente de fricción se toma igual al que experimentaría el átomo al moverse dentro de un gas de electrones libres cuya densidad es igual a la densidad electrónica del metal en la posición instantánea del proyectil. Tanto las interacciones hidrógeno-superficie como la densidad electrónica de la superficie limpia se calcula utilizando la teoría del funcional de la densidad. ⁽¹⁾ La densidad de electrones así calculada se utiliza también para evaluar el coeficiente de fricción en presencia de adsorbatos. Aunque la adsorción de átomos en la superficie modifica la densidad electrónica del sistema, la gran disparidad entre el átomo de hidrógeno (que posee un electrón) y el tungsteno (que posee 74) provoca que estos cambios sean despreciables. En el modelo GLO se considera el intercambio de energía entre el átomo incidente y un pequeño número de átomos de la superficie que interactúan directamente con el proyectil. Se considera el movimiento colectivo de este conjunto de átomos de W, sin que cambie su posición relativa.

En las simulaciones se emplea una supercelda rectangular que contiene 6×6 réplicas de la celda unidad de dimensiones $(a \times \sqrt{2}a)$ y a la que se imponen condiciones de contorno periódicas para imitar una superficie infinita. El origen del sistema de coordenadas se ubica en uno de los átomos de tungsteno y los ejes X, Y, Z se dirigen a lo largo de los ejes cristalográficos [001], $[1\bar{1}0]$, [110] (para el caso de $[W110]0$), [110] (para el caso de $W[110]$) y [010], [001], [100] (para el caso de $W[100]$). Para garantizar la convergencia numérica de los resultados, se propagan más de 2×10^6 trayectorias con una energía cinética inicial de 2,76 eV. La velocidad inicial de los proyectiles forma un ángulo de 45° con respecto a la dirección normal a la superficie, la altitud inicial es de 7 Å y los valores iniciales de las coordenadas X, Y se generan aleatoriamente (con distribución uniforme) dentro de la celda unidad irreducible de la superficie. Las condiciones iniciales de los adsorbatos incluyen su energía de punto cero, empleando un modelo semiclásico. ⁽¹³⁾

La interacción del proyectil con una superficie de tungsteno limpia o con átomos de H adsorbidos en ella, puede desencadenar varios procesos que conducen a distintos canales

de salida (absorción, reflexión, adsorción, abstracción) y que se identifican a partir de la posición final del átomo incidente. Las densidades de adsorbatos se expresan en unidades de monocapa (mL), por ejemplo, un valor de recubrimiento $\theta = 0,5$ mL indica que la mitad de los sitios de adsorción principales sobre la superficie están ocupados por átomos de H. Para el cálculo de los observables se analizan por separado los átomos dispersados la dirección especular y en todas las direcciones del espacio. Finalmente, para el cálculo de la función de distribución en el espacio de fases, se resuelven las ecuaciones del método de Lattice Boltzmann empleando el modelo D2Q9.⁽⁹⁾

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los resultados de las simulaciones realizadas indican que la dinámica de la dispersión de H en superficies de W(110) es sensible a la inclusión de la fuerza aleatoria en las ecuaciones de Langevin. A pesar de que la energía cinética inicial de la partícula incidente es mucho mayor que la energía térmica y de que el tiempo medio de colisión es de aproximadamente 25 fs, la distribución de pérdidas de energía (calculada en las simulaciones de dinámica molecular con fricción electrónica) no reproduce los resultados experimentales si no se incluye la fuerza aleatoria. La desviación entre las distribuciones de pérdidas de energía calculada y medida en el experimento es más marcada si no se incluye movimiento relativo de los átomos del sólido al modelar las vibraciones de la red.

Las simulaciones proporcionan también una descripción de los mecanismos microscópicos que determinan las pérdidas de energía de los átomos dispersados. Por ejemplo, al considerar la reflexión de átomos de H en todas las direcciones después de chocar con la superficie W(110), encontramos que la probabilidad de dispersión disminuye con el aumento del recubrimiento. La pérdida de energía promedio de los átomos dispersados aumenta monótonamente con el recubrimiento. Sin embargo, cuando sólo se considera la reflexión especular, se observa el efecto contrario, es decir, la pérdida promedio de energía promedio disminuye al aumentar el recubrimiento.

Por un lado, sobre una superficie limpia (recubrimiento igual a 0 mL), los átomos son dispersados en la dirección especular como consecuencia de la colisión con sitios Hollow y Bridge. Durante estos eventos, el proyectil penetra una distancia considerable en el material antes de reflejarse. Como resultado del mayor tiempo de interacción y el paso por regiones donde la densidad electrónica es alta, durante este proceso hay una mayor probabilidad de excitación de pares electrón-hueco y estos eventos se caracterizan por pérdidas importantes de energía.

Por otra parte, para $\theta = 0,75$ mL, los átomos son dispersados en la dirección especular principalmente después de colisiones directas con los átomos de tungsteno de la superficie. Durante estas colisiones se producen pérdidas mínimas de energía, ya que los átomos de H incidentes rebotan relativamente lejos de la superficie (por encima de $0,8 \text{ \AA}$ sobre la capa de átomos de W más externa), por lo que se generan pocos pares electrón-hueco en el metal. Por el contrario, los átomos que rebotan cerca de los sitios Bridge y Hollow interactúan fuertemente con los adsorbatos y, por lo tanto, se desvían de la dirección especular o se adsorben en la superficie.

La probabilidad de dispersión del átomo de H incidente sobre la superficie W(110) decrece al aumentar el recubrimiento. El 69 % de las trayectorias contribuye a este canal de salida en el caso de superficies limpias ($\theta = 0$ mL). Esta cantidad decrece a 58 % para $\theta = 0,25$ mL y 38 % para $\theta = 0,75$ mL. Adicionalmente, se observa que la probabilidad de reflexión especular sobre una superficie de W(110) con un recubrimiento $\theta = 0,75$ mL es mayor que sobre la superficie limpia. Este comportamiento se debe a los cambios topológicos que experimenta la superficie de energía potencial al poblar la superficie con átomos de H. El recubrimiento disminuye la rugosidad presente en la superficie limpia, lo cual incrementa la probabilidad de dispersión en la dirección especular (figura 1).

El análisis de las pérdidas de energía durante la dispersión de átomos de H sobre una superficie W(100) permitió evaluar el efecto de la modificación de la simetría de ésta sobre el proceso de transferencia de energía desde la partícula incidente hacia el sólido. Los resultados de las simulaciones confirman el aumento de las pérdidas de energía a medida que se incrementa el recubrimiento, con excepción del caso $\theta = 2,0$ mL. Para estos casos la pérdida promedio de energía por la partícula incidente es menor que para el caso $\theta = 1,0$ mL. Esto se debe a que, para este valor del recubrimiento, los átomos que sufren mayores pérdidas de energía quedan atrapados en otros procesos (son removidos del canal de dispersión).

La probabilidad de dispersión del átomo de H incidente, sobre la superficie W(100) decrece al aumentar el recubrimiento. En general, el 66 % de las trayectorias contribuye a este canal de salida en el caso de superficies limpias ($\theta = 0$ mL). Esta cantidad decrece a 51 % para $\theta = 1,0$ mL y 37 % para $\theta = 2,0$ mL. En el caso de la reflexión especular, la probabilidad de dispersión varía de la forma siguiente: 0,74 % ($\theta = 0$ mL); 0,823 % ($\theta = 1,0$ mL), 1,1 % ($\theta = 2,0$ mL).

La dispersión sobre la superficie W (100), a diferencia de lo que ocurre en el caso de la superficie W (110), se caracteriza porque tanto para el caso de la reflexión especular como cuando se tiene en cuenta de todos los eventos de dispersión, la contribución de los sitios Hollow y Bridge a la distribución

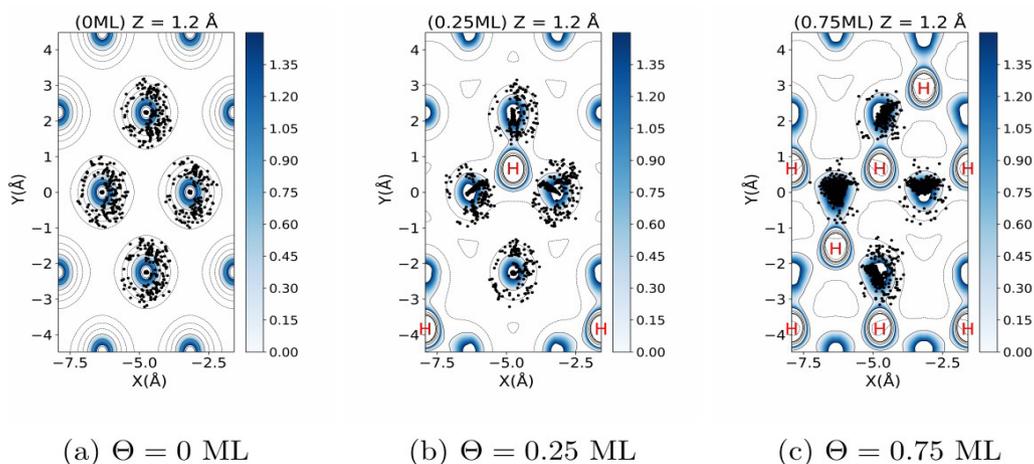


Fig. 1. Cortes de la superficie de energía potencial en el plano $Z=1,2 \text{ \AA}$, para diferentes valores de recubrimiento $\Theta = 0; 0,25 \text{ mL}$ y $0,75 \text{ mL}$. Los puntos negros indican la posición (X, Y) del primer rebote para los átomos dispersados en la dirección especular después de chocar directamente con átomos de la superficie. Las H rojas indica la posición de equilibrio de los adsorbatos sobre la superficie

de pérdidas de energía es muy baja en comparación con el resto de las contribuciones.

En general, la dependencia del recubrimiento de la reflexión total y especular sobre ambas superficies, W (110) y W (100), presenta un comportamiento similar. Como promedio, las pérdidas de energía en el caso especular son menores, mientras que la probabilidad de reflexión especular aumenta, para valores altos del recubrimiento. Este efecto es particularmente interesante, debido a que las técnicas experimentales disponibles actualmente para el estudio de estos fenómenos suelen registrar la dispersión en un plano determinado y no en todo el espacio. También se observa un corrimiento hacia valores más altos de energía de los picos de cada una las contribuciones al espectro de pérdidas de energía, debidas a las dispersiones sobre los átomos de tungsteno de la primera y segunda capas, y en los sitios Hollow y Bridge. La contribución de estos sitios (Hollow y Bridge) al espectro de pérdidas de energía en el caso de la dispersión de H sobre superficies W (100) es menor que para la superficie W(110). Esto es una consecuencia directa del corte de superficie escogido y, por lo tanto, de la distribución de los átomos de la superficie.

Conclusiones

Se realizó un estudio teórico detallado sobre la dispersión de átomos de H sobre superficies de tungsteno. El intercambio energético del átomo incidente con la superficie se describió utilizando el método de dinámica molecular con fricción electrónica, reproduciendo las condiciones de experimentos recientes.⁽¹¹⁾ En este trabajo se describe, por primera vez, la

influencia del recubrimiento de la superficie sobre la dispersión de átomos en metales.

Las distribuciones de pérdidas de energía, a temperatura ambiente, en los sistemas H/W (110) y H/W (100) reproducen las tendencias generales de los resultados teóricos y experimentales reportados recientemente. Para una temperatura de la superficie de 70 K, aparece una estructura de picos cuasi periódicos, bien definidos, en esta distribución.

Se estableció la importancia de la fuerza aleatoria en la determinación de la distribución de pérdidas de energía durante la dispersión de H sobre superficies de tungsteno. Esta predicción fue corroborada mediante un modelo analítico como un proceso de Ornstein-Uhlenbeck, válido para energías de colisión altas y tiempos de interacción cortos. Estas condiciones se satisfacen habitualmente en los procesos de dispersión en superficies.^(1,11)

La presencia de adsorbatos en la superficie modifica la forma de la superficie de energía potencial, que a su vez afecta notablemente la dinámica de dispersión. Por ejemplo, la probabilidad de reflexión total decae a medida que se incrementa el recubrimiento y el promedio de la energía perdida aumenta.

La probabilidad de reflexión especular también aumenta y la energía perdida como promedio disminuye, como consecuencia de la incorporación de un nuevo canal de disipación. Este descubrimiento puede ser explicado por los cambios que provocan los adsorbatos en la superficie de energía potencial. Se demostró que, a pesar de que el comportamiento general es similar, la modificación de la geometría de la superficie provoca cambios significativos en la dinámica de dispersión.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Martín-Barrios R. Dispersión de hidrógeno en superficies metálicas: H/(H+W (110)) y H/(H+W[100]) [Tesis de Doctorado]. Universidad de la Habana; 2023.
2. Díez Muiño R, Busnengo, editors. H. Dynamics of Gas-Surface Interactions: Atomic-level Understanding of Scattering Processes at Surfaces. Springer Series in Surface Sciences: Springer Berlin Heidelberg; 2013. 428 p.
3. Usman MR. Hydrogen storage methods: Review and current status. *Renew Sustain Energy Rev.* 2022;167:112743
4. Martín Barrios R, Galparsoro O, Martínez-Mesa A, Uranga-Piña L, Crespos C, Larregaray P. Inelastic scattering of hydrogen atoms off pristine and hydrogen-covered W(100) surfaces. *Eur Phys J Spec Top.* 2023;232:1985-93.
5. Martín-Barrios R, Hertl N, Galparsoro O, Kandratsenka A, Wodtke AM, Larrégaray. H atom scattering from W (110): A benchmark for molecular dynamics with electronic friction. *P Phys Chem Chem Phys.* 2022;24(35):20813-9.
6. Hertl N, Martín-Barrios R, Galparsoro O, Larrégaray P, Auerbach DJ, Schwarzer D, Wodtke AM, Kandratsenka A. Random Force in Molecular Dynamics with Electronic Friction. *J Phys Chem C.* 2021;125:14468-73.
7. Martín-Barrios R, Galparsoro O, Martínez-Mesa A, Uranga-Piña L, Crespos C, Larregaray P. Translational Inelasticity of Hydrogen Atoms Scattering off Hydrogen-Covered W (110) Surfaces. *J Phys Chem C.* 2021;125(25):14075-81.
8. Cruz-Rodríguez L, Uranga-Piña L, Martínez-Mesa A, Meier C. Interacting trajectory representation of quantum dynamics: influence of boundary conditions on the tunneling decay of resonant states. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2023;56(3):035101.
9. Martín-Barrios R, Martínez-Mesa A, Uranga-Piña L. Lattice-boltzmann study of the wind-driven dynamics of shallow sea water. *Rev Cub Fis.* 2018;35(1):E4-E7.
10. Torres-Miyares EE, Cruz-Rodríguez L, Uranga-Piña L, Martínez-Mesa A. Stochastic model of molecular diffusion in optical lattices. *Rev Cub Fis.* 2018;35(2):82-5
11. Bunermann O, Jiang H, Dorenkamp Y, Kandratsenka A, Janke SM, Auerbach DJ, Wodtke AM. *Science.* 2015;350(6266):1346-8.
12. Woodruff DP, Robinson J. Some structural issues in surface alloys and alloy surfaces: rumpling, stacking faults and disorder. *Appl Surf Sci.* 2003;219(1):1-10.
13. Persson M, Jackson B. Flat surface study of the Eley-Rideal dynamics of recombinative desorption of hydrogen on a metal surface. *J Chem Phys.* 1995;102(2):1078-93.

Recibido: 02/10/2024

Aprobado: 8/01/2025

Agradecimientos

Los autores agradecen el uso del cluster de computadoras del Instituto de Ciencias Moleculares de la Universidad de Burdeos.

Conflictos de intereses

Los autores declaran que no existen conflictos de intereses en relación con la investigación reportada en este artículo.

Contribuciones de los autores

- Conceptualización: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, P. Larregaray
- Curación de datos: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa
- Análisis formal: R. Martín Barrios
- Adquisición de fondos: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, P. Larregaray
- Investigación: R. Martín Barrios, L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, P. Larregaray
- Metodologías: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, P. Larregaray
- Administración de proyecto: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, P. Larregaray
- **Software:** R. Martín Barrios, P. Larregaray
- Supervisión: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, P. Larregaray
- Validación: R. Martín Barrios
- Visualización: R. Martín Barrios, P. Larregaray
- Redacción-borrador original: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, P. Larregaray
- Redacción-revisión y edición: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, P. Larregaray

Financiamientos

Esta investigación fue financiada parcialmente por la Embajada de Francia en Cuba, la Universidad de Burdeos, el CNRS, el programa Erasmus Mundus y el Laboratorio conjunto transfronterizo QuantumChemPhys: Theoretical Chemistry and Physics at the Quantum Scale (ANR-10-IDEX-03-02). Este estudio ha sido apoyado parcialmente por el Programa de Investigación e Innovación Horizonte 2020 de la Unión Europea bajo el acuerdo de subvención Marie Skłodowska-Curie no. 898663 (A.M.M.), la subvención EUR NanoX no. ANR-17-EURE-0009 en el marco del Programa des Investissements d'Avenir (L.U.P.) y el APS-EPS-ICTP Travel Award Fellowship Programme (L.U.P.).

Cómo citar este artículo

Martín-Barrios R, Uranga-Piña LI, Martínez-Mesa A, Larrégaray P. Mecanismos de redistribución de energía en la dispersión de átomos de hidrógeno en superficies de tungsteno. *An Acad Cienc Cuba [internet]* 2025 [citado en día, mes y año];15(1):e1695. Disponible en: <http://www.revistaccuba.cu/index.php/revacc/article/view/1695>

El artículo se difunde en acceso abierto según los términos de una licencia Creative Commons de Atribución/Reconocimiento-NoComercial 4.0 Internacional (CC BY-NC-SA 4.0), que le atribuye la libertad de copiar, compartir, distribuir, exhibir o implementar sin permiso, salvo con las siguientes condiciones: reconocer a sus autores (atribución), indicar los cambios que haya realizado y no usar el material con fines comerciales (no comercial).

© Los autores, 2025.

