

# INHIBITION DE LA CORROSION DE L'ALUMINIUM ET DE SES ALLIAGES : APPROCHES DFT

F. Chiter<sup>a,b</sup>, C. Lacaze-Dufaure<sup>a</sup>, H. Tang<sup>b</sup> et N. Pébère<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Centre Inter-universitaire de Recherche et d'Ingénierie des Matériaux (CIRIMAT)  
UMR CNRS 5085

<sup>b</sup> Centre d'Élaboration de Matériaux et d'Études Structurales (CEMES) CNRS-UPR 8011

## Résumé

Des études électrochimiques ont montré que la molécule de 8-hydroxyquinoléine (8-HQ figure-1) est un inhibiteur de la corrosion de l'aluminium et de son alliage 2024 [1]. Mais le mécanisme associé au processus d'inhibition de la corrosion n'est pas bien compris. L'objectif de notre travail est l'étude de l'adsorption de la molécule 8-HQ et de ses dérivés (tautomère et 8-HQ déshydrogénée) sur la surface d'Al(111); ceci afin d'obtenir à l'échelle atomique des informations sur les phénomènes physico-chimiques mis en jeu à l'interface molécule organique/substrat. Nous mettons en œuvre une approche périodique à base de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Nous avons simulé l'adsorption de la molécule 8-HQ, de son tautomère et de la 8-HQ déshydrogénée sur une surface d'Al(111), pour un faible taux de recouvrement. Nous avons varié les géométries initiales afin d'explorer une partie de la surface d'énergie potentielle. Les calculs ont été réalisés avec la méthode DFT classique et DFT-D [2] afin de tenir compte des interactions faibles de type Van der Waals (VdW) existant à l'interface molécule/substrat.

L'analyse des résultats montre que la molécule 8-HQ présente tout d'abord un état physisorbé où la molécule est plane et parallèle à la surface. L'état chimisorbé est plus stable que l'état physisorbé ( $E_{\text{ads}} = -0,90/-1,11$  eV en DFT-D pour les états physisorbé/chimisorbé respectivement), mais la molécule est alors fortement déformée ( $E_{\text{def}} = 1,60$  eV), la prise en compte des interactions faibles entre la molécule et la surface métallique est nécessaire. Pour le tautomère, l'état chimisorbé est plus stable que pour la molécule 8-HQ ( $E_{\text{ads}} = -2,15$  eV). La molécule est également fortement déformée ( $E_{\text{def}} = 2,47$  eV). L'interaction tautomère/surface est plus forte que l'interaction 8-HQ/surface. Pour la 8-HQ déshydrogénée l'état chimisorbé le plus stable présente une très forte interaction molécule/surface ( $E_{\text{ads}} = -3,40$  eV) et une forte déformation de la molécule ( $E_{\text{def}} = 1,72$  eV).

L'analyse de la distribution de charge (analyse de Bader) montre un transfert d'électrons du substrat vers les molécules qui est plus important dans le cas de la molécule 8-HQ déshydrogénée. Nous avons constaté une faible variation du travail du sortie. La représentation de la densité des états projetée et partielle ainsi que la variation de la densité électronique lors de l'adsorption montrent une liaison de type covalente entre les atomes de la molécule adsorbée et les atomes d'aluminium de surface.

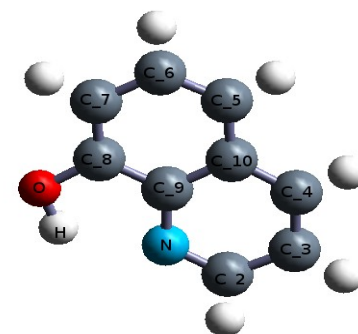


Figure-1 La molécule 8-HQ

[1] N. Pebere and al, *Electrochimica acta A*. 1996, vol. 41, n° 7-8, pp. 1209-1215

[2] S. Grimme, *J. Comp. Chem.* 27, 1787 (2006).