

# Adsorption de Molécules organiques et Biomolécules sur Surfaces Métalliques et Oxydées

**Dominique Costa**, Institut de Recherches de Chimie Paris, UMR 8247, 11 rue P et M Curie, 75005 Paris, [dominique.costa@chimie-paristech.fr](mailto:dominique.costa@chimie-paristech.fr)

La compréhension des phénomènes d'adsorption et auto-organisation de molécules organiques et biologiques sur des surfaces inorganiques est importante pour des applications dans des domaines tels que la nano-électronique, les bio-interfaces, la corrosion,...

Dans des conditions modèles (surface monocristalline, UHV, molécule de faible taille), les études expérimentales fournissent des informations à l'échelle atomique, par sonde microscopique (STM). Les calculs DFT permettent alors de préciser les modes d'adsorption observés et d'expliquer les forces en jeu dans l'auto-organisation des molécules adsorbées. L'exemple de l'acide glutamique sur surface d'argent Ag(100) illustrera cette complémentarité expérience-théorie. [1-3]

Le plus souvent les données expérimentales donnent des informations indirectes et la modélisation permet de préciser les modes d'adsorption les plus favorables des molécules, ainsi que l'organisation en surface. Les exemples de carboxylates de taille croissante sur ZnO,[4] de phosphonates sur TiO<sub>2</sub>[5], amines sur TiO<sub>2</sub>[6] illustreront l'apport de calculs DFT incluant la dispersion.

L'effet explicite du solvant sera ensuite décrit par dynamique Born Openheimer dans le cas de la fonctionnalisation de boehmite AlOOH par une couche d'acide gallique.[7]

1. Tranca, I., M. Smerieri, L. Savio, L. Vattuone, D. Costa, and F. Tielens, *Unraveling the self-assembly of the (S)-glutamic Acid "flower" structure on ag(100)*. *Langmuir : the ACS journal of surfaces and colloids*, 2013. **29**(25): p. 7876-84.
2. Smerieri, M., L. Vattuone, T. Kravchuk, D. Costa, and L. Savio, *(S)-Glutamic Acid on Ag(100): Self-Assembly in the Nonzwitterionic Form*. *Langmuir*, 2011. **27**(6): p. 2393-2404.
3. Smerieri, M., L. Vattuone, D. Costa, F. Tielens, and L. Savio, *Self-Assembly of (S)-Glutamic Acid on Ag(100): A Combined LT-STM and Ab Initio Investigation*. *Langmuir*, 2010. **26**(10): p. 7208-7215.
4. Islam, M.M., B. Diawara, P. Marcus, and D. Costa, *Synergy between iono-covalent bonds and van der Waals interactions in SAMs formation: A first-principles study of adsorption of carboxylic acids on the Zn-ZnO(0001) surface*. *Catalysis Today*, 2011. **177**(1): p. 39-49.
5. Di Valentin, C. and D. Costa, *Anatase TiO<sub>2</sub> Surface Functionalization by Alkylphosphonic Acid: A DFT+D Study*. *Journal of Physical Chemistry C*, 2012. **116**(4): p. 2819-2828.
6. Hemeryck, A., A. Motta, J. Swiatowska, C. Pereira-Nabais, P. Marcus, and D. Costa, *Diaminoethane adsorption and water substitution on hydrated TiO<sub>2</sub>: a thermochemical study based on first-principles calculations*. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2013. **15**(26): p. 10824-10834.
7. Ribeiro, T., A. Motta, P. Marcus, M.P. Gaigeot, X. Lopez, and D. Costa, *Formation of the OOH° radical at steps of the boehmite surface and its inhibition by gallic acid: a theoretical study including DFT- based dynamics*. *Journal of Inorganic Biochemistry*, 2013. **128C**(Nov): p. 164-173.