

---

# ETUDE DES INTERACTIONS 8-HYDROXYQUINOLEINE/Al(111) : VERS UNE PROTECTION DE L'ALUMINIUM CONTRE LA CORROSION

Fatah Chiter<sup>1</sup>, Corinne Lacaze-Dufaure\*<sup>2</sup>, Hao Tang<sup>3</sup>, and Nadine Pebere<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centre interuniversitaire de recherche et d'ingénierie des matériaux (CIRIMAT) – CNRS : UMR5085, Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT – 4 allée Emile Monso BP 44362 31030 Toulouse cedex 04 France, France

<sup>2</sup>Centre interuniversitaire de recherche et d'ingénierie des matériaux (CIRIMAT) – CNRS : UMR5085, Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT – 4 allée Emile Monso BP 44362 31030 Toulouse cedex 04 France, France

<sup>3</sup>Centre d'élaboration de matériaux et d'études structurales (CEMES) – CNRS : UPR8011 – 29 Rue Jeanne Marvig - BP 4347 31055 TOULOUSE CEDEX 4, France

## Résumé

La maîtrise de la corrosion des alliages d'aluminium est un enjeu économique majeur. Dans le domaine aéronautique, la protection des surfaces métalliques contre la corrosion est basée sur l'utilisation de traitements et revêtements de surface appropriés. Ainsi, la recherche d'inhibiteurs de corrosion respectueux de l'environnement conduit à s'intéresser à des molécules organiques.

Des études électrochimiques ont montré que la molécule de 8-hydroxyquinoléine (8-HQ - figure) est un inhibiteur de la corrosion de l'aluminium et de l'alliage 2024 (AlCu4 %)[1]. Mais le mécanisme associé au processus d'inhibition de la corrosion n'est pas totalement élucidé. Afin d'apporter des informations à l'échelle atomique pouvant conduire à une compréhension plus poussée de ce mécanisme, nous menons des études sur l'adsorption de la molécule 8-HQ et de ses dérivés (tautomère et 8-HQ déshydrogénée) sur la surface d'Al(111); ceci nous permettra de décrire 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 des taux de recouvrement allant jusqu'à une monocouche complète. Les calculs ont été réalisés en prenant en compte les interactions faibles de type Van der Waals (VdW) existant à l'interface molécule/substrat (DFT-D [2]) . L'analyse des résultats montre la présence d'états physisorbés et d'états chimisorbés selon la molécule adsorbée et le taux de recouvrement imposé. L'analyse de la distribution de charge (analyse de Bader) montre un transfert d'électrons du substrat vers les molécules.

---

\*Intervenant

**Mots-Clés:** Adsorption, Al(111), inhibiteur de corrosion, DFT