

---

# Étude de complexes binucléaires d'aluminium par TD-DFT

Aurélien Moncomble\*<sup>1</sup> and Jean-Paul Cornard<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman (LASIR) – CNRS : UMR8516, Université Lille I - Sciences et technologies – Bâtiment C5 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France

## Résumé

L'aluminium est l'un des métaux les plus présents dans le milieu naturel, en particulier sous forme d'aluminium (III). Ce cation métallique a une très forte affinité pour les molécules organiques présentes dans les sols et conduit à la formation de complexes qui modifient la spéciation du métal mais aussi le comportement des ligands dans leur milieu. Ceci explique l'intérêt de mieux comprendre les interactions Al(III)-molécules organiques représentatives des substances humiques.

Dans cette étude, nous nous intéressons à la chrysazine et à l'esculetine, deux ligands organiques multisites qui forment des complexes de stoechiométrie 1:1 mais aussi des complexes binucléaires en présence d'un excès d'aluminium (III).

Pour caractériser les interactions impliquées lors de la complexation, l'enregistrement de spectres UV-visible a été réalisé et les résultats expérimentaux ont été comparés à ceux obtenus par l'application de méthodes fondées sur la TD-DFT. Nous avons pu montrer que la nature des complexes binucléaires est très différente pour les deux molécules étudiées, ne faisant pas intervenir le même nombre de sites du ligand dans les deux cas.

Par ailleurs, une étude plus détaillée de la complexation de l'esculetine avec d'autres cations métalliques (cuivre (II) et plomb (II)) a montré que la nature de la liaison est très fortement ionique, ce qui a été confirmé par des grandeurs calculées au niveau des points critiques de liaison.

**Mots-Clés:** complexes, spectroscopie UV visible, structure électronique, TDDFT

---

\*Intervenant