



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

Université Djilali Liabès de Sidi Bel Abbès

Fiche de Présentation Thèse de Doctorat / Mémoire de Magister

Type de la PG نوع ما بعد التدرج	Magister.
------------------------------------	-----------

اسم و لقب الطالب	بوعناني شهرزاد
Nom et Prénom de l'étudiant	Bouanani chahrazed
e-mail de l'étudiant / البريد الالكتروني للطالب	Bouanani.command@gmail.com
Numéro de téléphone de l'étudiant / رقم هاتف الطالب	06993.87527

Spécialité / التخصص*	chimie
Option / الفرع*	Chimie théorique de matériau minéraux
Intitulé de la thèse / mémoire عنوان الأطروحة / المذكرة	Etude théorique de l'adsorption de l'Aniline sur la surface tétraédrique de la Dickite substituée
Nom et Prénom de l'encadreur اسم و لقب المؤطر	<i>Mme MAHDAD-BENZERDJEB Amina</i>
Date de soutenance تاريخ المناقشة	16/10/2014
Les mots clés الكلمات المفتاحية Keywords	Kaolinite (dickite), adsorption, DFT, Aniline kaolinite (diçkite), adsorption, Aniline الكولريت الإمتزاز، الأنيلين

(*) Se conformer aux intitulés des spécialités et des options portées sur la dernière attestation d'inscription.

الملخص (بالعربية) :

ملخص:
العمل المقدم ف هذه المذكرة هُدف للدراسة النظرية لإمتزاز الملوثات العضوية مثل الأنيول على السطح رباعي الكولريريت (dickite) وبنفس السطح مع تبدل 2 ذرتين من الس لسوم بالأل من وم ولهذا نجري حساب نظرية استنادا على طريقة Gaussian DFT (B3LYP/6-31G,6-31G*,6-31G*) لمحاكاة إمتزاز الأنيول على سطوح رباعية باستخدام برنامج Gaussian

Résumé (Français et/ou Anglais) :

Résumé :

Le travail présenté dans ce mémoire a pour objet l'étude théorique de l'adsorption du polluant organique Aniline sur la surface tétraédrique de kaolinite (dickite) et avec substitution Si par Al et le cation Mg^{2+} sur même surface en différent position 1-2, 1-3 et 1-4 s'intéresse à l'élimination de polluants, à cet effet des calculs théoriques sont basé sur la méthode DFT de type B3LYP avec des bases 6-31G ,6-31G*,6-31G** en utilisant le programme Gaussiant.

Abstract:

the work presented in this mimore to for object the theoretical study of the adsorption of the organic pollutant (aniline) on tetrahedral surface of kaolinite (dickite) and with substitution If by Al and the Mg^{2+} cation on same surface into different position 1-2,1-3 and 1-4 is interested in the elimination from pollutants, for this purpose of calculates theoretical sound based on method DFT of the type B3LYP with bases 6-31G, 6-31G*, 6-31G ** by using program GAUSSIANT.

