

N° d'ordre :

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE & POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR & DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DJILLALI LIABES - SIDI BEL ABBES -

FACULTE DES SCIENCES EXACTES

DEPARTEMENT DE CHIMIE

MEMOIRE DE MAGISTER

Spécialité: Chimie

Option : Etudes théoriques des matériaux minéraux

Présenté par

M^{elle} Ghelami Sahmadia

Intitulé

Simulation de l'adsorption de composés phénoliques sur les sites siloxanes d'argile : Calcul quantique

Soutenu le : 03/11/2014

Devant le jury composé de:

Président: *Mr GUEMRA Kadour*

Professeur Faculté des Sciences Exactes

Examineur: *Mme BENOSMANE Nabila*

Professeur Faculté des Sciences Exactes

Encadreur : *Mme MAHDAD-BENZERDJEB Amina* MCA Faculté des Sciences Exactes

Simulation de l'adsorption de composés phénoliques sur les sites siloxanes d'argile : Calcul quantique

Résumé :

Dans ce travail, nous étudions le phénomène d'adsorption de deux polluantes organiques 2-aminophénol et 2-amino-4-chlorophénol sur la kaolinite en utilisant une combinaison de calcul quantique.

L'adsorption est l'une des propriétés physico-chimique les plus importantes des argiles, cette propriété est utilisée pour l'élimination de polluant toxique à l'homme et l'environnement. Notre étude est basée sur la simulation de l'adsorption du 2-aminophénol et 2-amino-4-chlorophénol à la surface d'un fragment de la kaolinite.

Donc, nous essayons de comprendre le processus d'adsorption du 2-aminophénol et 2-amino-4-chlorophénol sur le coté tétraédrique de la kaolinite. Cette étude sera réalisée par des calculs ab initio avec différents niveaux de calcul : théorie de la fonctionnelle de densité DFT et semi-empirique PM3.

Mots clés : Adsorption ; Kaolinite ; 2-aminophénol ; 2-amino-4-chlorophénol ; DFT ; semi-empirique PM3.

Abstract:

In this work, we study the adsorption of two organic Pollutants 2-aminophenol and 2-amino-4-chlorophenol on the kaolinite using a combination of quantum computing.

The adsorption is one of the most important clays physicochemical property, this property is used for the removal of toxic pollutant to human and environment. Our study is based on the adsorption of 2-aminophenol and 2-amino-4-chlorophenol on the fragment surface of kaolinite.

So we try to understand the adsorption process of 2-aminophenol and 2-amino-4-chlorophenol on the tetrahedral side of kaolinite. This study will be conducted by an ab initio calculations with different levels of computing: density of functional theory DFT and semi-empirical PM3.

Keywords: Adsorption; Kaolinite; 2-aminophenol; 2-amino-4-chlorophenol; DFT; PM3 semi empirical.

المخلص:

نقوم في هذا العمل بدراسة ظاهرة امتزاز المركبين العضويين الملوثين 2-امينو فينول و2-امينو-4-كلورو الفينول على سطح الكاولينيت باستخدام مجموعة من الطرق النظرية الخاصة بكيمياء الكم .

يتمتع الطين بمجموعة هامة من الخصائص الفيزيائية و الكيميائية من بينها قدرته الكبيرة على الامتزاز. ويتم استغلال هذه الخاصية للتخلص من المواد الملوثة للبيئة والمواد السامة المتواجدة في الطبيعة.

يعتبر المركبين 2-امينو الفينول و2-امينو-4-كلورو الفينول من مركبات السامة والملوثة للبيئة. ويتم اللجوء للتخلص منها إلى استغلال ظاهرة الامتزاز على الطين.

لذا نحاول فهم عملية امتزاز المركبين 2-امينو الفينول و2-امينو-4-كلورو الفينول على سطح الكاولينيت باستخدام طرق حسابية خاصة بالكيمياء النظرية على سطح رباعي السطوح الكاولينيت مع مستويات مختلفة من الحساب DFT –Semi – empirique PM3

الكلمات المفتاحية: الامتزاز ، الكاولينيت ، 2-امينو الفينول ، 2-امينو-4-كلورو الفينول ، DFT –Semi – empirique PM3

Présentée par : Sahmadia Ghelami.

Laboratoire des matériaux et catalyse (LMC), Département de chimie, Faculté des Sciences Exactes, Université Djilali Liabes, 22000 Sidi Bel Abbes.

Adresse : Cité 19 Juin Mostapha Ben Brahim – W. Sidi Bel Abbes

Tél : 0775.75.97.74

Ghesahm@gmail.com