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

Mr MOSTEFAI Mohammed

Intitulé

Adsorption sur différents modèles de cluster d'argile : Etude quantique

Soutenu le : 18 / 12 / 2014

Devant le jury composé de:

Président: ***Mr MOUFFOK Benali***	Professeur	Faculté des Sciences Exactes
Examinateur: ***Mme EL BAHRI Zineb***	MCA	Faculté des Sciences Exactes
Encadreur : ***Mme MAHDAD-BENZERDJEB Amina***	MCA	Faculté des Sciences Exactes

Résumé :

Dans ce travail, nous étudions le phénomène d'adsorption du 2.4-dinitrophénol(DNP) sur les surfaces de la kaolinite en utilisant une combinaison de calculs quantique.

L'adsorption est l'une des propriétés physico-chimique les plus importantes des argiles, cette propriété est utilisé pour l'élimination de polluant toxique a l'homme et l'environnement. Notre étude est basée sur l'adsorption du DNP a la surface d'un fragment de la kaolinite.

Donc nous essayons de comprendre le processus d'adsorption du2.4-dinitrophénol(DNP) sur les deux surfaces de contact avec la kaolinite (couche octaédrique et tétraédrique) en utilisant des calculs ab-initio avec les méthodes Hartree-Fock et DFT semi empirique- .

Mots clés : adsorption de kaolinite sur 2.4-dinitrophénol(DNP)calcule théorique :

Hartree-Fock .DFT. semi empirique.

Abstract:

In this work, we study the adsorption of 2.4-dinitrophénol(DNP)on the surface of kaolinite using a combination of quantum calculations.

Adsorption is one of the physic-chemical properties of the most important clays; this property is used for the removal of toxic pollutants humans and the environment. Our study is based on the adsorption of DPN to surfaces of a fragment of kaolinite.

So we try understanding the adsorption process on both contact 2.4-dinitrophénol(DNP) surfaces of kaolinite (octahedral and tetrahedral) using ab initio calculations with Hartree-Fock method and DFT and semi- empirique method

Key words: adsorption of kaolinite and 2.4-dinitrophénol(DNP): Hartree-Fock.DFT .semi - empirique.

ملخص;

نقوم في هذا العمل بدراسة ظاهرة امتزا 4,2- ثنائي دينوتروفينول 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 و يتم استغلال هذه الخاصية للتخلص من المواد الملوثة للبيئة و المواد السامة المتواجدة في الطبيعة.

يعتبر المركب4,2- ثنائي دينوتروفينول مركب سام و ملوث للبيئة و هو ناتج عن المخلفات الصناعية و يتم اللجوء للتخلص منه إلى استغلال ظاهرة الامتزاز على الطين.

لذا نحاول فهم عملية امتزاز 4,2- ثنائي دينوتروفينول على سطح الكاولينيت باستخدام طرق حسابية بالكيمياء النظرية على مستوى سطح التماس بين المركبين الطبقتين رباعية السطوح و ثمانية السطوح، الطرق الحسابية المسخدمة هي الطرق

Semi- empirique.DFT.Hartree-Fock

الكلمات المفتاحية : الامتزاز، الكاولينيت، الحساب النظري، 2, 4 - ثنائي دينوتروفينول.semi-empirique.DFT

Hartree-fock

Mostefai mohammed E-mail-:chimie.cantique2@gmail.com