

# Détermination des paramètres d'une série des Tensioactifs Cationiques par modélisation moléculaire. Etude de leur adsorption sur la montmorillonite.

Zizi Zahia<sup>\*</sup>, Bekhelifa Leila, Hallouch Mustapha et BenAhmed Abdellatif

*Université de Sidi Bel Abbés, Faculté des Sciences Exactes, Département de Chimie, Laboratoire de Matériaux et Catalyse, BP 89 ; 22000, Sidi Bel Abbés, Algérie.*

<sup>\*</sup> [z\\_zahia@yahoo.com](mailto:z_zahia@yahoo.com)

Actuellement, il existe de nouvelles substances chimiques qui font augmenter considérablement la force de lavage des produits tels que les tensioactifs. Ces derniers sont des substances solubles dans l'eau et ayant des propriétés de se concentrer, de s'agréger aux interfaces entre l'eau et d'autres substances peu solubles dans l'eau; les corps gras notamment. Ils sont considérés aujourd'hui comme des micropolluants dangereux même lorsqu'ils existent sous forme de traces. Les tensioactifs cationiques sont l'un des micropolluants présentant un grand danger pour l'homme et son environnement. De ce fait, nous nous sommes proposé de déterminer quelques paramètres d'une série de tensioactifs cationiques par modélisation moléculaire, en utilisant le CHEM 3D bio. Nous avons, donc, optimisé les géométries et minimisé les énergies du Chlorure du Dodécyl Triméthyl Ammonium (DTAC), le Bromure du Dodécyl Triméthyl Ammonium (DTAB) et l'Iodure du Dodécyl Triméthyl Ammonium (DTAI), par mécanique moléculaire. En suite, nous avons calculé les tailles de ces molécules par dynamique moléculaire ainsi que leurs coefficients de partage et leurs ovalisations. Les résultats ont montré que les trois polluants s'adsorbent sur Mt naturelle, Mt(Mg) et Mt(Ca) et ne s'adsorbent pas sur les montmorillonites Mt (Na) et Mt(K). Les valeurs du coefficient de partage des trois tensioactifs sont égales à l'unité. Les tensioactifs cationiques étudiées sont très hydrophiles et ne passeront que très peu à travers une membrane. De plus; ces valeurs montrent que ces micropolluants sont autant plus solubles dans l'eau que dans l'octanol. Les valeurs d'ovalisation sont toutes de l'ordre de 0.6 et indiquent que les tensioactifs étudiés s'approchent de la même manière d'une sphère ou d'un cylindre.

**Mots clés**: tensioactifs, montmorillonite, adsorption, mécanique moléculaire, dynamique moléculaire, coefficient de partage, ovalisation.