

Etude par modélisation moléculaire les possibilités d'adsorption de l'atrazine et la simazine sur la montmorillonite

Mustapha HALLOUCH¹, Zahia ZIZI²

1, 2 : Laboratoire des matériaux et catalyse, faculté des sciences exacts, département de chimie, Hai larbi Ben M'hidi BP 89 Université de Sidi- Bel – Abbas ; SIDI BEL ABBES, 22000, Algerie.

E_mail : ¹, hallouchmustapha@yahoo.fr, ², z_zahia@yahoo.com

Résumé

Le développement technologique a engendré une multitude de produits chimiques tels que les pesticides utilisés dans le domaine d'agriculture. Toutefois, ces produits ne sont pas tous biodégradables ; et peuvent se retrouver dans les eaux de surfaces, souterraines et réserves d'eaux destinées à la consommation. Le groupe triazine est l'un des constituants des pesticides présentant un grand danger pour l'homme. Dans ce travail, Nous nous sommes intéressés à l'Atrazine et la Simazine deux constituants important du groupe triazine. Nous avons effectué d'une part ; des calculs de mécanique moléculaire afin d'optimiser la géométrie et minimiser l'énergie de l'atrazine ($C_8H_{14}ClN_5$) et la simazine ($C_7H_{12}ClN_5$). D'autre part ; nous avons calculé par dynamique moléculaire les dimensions de ces polluants afin d'étudier l'adsorption sur les cinq types de montmorillonite ; Mt (naturelle), Mt (Na), Mt(Ca), Mt(K) et Mt(Mg). Les résultats de nos calculs ont montré que ces deux composants présentent des géométries très stables. Les dimensions calculées de ces molécules ont révélé que l'atrazine et la simazine s'adsorbent facilement sur Mt (naturelle), Mt(Ca) et Mt(Mg), alors que l'adsorption sur les deux types de montmorillonites ; Mt(Na) et Mt(K) est impossible.

Mots clés : pesticides, montmorillonite, adsorption, groupe triazine, atrazine, simazine dynamique moléculaire, mécanique moléculaire