



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mr : EZARFI Nabil

Soutiendra : le 07/11/2020 à 10 H

Lieu : Salle de Réunion, Département de Géologie

Une thèse intitulée :

contribution à l'étude quantique de l'interaction de métaux lourds (Zn, Cd, Hg) avec les molécules atmosphériques (O₂,OH,SH).

En vue d'obtenir le **Doctorat**

FD : Ressources Naturelles, Environnement et Développement Durable (RNE2D)

Spécialité : Chimie physique appliquée

Devant le jury composé comme suit :

	NOM ET PRENOM	GRADE	ETABLISSEMENT
Président	Pr. MCHARFI Mohammed	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Directeur de thèse	Pr. TOUIMI BENJELLOUN Adil	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Rapporteurs	Pr. BENZAKOUR Mohammed	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. BOUACHRINE Mohammed	PES	Ecole Supérieure de Technologie – Khenifra
	Pr. ZGOU Hsaine	PH	Faculté polydisciplinaire - Ouarzazate
Membres	Pr. SFAIRA Mouhcine	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. EL HALLAOUI Menana	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. EL KHATTABI Souad	PH	Ecole Nationale des Sciences Appliquées - Fès

Résumé

Les propriétés des complexes métalliques du groupe 12 représentent un domaine de recherche actif en chimie physique. L'objectif principale de ce travail est l'étude quantique de l'interaction de métaux lourds (Zn, Cd, Hg) avec les espèces atmosphériques (H, O, S, O₂, OH et SH) vue à leurs implications dans de nombreux cycles chimiques de l'atmosphère.

Les complexes diatomiques MX (M=Zn, Cd, Hg et X = H, O, S) et triatomiques MY (Y = O₂, OH et SH) ont été étudiés en détail au moyen des méthodes élaborées de type ab initio et DFT et à l'aide des bases assez larges et suffisamment polarisées. Les effets de corrélation et les effets relativistes scalaires ont été inclus avec précision en utilisant les pseudopotentiels relativistes adéquats.

Afin de déterminer la qualité de notre choix des méthodes et bases, nous avons effectué des calculs DFT à l'aide de la fonctionnelle B3LYP et ab-initio de type CCSD(T) en utilisant des bases relativistes pour les composés diatomiques OH, SH, O₂ et MX (M=Zn, Cd, Hg et X = H, O, S), pour lesquels les données expérimentales et théoriques sont disponibles.

Pour chaque complexe MY (Y = O₂, OH et SH), nous avons recherché de façon systématique les surfaces de potentiel pour pouvoir identifier les produits stables, les intermédiaires et aussi déduire les propriétés moléculaires telles que, les géométries d'équilibre, les moments dipolaires, les fréquences de vibration, les énergies de dissociation, et les enthalpies de réaction.

La question de stabilité de ces entités dans l'atmosphère est délicate à résoudre puisque plusieurs facteurs peuvent intervenir, notamment l'effet du rayonnement solaire, l'effet de température ou encore l'action d'autres espèces présentes. Le moyen que nous proposons pour juger la stabilité éventuelle et d'examiner la possibilité d'existence d'une espèce dans l'atmosphère à une température donnée est basée sur la détermination de seuil de longueur d'onde absorbée (λ) en relation avec les rayonnements solaires atmosphériques ultraviolet, visible et infrarouge.

Mots clés : Méthodes, ab initio, DFT, CCSD(T), B3LYP, pseudopotentiel relativiste, effet relativiste, pollution atmosphérique, métal lourd, zinc, cadmium, mercure, hydroxyle, hydrosulfure, dioxyde, mécanisme réactionnel, surface d'énergie potentielle, état de transition, structure, stabilité, spectroscopie, longueur d'onde absorbée

Contribution to the quantum study of interaction of heavy metals (Zn, Cd, Hg) with atmospheric molecules (O₂, OH, SH).

Abstract:

The properties of the group 12 metal complexes represent an active area of research in physical chemistry. The aim of this work is the quantum study of interaction of heavy metals (Zn, Cd, Hg) with atmospheric entities (H, O, S, O₂, OH and SH) following their implications in many cycles chemicals in the atmosphere.

The diatomic complexes MX (M=Zn, Cd, Hg and X = H, O, S) and the triatomic complexes MY (Y = O₂, OH and SH) have been studied in detail using elaborate methods of type ab-initio and DFT and using the Gaussian and Slater basis sets which are enough large and sufficiently polarized. Correlation and scalar relativistic effects have been precisely included using relativistic pseudopotentials.

In order to determine the quality of our choice of methods and basis, the DFT and ab-initio methods with B3LYP functional and CCSD (T) respectively, in connection with the relativistic basis calculations have been performed for the diatomic compounds OH, SH, O₂ and MX with (M = Zn, Cd and Hg) and (X = H, O and S), for which experimental and theoretical data are available.

For each MY complex (Y = O₂, OH et SH), we systematically searched the potential surfaces in order to determine stable products, intermediates and also to deduce molecular properties such as, equilibrium geometries, dipole moments, vibration frequencies, dissociation energies, and reaction enthalpies.

The question of the stability of the entities in the atmosphere is difficult to resolve since several factors can intervene, in particular the effect of solar radiation, temperature or the action of other species present. The means which we propose to judge the possible stability and to examine the possibility of existence of a species in the atmosphere is based on the determination of absorbed wavelength (λ) in relation to atmospheric solar radiation ultraviolet, visible and infrared.

Key words: Methods, Ab initio, DFT, CCSD(T), B3LYP, relativistic pseudopotential, relativistic effect, atmospheric pollution, heavy metal, zinc, cadmium, mercury, hydroxyl, hydrosulfur, dioxide, reactivity, reactional mechanism, surface of energy potential, transition state, structure, stability, spectroscopy, thermal dissociation, absorbed wavelength.