



République Algérienne Démocratique Et Populaire  
Ministère de L'enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université 20 août 1955 – Skikda

جامعة 20 أوت 1955 سكيكدة

Faculté de technologie

كلية التكنولوجيا

Département de génie des procédés

قسم هندسة الطرائق

N° d'ordre : D012122016D

# Thèse

En vue de l'obtention du diplôme

## Doctorat 3<sup>ème</sup> Cycle - LMD

En : Génie des Procédés

Option : Catalyse

Présentée par

**ASSABA Ibtissem Meriem**

### Étude théorique des propriétés d'emmagasinement dans les matériaux supramoléculaires poreux.

Directeur de thèse : **Belhocine Youghorta**

Co-directeur de thèse : **Seydou Mahamadou**

Soutenue le :

Devant le Jury composé de :

**Nom et Prénom**

**Grade**

**Etablissement**

Messikh Nabil

Professeur Président

Université 20 Aout 1955-Skikda

Bougdah Nabil

MCA Examineur

Université 20 Aout 1955-Skikda

Zaiter Abdellah

MCA Examineur

Institut des sciences et des techniques appliquées- Université Larbi ben M'hidi-Oum el Bouaghi

Belhocine Youghorta

MCA Rapporteur

Université 20 Aout 1955-Skikda

Année universitaire 2022- 2023

## Résumé

Ce manuscrit constitue un travail de thèse réalisé au moyen de la chimie computationnelle dans lequel on a traité deux axes différents en se basant sur l'approche de la théorie de la fonctionnelle de la densité "DFT". Le premier axe est particulièrement lié à la crise sanitaire mondiale du Covid-19 et est porté sur l'étude de formation des complexes d'inclusion entre les molécules chloroquine et dexaméthasone et les macrocycles cyclodextrines. Le second axe est d'un intérêt environnemental où on étudie le potentiel d'une série de macrocycles pour la rétention de molécules à effet de serre ainsi que l'inclusion des explosifs tel que le 2,4- dinitrotoluène. On a pu identifier les différentes interactions intermoléculaires régissant ces systèmes formés et confirmer les résultats expérimentaux.

**Mot clés :** DFT, Chloroquine, Dexaméthasone, Gaz à effet de serre, 2,4-Dinitrotoluène, Macrocyces macromoléculaires.

## Abstract

This manuscript represents a thesis work carried out by means of computational chemistry in which two different axes have been studied based on the density functional theory "DFT" approach. The first axis is particularly related to the global health crisis of Covid-19 and focuses on the study of the formation of inclusion complexes between chloroquine and dexamethasone molecules and cyclodextrins macrocycles. The second axis is of environmental interest where we study the potential of a series of macrocycles for the retention of greenhouse gases as well as the inclusion of explosives such as 2,4-dinitrotoluene. We were able to identify the different intermolecular interactions governing these formed systems and confirm the experimental results.

**Keywords:** DFT, Chloroquine, Dexamethasone, Greenhouse gases, 2,4-Dinitrotoluene, Macromolecular macrocycles.

## ملخص

تمثل هذه المخطوطة أطروحة دكتوراه تم تنفيذها عن طريق الكيمياء الحسابية حيث تمت دراسة محورين مختلفين بناءً على نظرية الكثافة الوظيفية "DFT". يرتبط المحور الأول بشكل خاص بالأزمة الصحية العالمية لـ Covid-19 ويركز على دراسة مجمعات التضمين بين جزيئات الكلوروكين والديكساميثازون و الديكسترين الحلقي. المحور الثاني ذو أهمية بيئية حيث ندرس إمكانية سلسلة من الحلقات المضيفة للاحتفاظ بغازات الاحتباس الحراري بالإضافة إلى ادراج المتفجرات مثل 2,4-ثنائي نيتروتولوين. من خلال هذا العمل تمكنا من تحديد الروابط بين الجزيئات المختلفة المسؤولة عن الأنظمة المشكلة وتأكيد النتائج التجريبية.

**الكلمات المفتاحية:** DFT, كلوروكين, ديكساميثازون, غازات الاحتباس الحراري, 2,4-ثنائي نيتروتولوين, الحلقات الجزيئية المضيفة.