



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mme (elle) **HIDAoui Safaa**
Soutiendra : le **Samedi 27/05/2023 à 10H00**
Lieu : **FSDM – Centre Visioconférence**

Une thèse intitulée :

Elaboration, caractérisation structurale et étude physicochimique de nouveaux matériaux hybrides à base de phosphates et de métaux de transition

En vue d'obtenir le **Doctorat**

FD : Sciences des Matériaux et Procédés Industriels

Spécialité : Sciences des matériaux pour l'énergie et l'environnement

Devant le jury composé comme suit :

Nom et prénom	Etablissement	Gra de	Qualité
Pr KHALDI Mohamed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Président
Pr MOULINE Ali	Faculté des Sciences, Meknès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr EL OMARI Mohamed	Faculté des Sciences, Meknès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr OUARSAL Rachid	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr CHEMLAL Souad	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr TACHIHANTE Mohamed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr LACHKAR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



Résumé :

Le travail de ce mémoire a porté sur l'élaboration de nouveaux matériaux phosphatés à base de métaux de transition (Mn, Co, Ni) et de molécules organiques sélectionnées. De nouveaux matériaux hybrides à base de phosphate-diphosphate de type $(C_4H_{12}N_2)[Co(H_2O)_6](HPO_4)_2$, $(C_4H_{12}N_2)[Mn_2(C_2O_4)_2(H_2PO_4)] \cdot 2H_2O$, $(C_4H_{12}N_2)[Na_2Ni(H_2O)_2(HP_2O_7)_2]$ et de phosphate simple $[Mn(H_2O)_2(H_2PO_4)] \cdot 2H_2O$ ont été préparés. La synthèse de ces systèmes poreux a été effectuée élaborés par voie humide à température ambiante et les échantillons ont été isolés sous forme de monocristaux. Les structures cristallines de ces composés ont été déterminées par diffraction de rayons X sur monocristal. L'arrangement cristallin des matrices phosphatées, se caractérise par la coordination des sous unités de construction qui partagent leurs arêtes ou leurs sommets pour générer soit des couches ouvertes soit des chaînes linéaires infinies avec diverses géométries. L'annexion des réseaux hybrides et simples conduit à des structures tridimensionnelles liées et stabilisées via des liaisons d'hydrogène. Ces interactions ont été bien illustrées par l'étude des surfaces d'Hirshfeld, qui ont confirmé l'existence des contacts intermoléculaires et indiquant des positions de donneurs et/ou d'accepteurs avec une prédominance des interactions de type $O \cdots H/H \cdots O$, $H \cdots H$. Cette détermination structurale a été complétée par la spectroscopie vibrationnelle Infrarouge qui permet d'identifier et confirmer les bandes caractéristiques de chaque système chimique. L'étude du comportement thermique des différents systèmes cristallins, effectuée par l'analyse thermogravimétrique et différentielle (ATG/ATD), montre que le système de diphosphate possède une grande stabilité thermique à haute température. L'étude de l'activité antimicrobienne, des phases de diphosphate hybride et de phosphate simple, a été évaluée par la méthode de diffusion en milieu gélosé (diffusion en puits). L'étude de l'activité catalytique, indique que le système de phosphate simple et hybride, présente un pouvoir catalytique prometteur pour la réduction de trois isomères de nitrophénols, ainsi que pour l'oxydation et la dégradation du bleu de méthylène.

Mots clés :

Matériaux phosphatés, Matériaux hybrides inorganiques-organiques, Métaux de transition, Chimie douce, diffraction des rayons X sur monocristal, Spectroscopies Infrarouge, ATG/ATD, Activité catalytique, Activité antibactérienne.



Elaboration, structural characterization and physicochemical study of new hybrid materials based on phosphates and transition metals

Abstract:

The thesis deals with the synthesis of a new phosphate materials based on transition metals (Mn, Co, Ni) and selected organic molecules. New hybrid materials based on phosphate-diphosphate of the type $(C_4H_{12}N_2)[Co(H_2O)_6](HPO_4)_2$, $(C_4H_{12}N_2)[Mn_2(C_2O_4)_2(H_2PO_4)] \cdot 2H_2O$, $(C_4H_{12}N_2)[Na_2Ni(H_2O)_2(HP_2O_7)_2]$ and simple phosphate $[Mn(H_2O)_2(H_2PO_4)] \cdot 2H_2O$ were prepared. The synthesis of these porous frameworks was carried out under mild conditions in aqueous solution at room temperature and the samples were isolated as single crystals. Their crystal structures were solved from single-crystal X-ray diffraction data. The crystal packing of the phosphate matrices, is characterized by the coordination of the secondary building units that share edges or vertices to generate either infinite linear chains or open layers with various geometries. The annexation of hybrid and simple networks gives rise to three-dimensional structures linked and stabilized via hydrogen bonds. These interactions were well illustrated by the study of Hirshfeld surfaces, which confirmed the existence of intermolecular contacts and indicated donor and/or acceptor positions with a predominance of $O \cdots H/H \cdots O$, $H \cdots H$. This structural determination was completed by Infrared vibrational spectroscopy, which makes it possible to identify and confirm the characteristic bands of each chemical system. The study of the thermal behavior of the different crystalline systems, carried out by thermogravimetric and differential analysis (ATG/ATD), shows that the diphosphate system has a high thermal stability at high temperature. The study of the antimicrobial activity of the hybrid diphosphate and simple phosphate phases was evaluated by the method of diffusion in agar medium (diffusion in wells). The study of the catalytic activity, indicates that the simple and hybrid phosphate system shows promising catalytic power for the reduction of three nitrophenol isomers, as well as for the oxidation and degradation of methylene blue.

Key Words:

Phosphate materials, Inorganic-organic hybrid materials, Transition metals, Soft chemistry, Single crystal X-ray diffraction, Infrared spectroscopy, ATG/ATD, Catalytic activity, Antibacterial activity.