AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mr **AKOUIBAA Mohamed**

Soutiendra : **le Samedi 18/03/2023** à **10H00**
Lieu : ***FSDM* – Département de Géologie**

Une thèse intitulée :

Synthèse, Etude Structurale et Propriétés Physico-Chimiques de Nouveaux Matériaux à Base de Phosphites, d'Oxalates et de Métaux Bivalents

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	Grade	Qualité
Pr TACHIHANTE Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Président
Pr EL OMARI Mohammed	Faculté des Sciences, Meknès	PES	Rapporteur & Examinateur
Pr BENTAYEB Amar	Faculté des Sciences, Meknès	PES	Rapporteur & Examinateur
Pr OUAMMOU Abdelkrim	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Rapporteur & Examinateur
Pr MIKOU Aziz	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examinateur
Pr LACHKAR Mohamed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse
Pr RAKIB Souad	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Co-directeur de thèse

Résumé :

Notre travail de thèse a porté sur la synthèse et la caractérisation structurale, spectroscopique et thermique de nouveaux composés à transfert de protons et de complexes de coordination à base de nickel ou de cuivre. Les matériaux synthétisés ont été testés pour des applications biologiques et catalytiques. Une étude assez importante sur le comportement magnétique des phases d'oxalate hybrides a été aussi réalisée. La synthèse de ces matériaux poreux, effectuée soit par voie hydrothermale ou par voie humide, a conduit à la formation de onze nouvelles phases dont cinq contiennent un système hybride inorganique-organique à base de phosphite et d'oxalate $(C_2N_2H_{10})[M(H_2O)_6](HPO_3)_2$ (M = Co et Ni), $[C_4H_{15}N_3]M(C_2O_4)_2(NO_3).2H_2O$ (M = Cu, Ni) et $(C_2N_2H_{10})[Mg(H_2O)_2(C_2O_4)_2]$. Trois renferment une phase mixte à base de phosphite et d'oxalate $[M(N_2H_5)(H_2PO_3)_3]$ avec (M = Cu et Zn) et $[Ni(N_2H_5)_2(C_2O_4)_2].2H_2O$. Trois autres composés sont des complexes de coordination à base de diéthylènetriamine $[Ni(C_4H_{13}N_3)_2](NO_3)_2$, $[Ni(C_4H_{13}N_3)_2]Cl_2.H_2O$ et $[Cu_2(C_4H_{13}N_3)_2(C_2O_4)](NO_3)_3$. La première et la deuxième partie de notre mémoire de thèse a porté sur la synthèse et la caractérisation de huit composés à transfert de protons qui ont été caractérisés par diffraction des rayons X sur monocristal, par spectroscopie FTIR et par analyse thermique. La caractérisation structurale des phases élaborées nous a permis de mettre en évidence les différentes liaisons hydrogènes inter- et intramoléculaires qui assurent la cohésion des molécules dans le réseau cristallin. L'étude de l'activité catalytique montre que le système de phosphite et d'oxalate mixte et hybride, présente un pouvoir catalytique prometteur pour la conversion du bleu de méthylène et la réduction des isomères du nitrophénol. L'étude des propriétés magnétiques a été réalisée sur deux matériaux à base d'oxalate. La troisième partie a fait l'objet de la chimie de coordination, trois complexes de coordination ont été élaborés et caractérisés par diffraction des rayons X sur monocristal et par spectroscopie FTIR, ATG/DSC, spectroscopie UV-Visible et par microscopie électronique à balayage (MEB). L'évaluation de l'activité antioxydante a été faite par les tests de DPPH, FRAP et PM, tandis que l'étude structurale a été complétée par une étude computationnelle et une analyse de la surface d'Hirshfeld autour des structures moléculaires.

***Mots clés** : Phosphites, oxalates, complexes de coordination, matériaux hybrides organique-inorganique, composés à transfert de protons, spectroscopie FTIR, ATD/DSC, UV-visible, diffraction des rayons X, magnétisme, propriétés antioxydantes, activité catalytique, surface d'Hirshfeld, calculs DFT.*

SYNTHESIS, STRUCTURAL STUDY AND PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF NEW MATERIALS BASED ON PHOSPHITES, OXALATES AND BIVALENT METALS

Abstract:

My research work deals with the synthesis and the structural, spectroscopic, and thermal characterization of new proton transfer compounds and coordination complexes mainly based on nickel or copper metals. The harvest materials have been tested for biological and catalytic applications, as well as an important study on magnetic behavior has also been established on the hybrid oxalate phases. The synthesis of these porous materials was carried out either by hydrothermal or through soft chemistry. It has led to the formation of eleven new phases, five of which contain an inorganic-organic hybrid system based on phosphite and oxalate $(C_2N_2H_{10})[M(H_2O)_6](HPO_3)_2$ (M = Co and Ni), $[C_4H_{16}N_3]M(C_2O_4)_2(NO_3).2H_2O$ (M = Cu and Ni) and $(C_2N_2H_{10})[Mg(H_2O)_2(C_2O_4)_2]$. Three other compounds contain a mixed phase based on phosphite and oxalate $[M(N_2H_5)(H_2PO_3)_3]$ with (M = Cu and Zn) and $[Ni(N_2H_5)_2(C_2O_4)_2].2H_2O$, while the three others compounds are coordination complexes of Nickel or Copper and diethylenetriamine : $[Ni(C_4H_{13}N_3)_2](NO_3)_2$, $[Ni(C_4H_{13}N_3)_2]Cl_2.H_2O$ and $[Cu_2(C_4H_{13}N_3)_2(C_2O_4)](NO_3)_3$. The first and second part of our thesis deals with the synthesis and characterization of eight proton transfer compounds. The characterization is performed by means of single-crystal X-ray diffraction, FTIR spectroscopy, and thermal analysis. Indeed, the structural characterization of the elaborated materials provided detailed information on the different inter- and intramolecular hydrogen bonds which mainly ensure the cohesion of the diverse entities within the crystal network. The catalytic activity results reveal that both phosphite and oxalate systems show promising efficiency in converting methylene blue dye and reducing nitrophenol isomers. Magnetic properties have been also studied on two oxalate-based materials. The third part covers the study of three elaborated coordination complexes. They have been characterized by single-crystal X-ray diffraction, FTIR spectroscopy, ATG/DSC, UV-Visible spectroscopy, and scanning electron microscopy (SEM). The antioxidant activity was performed by DPPH, FRAP, and PM tests, while the structural study was conducted by a computational study and an analysis of the Hirshfeld surface around the molecular structures.

Key Words:

Phosphites, Oxalates, coordination complexes, hybrid inorganic-organic materials, proton transfer compounds, FTIR spectroscopy, ATD/DSC, UV-visible, X-ray diffraction, magnetism, antioxidant properties, catalytic activity, Hirshfeld surface, DFT computations.