

CENTRE D'ETUDES DOCTORALES «SCIENCES ET TECHNIQUES ET SCIENCES MÉDICALES »

مركز الدكتوراء « العابوء والتقنيات » هايونيات العربية »

AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mr ZERROUK Mohammed Soutiendra : le Samedi 01/11/2025 à 10H00 Lieu : FSDM – Centre Visioconférence

Une thèse intitulée:

« Synthèse, Caractérisation Structurale et Etude Physicochimique de Nouveaux Matériaux Mixtes & Hybrides Organique-Inorganique à Base de Phosphates et des Métaux de Transition et Leurs Applications »

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
KHALDI Mohammed	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Président
EL KADIB Abdelkrim	Université Euro-méditerranéenne, Fès	PES	Rapporteur
ALAOUI TAHIRI Abdelaaziz	Faculté Polydisciplinaire, Safi	МСН	Rapporteur
OUDGHIRI HASSANI Hicham	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	МСН	Rapporteur
OUAMMOU Abdelkrim	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Examinateur
BOUAYAD Asmae	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	МСН	Examinateur
LACHKAR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Invité
OUARSAL Rachid	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



CENTRE D'ETUDES DOCTORALES «SCIENCES ET TECHNIQUES ET SCIENCES MÉDICALES »

مركز الدكتوراء « الطبية» هايقنبإيته والتقنبإية

Résumé:

Le présent rapport expose la synthèse de matériaux à base de phosphate obtenus par une technique d'évaporation lente, conduisant à la formation de composés hybrides organiquesinorganiques ainsi que de phases purement inorganiques bien cristallisées, confirmés par diffraction des rayons X sur monocristal et poudre. Les matériaux hybrides, qui intègrent des fragments organiques fonctionnels dans des structures inorganiques à base de phosphate, présentent des morphologies sur mesure, des surfaces spécifiques élevées, une stabilité thermique améliorée et des fonctionnalités synergiques, comme le montrent les analyses FTIR, SEM-EDS, TGA-DTA. Ces hybrides ont permis d'obtenir une inhibition exceptionnelle de la corrosion dans des environnements acides grâce à des films organiques-inorganiques protecteurs et une efficacité catalytique élevée dans la conversion redox sélective des isomères d'aminophénol, la cinétique confirmant l'existence de sites actifs bifonctionnels et un transfert d'électrons rapide. Les phosphates purement inorganiques, caractérisés par DRX, FTIR, TGA-DTA, SEM-EDX et BET, présentaient une cristallinité, une morphologie et une porosité définies, permettant une forte adsorption du colorant bleu de méthylène dans l'eau. La modélisation isotherme, la cinétique et les analyses thermodynamiques ont permis de quantifier l'efficacité d'élimination, Parallèlement, les simulations basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ont permis de clarifier, à l'échelle atomique, les mécanismes d'interaction entre les espèces adsorbées et la surface du matériau, mettant en évidence le rôle des groupes hydroxyles, des atomes d'oxygène des phosphates et des centres métalliques à travers des liaisons hydrogène et des interactions électrostatiques. En conclusion, ces travaux mettent en évidence la multifonctionnalité des systèmes à base de phosphate, démontrant comment la combinaison de la synthèse, de la caractérisation avancée et de la modélisation théorique permet une conception rationnelle de matériaux destinés à la réduction de la corrosion, à la catalyse et à la remédiation environnementale.

Mots clés:

Matériaux à base de phosphate, Matériaux hybrides, Diffraction des rayons X sur monocristal, Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier, Analyse thermique, Inhibition de la corrosion, Activité catalytique, Adsorption, Théorie fonctionnelle de la densité.



CENTRE D'ETUDES DOCTORALES «SCIENCES ET TECHNIQUES ET SCIENCES MÉDICALES »

مركز الدكتوراة « الطرية» والتقنيات

SYNTHESIS, STRUCTURAL CHARACTERIZATION, AND PHYSICOCHEMICAL STUDY OF NEW MIXED AND HYBRID ORGANIC-INORGANIC MATERIALS BASED ON PHOSPHATES AND TRANSITION METALS AND THEIR APPLICATIONS.

Abstract:

This thesis demonstrates the synthesis of phosphate-based materials using a slow evaporation technique, forming well-crystalline hybrid organic-inorganic and purely inorganic compounds confirmed by single crystal and powder X-ray diffraction. Hybrid materials, incorporating functional organic moieties into inorganic phosphate frameworks, exhibited tailored morphologies, high surface areas, enhanced thermal stability, and synergistic functionalities through FTIR, SEM-EDS, TGA-DTA, and BET analysis. These hybrids achieved exceptional corrosion inhibition in acidic environments via protective organic-inorganic films and high catalytic efficiency in the selective redox conversion of aminophenol isomers, with kinetics confirming bifunctional active sites and rapid electron transfer. Purely inorganic phosphates, characterized via DRX, FTIR, TGA-DTA, SEM-EDX, and BET, displayed defined crystallinity, morphology, and porosity, enabling high methylene blue dye adsorption from water. Isotherm modeling, kinetics, and thermodynamic analyses quantified removal efficiency, in parallel, simulations based on density functional theory (DFT) provided atomicscale insights into the interaction mechanisms between the adsorbed species and the material surface, highlighting the role of surface hydroxyl groups, phosphate oxygen atoms, and metal centers through hydrogen bonding and electrostatic interactions. In conclusion, this work highlights the multifunctionality of phosphate-based systems, demonstrating how the integration of synthesis, advanced characterization, and theoretical modeling enables the rational design of materials for corrosion reduction, catalysis, and environmental remediation.

Key Words:

Phosphate-based materials, Hybrid materials, Single crystal X-ray diffraction, Fourier transform infrared spectroscopy, Thermal analysis, Corrosion inhibition, Catalytic activity, Adsorption, Density functional theory.