



Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques de l'Ingénieur

AVIS DE SOUTENANCE

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

Mme : HAFSAE LAMSAF

Discipline : Chimie des Matériaux

Spécialité : Sciences et Génie des Matériaux et des procédés

Sujet de la thèse : Elaboration de nouveaux matériaux polyphosphométalliques inorganiques et organiques : Etude structurales, caractérisations spectroscopiques et propriétés magnétiques.

Formation Doctorale : Sciences et Génie de la matière, de la Terre et de la Vie.

Thèse présentée et soutenue le samedi 28 novembre 2020 à 10h au centre de Conférence devant le jury composé de :

Nom Prénom	Titre	Etablissement	
Noureddine IDRISSE KANDRI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Président
Ali DRIOUICHE	PES	Faculté des Sciences Agadir	Rapporteur
Mohamed MBARKI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Beni Mellal	Rapporteur
El Hassan AQACHMAR	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mehraz de Fès	Rapporteur
Maria Benilde Faria de OLIVEIRA E COSTA	PES	Université Coimbra Portugal	Examineur
Jamil TOYIR	PES	Faculté Polydisciplinaire de Taza	Examineur
El Houssine El GHADRAOUI Abdellah OULMEKKI	PES PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Directeurs de thèse

Laboratoire d'accueil : Laboratoire des Procédés, Matériaux et Environnement.

Etablissement : Faculté des Sciences et Techniques de Fès



Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques de l'Ingénieur

Titre de la thèse : Elaboration de nouveaux matériaux polyphosphométalliques inorganiques et organiques : Etude structurales, caractérisations spectroscopiques et propriétés magnétiques.

Nom du candidat : HAFSAE LAMSAF

Spécialité : Sciences et Génie des Matériaux et des procédés

Résumé de la thèse

L'objectif de ce travail est la synthèse et la caractérisation physico-chimique de nouveaux pyrophosphates de fer, à base de métaux de lourds (Zinc et/ou cuivre) ainsi que la synthèse d'un nouvel organo-phosphate de type acide phosphonique. Ces nouveaux composés phosphatés ont montré des propriétés intéressantes au niveau structural et magnétisme.

Deux nouveaux diphosphates à base de zinc (II)-fer (III) et zinc (II)-Cuivre (II)-fer(III), de formules $Zn^{2+}Fe^{3+}_2(P_2O_7)_2$ et $Zn^{2+}_{0.5}Cu^{2+}_{0.5}Fe^{3+}_2(P_2O_7)_2$ ont été préparés par voie sèche et caractérisés par plusieurs techniques spectroscopiques. L'analyse par la diffraction des rayons x de la poudre du diphosphate synthétisé a révélé qu'ils sont iso-structuraux avec le diphosphate de fer(II)-fer(III), $Fe^{2+}Fe^{3+}_2(P_2O_7)_2$, cristallisant dans une symétrie orthorhombique dans le groupe d'espace Pnma. Des spectroscopies infrarouges et Raman ont également confirmé ces résultats. D'autres propriétés physiques ont été caractérisées à l'aide de la spectroscopie Mössbauer et des mesures du magnétomètre à vibration, ce qui a montré que ces nouveaux phosphates avec des ions Fe^{3+} dans la coordination VI a un comportement paramagnétique à température ambiante. Les mesures de magnétométrie ont montré qu'en dessous de $T_N = 5.6$ (1), $Zn^{2+}Fe^{3+}_2(P_2O_7)_2$ devient antiferromagnétique, environ 3K, est attribué à $Zn^{2+}_{0.5}Cu^{2+}_{0.5}Fe^{3+}_2(P_2O_7)_2$. Un troisième nouveau diphosphate $Zn_5Fe_2(P_2O_7)_4$ a été synthétisé et caractérisé. La DRX a montré qui est isostructural avec $Fe_5Fe_2(P_2O_7)_4$, en cristallisant dans un système orthorhombique du groupe d'espace C222₁. Aussi, les autres techniques spectroscopiques (IR, Raman, EDXA) ont confirmé la présence du groupement fonctionnel POP et tous les éléments chimiques du composé. Alors que, la mesure magnétique présente le comportement paramagnétique à la température de Néel est $T_N = 15,4$ (1) K.

D'autre part, une synthèse d'un nouvel acide phosphonique, l'acide phosphonique (2-oxo-2- (thiophén-2-yl) éthyl) (OTEPA), a été rapportée, et les structures moléculaires et cristallines du composé ont été étudiées en utilisant plusieurs méthodes expérimentales spectroscopique et du calcul théorique. L'espace conformationnel d'OTEPA a été étudié et les conformères pertinents expérimentalement caractérisés structurellement et spectroscopiquement (Spectroscopies infrarouge et Raman; cristallographie par rayons X monocristallins), complétée par des calculs (pour la molécule isolée) entrepris à des niveaux d'approximation à la fois mécanique et moléculaire, en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) avec la méthode (B3LYP) / 6-311 ++ G (d, p). Nous avons trouvé que dans les conformères d'énergie inférieure d'OTEPA, une liaison H intramoléculaire existe entre l'un des groupes OH du fragment d'acide phosphorique et l'atome d'oxygène du carbonyle. Les spectres infrarouges des molécules monomères du composé isolé dans une matrice d'argon solide à basse température et du cristal du composé pur ont également été étudiés et assignés, ainsi que le spectre Raman du composé cristallin. Ce nouvel acide phosphonique peut être une base d'autres investigations des complexes avec d'autres métaux.

Mots clés : M-P-O, pyrophosphates mixtes, acide phosphonique, monocristal, structure cristalline DRX, IR, EDS, Raman, NMR, Mössbauer, VSM, DFT