

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne Démocratique et Populaire

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université 20 Août 1955- Skikda

Faculté de technologie

Département de Génie Mécanique

Réf : D 012120025 D



جامعة 20 أوت 1955-سكيكدة

كلية التكنولوجيا

قسم الهندسة الميكانيكية

المرجع : D 012120025 D

Thèse présentée en vue de l'obtention

Du diplôme de

Doctorat en Mécanique des Matériaux et des Surfaces

Intitulée :

**Synthèse et caractérisation de nouveaux matériaux hybrides
à base de métaux de transition**

Présentée par :

Nacira MOHAMEDI

Soutenue publiquement le2020

Devant le jury composé de:

Président	Abderrezak Metatla	Professeur	Université du 20 Août 1955-Skikda
Directrice de thèse	Sihem Boufas	Professeur	Université du 20 Août 1955-Skikda
Co-directeur de thèse	Messaoud Legouera	Professeur	Université du 20 Août 1955-Skikda
Examinatrice	Amel Djedouani	Professeur	Université de Constantine 3
Examinatrice	Nardjes Mouas	Maître de Conférences (A)	Université de Constantine 1
Examineur	Salah Amroune	Maître de Conférences (A)	Université de Tébessa
Examineur	Ahmed Belaadi	Maître de Conférences (A)	Université du 20 Août 1955-Skikda
Invité	Hamza Allal	Maître de Conférences (B)	Université du 20 Août 1955-Skikda

Résumé :

Des composés hybrides à base de métaux de transition ont été synthétisés par voie aqueuse, ils sont de forme cristalline. Ces derniers sont caractérisés par la diffraction des RX et par d'autres différentes méthodes spectrales telles qu'Infra rouge (IR), Raman, l'analyse Ultraviolet Visible (UV-Vis) et la Microscopie électronique à balayage (MEB).

L'étude computationnelle de la modélisation moléculaire par la Théorie de la Densité Fonctionnelle (DFT), nous a permis de déterminer les propriétés structurales (les structures électroniques optimisées, les paramètres géométriques des complexes), les fréquences vibratoires théoriques et les propriétés électroniques de la structure moléculaire de ces systèmes telles que : la dureté (η), la mollesse chimique (σ), le gap énergétique (ΔE), le potentiel d'ionisation (I) et l'affinité électronique (A), et leurs stabilité.

Au cours de ce travail nous avons obtenus deux nouveaux composés hybrides:

1-[Cu ((NH₂)₂ CO)₂Cl₂] Bis (chloro-urée- *kO*)cuivre (II).

2-[Cd₂ (C₆N₃O₂H₉)₂Cl₆]di- μ -chloro-bis (dichloro-L- histidinium- *kO*)cadmium (II).

Mots clés : Matériaux hybride, monocristal, rayon X, DFT, Métaux de transition.

Abstract:

Hybrid compounds based on transition metals have been synthesized by the aqueous method, they are of crystalline form. They are characterized by x- ray diffraction and other different methods such as Infra-red (IR), Raman, Ultra-Violet analysis (UV-Vis) and scanning electron microscopy (SEM).

The computational study of molecular modelling by the Functional Density Theory (FDT), allowed us to determine the structural properties (the optimized electronic structures, the geometric parameters of the complexes), the theoretical vibrational frequencies and the electronic properties of the molecular structure of these systems such as: hardness(η), chemical softness (σ), the energy gap (ΔE), ionization potential (I) and electronic affinity (A), and their stability.

During this work we obtained two new hybrid compounds:

1-[Cu ((NH₂)₂ CO)₂Cl₂] Bis (chloro-urée- *kO*)cuivre (II).

2-[Cd₂ (C₆N₃O₂H₉)₂Cl₆]di- μ -chloro-bis (dichloro-L- histidinium- *kO*) cadmium (II).

Key words: Hybrid materials, Single crystal, X-ray, FDT, Transition metals.

ملخص :

مركبات هجينة ذات قواعد معادن انتقالية تم تحضيرها عن طريق الاماهة, هذه المركبات لها شكل بلوري. تمت دراستها بطريقة الأشعة السينية (RX) و طرق طيفية أخرى مختلفة مثل الأشعة تحت الحمراء (IR), اشعة رمان و الأشعة فوق البنفسجية (UV-Vis) الماسح الإلكتروني (MEB).

الدراسة الحسابية النمذجة الجزيئية لهذه المركبات الهجينة باستعمال نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) سمحت لنا بتحديد الخصائص البنوية (البنية الإلكترونية المحسنة, الثوابت الهندسية) و الترددات الاهتزازية النظرية و كذلك الخصائص الإلكترونية للبنية الجزيئية لهذه الانظمة مثل الصلابة (η) و الليونة الكيميائية (σ), طاقة التأين (I), التالف الإلكتروني (A) واستقرارها.

خلال هذا العمل ، حصلنا مركبين هجينين جديدين :

1-[Cu ((NH₂)₂ CO)₂Cl₂]Bis (chloro-urée-*kO*)cuivre (II).

2-[Cd₂ (C₆N₃O₂H₉)₂Cl₆]di- μ -chloro-bis (dichloro-L- histidinium-*kO*)cadmium (II).

الكلمات المفتاحية : المعادن الانتقالية, حيود الأشعة السينية, المواد الهجينة, نظرية الكثافة الوظيفية, بلورة .