

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE LARBI BEN M'HIDI (OUM EL BOUAGHI)
DEPARTEMENT SCIENCES DE LA MATIERE

N° d'ordre : M...../2013

MEMOIRE

Pour l'obtention du diplôme de Master en chimie

Option : Chimie de matériaux

**CRISTALLOCHIMIE ET INTERACTIONS
INTERATOMIQUES DANS UN COMPOSÉ HYBRIDE
A BASE D'INDIUM**

Présenté Par : **El-Atra BOUZGHAIA**

Sous la direction de : **Dr. Sofiane BOUACIDA**

Soutenu le : 18/06/2013

Devant le jury de soutenance suivant:

Pr. Bachir ZOUCOUNE

Professeur

Université Larbi ben M'hidi - Oum El Bouaghi

Pr. Fadila BERRAH

Professeur

Université Larbi ben M'hidi - Oum El Bouaghi

Dr. Sofiane BOUACIDA

Maître de Conférences A

Université Larbi ben M'hidi - Oum El Bouaghi

Dédicace

Je dédie ce mémoire :

A ma mère : lumière de ma vie

Elle m'a soutenu tout au long de ma vie dans les moments difficiles, dans mes études, Elle m'a transmis la passion et la motivation pour réussir.

A mon frère et mes sœurs

A tous mes amis

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé sous la direction du **Dr. Sofiane Bouacida** qui m'a fait profiter de sa compétence et de ses conseils, je le remercie d'avoir toujours été à mon écoute.

J'adresse mes vifs remerciements à **Professeur Bachir Zouhoune** à l'université Larbi ben M'hidi d'Oum El Bouaghi, et **Professeur Fadila Berrah** à l'université Larbi ben M'hidi d'Oum El Bouaghi pour avoir accepté de juger ce travail.

Je tiens à remercier Madame **Rafika Bouchene** Maître de conférence à l'Université Larbi ben M'hidi d'Oum El Bouaghi. Elle a suivi mon travail, m'a toujours bien conseillé.

J'associe mes remerciements à toute personne qui a participé de loin ou de près à ce travail.

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE	01
PARTIE THEORIQUE	
I- Généralité sur les rayons X	03
I-1- Historique	03
I-2- Nature des rayons X	03
I-3- Caractéristiques des rayons X	04
I-4- Production des rayons X	04
I-5- Interaction rayon X-matière	05
I-5-a- L'effet photoélectrique	05
I-5-b- L'effet Compton	05
I-6- Diffraction des rayons X	06
I-6-a- Principe	06
I-6-b- Diffractomètre Nonius Kappa CCD	07
I-7- Principe de la détermination structurale	08
I-7-a- Introduction	08
I-7-b- Enregistrement des données	09
I-7-c- Réduction des données et correction d'absorption	09
I-7-d- Résolution structurale	09
I-7-e- Affinement des structures	10
II- Les liaisons hydrogène	12
II-1- Introduction	12
II-2- Origine de la formation des liaisons hydrogène	12
II-3- Importance de la liaison H	13
II-4- Différentes catégories de la liaison hydrogène	13

II-4-a- Liaisons hydrogène fortes	14
II-4-b- Liaisons hydrogène modérées	14
II-4-c- Liaisons hydrogène faibles	14
II-5- Caractéristiques des liaisons hydrogène	15
II-5-a- Liaison hydrogène à trois centres	15
II-5-b- Liaison hydrogène chélatée	15
II-5-c- Liaison hydrogène bifurquée	16
II-5-d- Liaison d'hydrogène à quatre centres	16
II-5-e- Liaison hydrogène Tandem	16
II-6- Construction des graphes des liaisons hydrogène (Théorie de Bernstein)	17
III-Chimie des bases azotées et de l'indium	19
III-1- Introduction	19
III-2- Relation entre les bases azotés et les métaux	19
III-3- Définition d'indium	20
Bibliographie	21

PARTIE EXPERIMENTALE

I- Introduction	24
II- Propriétés de cytosine	24
III- Mode opératoire	25
IV- Etude cristallographique	25
IV- 1- Enregistrement des intensités	25
IV- 2- Résolution et affinement de la structure	27
V- Description de la structure	27
V-1- Unité asymétrique	29
V-2- La partie anionique	29
V-3- La partie cationique	31

VI- Les liaisons hydrogène	33
VI-1-Types de liaisons hydrogène	33
VI-1-a- Liaison cation-cation	33
VI-1-b- Liaisons anion-anion	34
VI-1-c- Liaisons cation-anion	36
VII- Interaction π - π	37
VIII- Analyse des entités	38
VIII-1- Analyse de l'anion	38
VIII-2- Analyse des cations	39
VIII-2-a- Cation A	39
VIII-2-b- Cation B	40
Bibliographie	42
CONCLUSION GENERALE	44
ANNEXE	45

INTRODUCTION GÉNÉRALE

La science des matériaux repose sur la relation entre les propriétés, la morphologie structurale et la mise en œuvre des matériaux qui constituent les objets qui nous entourent (métaux, polymères, semi-conducteurs, céramiques, composites, etc.). Elle est au cœur de beaucoup des grandes révolutions techniques, particulièrement depuis un siècle, tels que l'électronique, l'aéronautique, les énergies renouvelables, l'automobile...

Les matériaux hybrides "organique-inorganique" sont l'objet d'un intérêt immense [1,5], permettant d'allier à la fois certaines propriétés d'un matériau inorganique (ou d'une molécule), et certaines propriétés d'un polymère (ou d'une molécule organique). Cette symbiose entre deux mondes de la chimie trop longtemps considérés comme antagonistes peut aussi amener à des propriétés complètement nouvelles, et ouvre un vaste champ d'investigations pour le chimiste.

Les applications de ces matériaux couvrent des champs très variés telles que les propriétés électriques [6,7] magnétiques [8,9], optiques [10] électroluminescence [11] et ionique [12,14].

Au cours de notre investigation dans ce travail de master, nous sommes intéressés aux composés hybrides à base d'halogénures d'indium comme partie minérale et aux composés à base azotée en tant que matrice organique. La préparation et la caractérisation se fait par la technique de diffraction des rayons X sur un monocristal. Les résultats de ce travail sont présentés sous forme de deux parties:

-Partie théorique : nous avons présenté des généralités sur les RX, les liaisons hydrogène et les bases azotées.

-Partie expérimentale : nous avons présenté la synthèse, l'étude structurale, l'analyse des liaisons hydrogène

Et nous avons terminé par une conclusion générale.

Bibliographie :

- [1]- Mazeaud A, Dromzee Y & Thouvenot R. (2000). *Inorg.Chem.* 39. 6152-6158.
- [2]- Soghomonian V, Chem Q, Haushalter R. C & Zubieta J. (1995). *Angew. Chem.* 107.229-232.
- [3]- Mayer C. R, Herson P & Thouvenot R. (1999). *Inorg. Chem.* 38.4154163.
- [4]- Siegel R. K. O, Freisinger E, Metzger S & Lippert B. (1998). *J.Am. Chem. Soc.* 120.12000-12007.
- [5]- Baker L.J, Bowmaker G. A, Healy P.C, Skelton B. W & White A. H. (1992). *J. Chem. Soc. Dalton Tras.* 989-998.
- [6]- Kagan C. R, Mitzi D. B. & Dimitrakopoulos C. D. (1999). *Science.* 286. 945-947.
- [7]- Knutson J. L, Martin J. D & Mitzi D. B. (2005). *Inorg. Chem.* 44. 4699-4705.
- [8]- Sekine T, Okuno T & Awaga K. (1996). *Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology. Section A* 279 65-72.
- [9]- Aruta C, Licci F, Zappettini A, Bolzoni F, Rastelli F, Ferro P & Besagni T. (2005). *Appl. Phys. A.* 81.
- [10]- Mitzi D. B, Dimitrakopoulos C. D & Kosbar L. L. (2001).*Chem*963-968. *Mater.* 13.3728-3740.
- [11]- Chondroudīs K. & Mitzi D. B. (1999). *Chem. Mater.* 11.3028-3030.
- [12]- Tominaga Y, Ohno H. (2000).*Electrochimica Acta* 45(19) .3081-3086.
- [13]- Di Noto V, Fauri M, Vittadello M, Lavina S & Biscazzo S. (2001). *Electrochimica Acta* 46.1587-1594.
- [14]- Sawa H & Shimada Y. (2004) *Electrochemistry* 72(2). 111-116.

PARTIE THEORIQUE

I- Généralité sur les rayons X

I-1- Historique:

Découverts en 1895 par le physicien Allemand Röntgen, les rayons X sont à la base de différentes techniques d'analyse comme la radiographie, la spectroscopie et la diffractométrie. Ces radiations électromagnétiques ont une longueur d'onde de l'ordre de l'Angström ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$).

Un cristal est un agencement d'atomes, d'ions ou de molécules, avec un motif se répétant périodiquement dans les trois dimensions. Les distances interatomiques sont de l'ordre de l'Angström, du même ordre de grandeur que les longueurs d'onde des rayons X : un cristal constitue donc un réseau trois dimensions qui peut diffracter les rayons X.

En 1913, William Lawrence Bragg et son père Sir William Henri Bragg utilisèrent ce rayonnement pour déterminer la structure cristalline de NaCl puis celles de nombreux autres sels métalliques. Ils reçurent le prix Nobel de Physique en 1915 pour leurs contributions à l'analyse de la structure cristalline au moyen des rayons X [1].

I-2- Nature des rayons X :

Les rayonnements X sont des rayonnements électromagnétiques de très courte longueur d'onde et donc très pénétrants [2]. Ils se déplacent dans le vide à la vitesse de la lumière c . Un rayonnement (ou une onde) électromagnétique consiste en la propagation d'un champ électrique \vec{E} et d'un champ magnétique \vec{B} perpendiculaires. Ces champs oscillent en phase et sont eux-mêmes perpendiculaires à la direction de propagation.

Une onde électromagnétique sinusoïdale est caractérisée par sa fréquence de vibration U (ou par sa période $T = 1 / U$) et par son amplitude. La longueur d'onde est la distance que parcourt l'onde pendant une période, soit $\lambda = c T = c / U$. En général, un rayonnement électromagnétique est constitué par la superposition de rayonnements de fréquences différentes. Certaines interactions du rayonnement électromagnétique avec la matière, comme l'effet photoélectrique, ne sont pas explicables dans le cadre du modèle ondulatoire, mais peuvent s'interpréter si l'on considère le rayonnement comme un flux discontinu de paquets d'énergie (ou quanta d'énergie) appelés photons. Chaque photon transporte, à la vitesse de la lumière, un quantum d'énergie E bien déterminée, liée à la fréquence ν du rayonnement par la relation de Planck-Einstein :

$E = h \nu$; h est la constante de Planck : $h = 6,6236 \cdot 10^{-34}$.

Les rayonnements électromagnétiques se présentent donc sous les deux aspects complémentaires, ondulatoires et corpusculaires. L'aspect corpusculaire devient marqué lorsque la longueur d'onde du rayonnement est plus petite que la dimension des objets avec lequel celui-ci interagit [3]. Les rayons X utilisés sont plus courte de longueur d'onde (de 0,05 à 1Å) et la fréquence étant environ 1000 fois celle de rayons lumineux, le photon X possède une énergie bien plus grande que le photon de lumière [4].

I-3- Caractéristiques des rayons X :

- ✓ Invisibles, Inaudibles.
- ✓ Se déplacent à la vitesse de la lumière 3.10^8ms^{-1} .
- ✓ Se déplacent en ligne droite ; se caractérisent par une fréquence U exprimée en Hz ou s^{-1} .
- ✓ Une période $T = 1/ U$ exprimée en s
- ✓ Une longueur d'onde λ représentant la distance parcourue en une période
- ✓ Transportent de l'énergie [5].

I-4- Production des rayons X :

Les tubes à rayons X (Figure 1) fonctionnent de la manière suivante. Dans une enceinte de verre où règne un vide poussé, des électrons sont émis par un filament dans lequel circule un courant électrique. Ceux-ci sont accélérés en direction d'une anode par un champ électrique créé par une différence de potentiel élevée (généralement de 10 à 150 kV) entre le filament qui sert de cathode et l'anode. Ces électrons entrent en collision avec la cible que constitue le métal de l'anode. Les électrons, se déplaçant à une vitesse très élevée, ont une énergie cinétique suffisante pour perturber les couches électroniques internes des atomes de la cible. Ces atomes, dans un état excités, vont alors émettre des rayons X en retournant à leur état fondamental.

L'énergie cinétique des électrons incidents est déterminée par la tension d'accélération ΔU :

$$E_{\text{cin}} = e \Delta U.$$

Dans la relation précédente, e correspond à la charge électrique de l'électron ($e = -1,602. 10^{-19}\text{C}$).

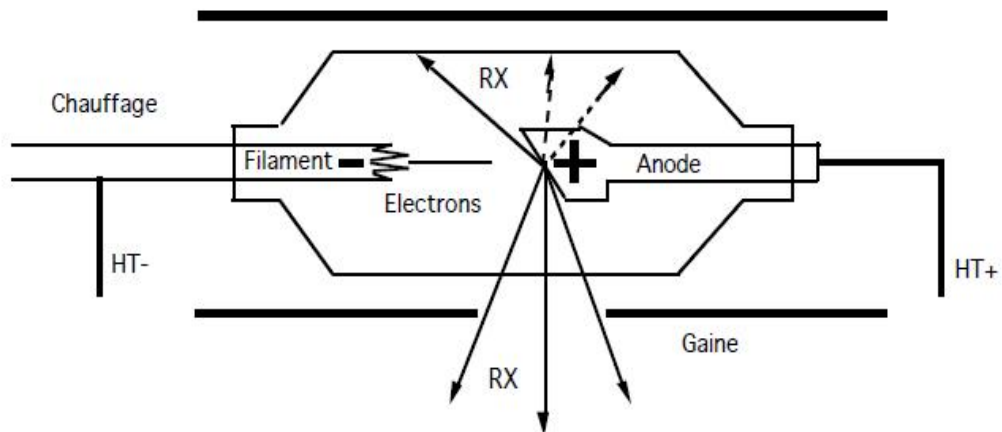


Figure 1 : Schéma d'un tube à rayons X

HT : haute tension d'accélération.

RX : rayons X émis par l'anode.

L'interaction des électrons rapides avec la matière se traduit globalement par un ralentissement des électrons, et l'énergie cinétique perdue se manifeste sous différentes formes. Une fraction importante de cette énergie ($\approx 99\%$) est convertie en chaleur et augmente l'énergie interne de la substance. Le reste ($\approx 1\%$) est rayonné hors de la substance sous forme de photons X.

I-5- Interaction rayon X-matière :

Deux types d'interactions entre photon X et matière sont envisageables : l'effet photoélectrique et l'effet Compton.

I-5-a- L'effet photoélectrique :

Cela consiste en l'arrachement d'un électron de la couche profonde d'un atome. L'effet photoélectrique est négligeable aux hautes énergies parce que quand l'énergie de photon est nettement supérieure à l'énergie des électrons de la couche K, il devient impossible au photon X de donner toute son énergie à un électron [6].

I-5-b- L'effet Compton :

Il s'agit d'une diffusion du photon incident associé à une perte d'énergie [7].

I-6- Diffraction des rayons X :

I-6-a- Principe :

La diffraction des rayons X est une technique très puissante car elle permet de déterminer les positions des atomes dans un cristal [1]. Les techniques utilisant la diffraction des rayons X sont universellement utilisées pour identifier la nature chimique et la structure des composés cristallisés. En effet, ces techniques ne s'appliquent qu'à des produits (roches, cristaux, minéraux, pigments, argiles...) présentant les caractéristiques de l'état cristallin, c'est-à-dire un arrangement périodique tridimensionnel des atomes. Ces derniers s'organisent en plans réticulaires plus ou moins denses qui sont désignés par leurs indices de Miller (h, k, l) dans un système de repère de l'espace. Ces techniques permettant aussi de distinguer les produits cristallisés des produits amorphes (verres..) les quels ne donnent pas de diffraction de rayons X.

Pour observer une intensité diffractée dans la direction « θ », il faut que les interférences entre les rayons successifs soient constructives, c'est-à-dire que le déphasage entre les rayons successifs doit être multiple de 2θ . Ceci revient à dire que la différence de marche entre deux rayons successifs (la différence de longueur de trajet) doit être un multiple de leur longueur d'onde (Figure 2).

La relation de Bragg (avec n: entier naturel non nul) : $2d(hkl) \sin \theta = n \lambda$

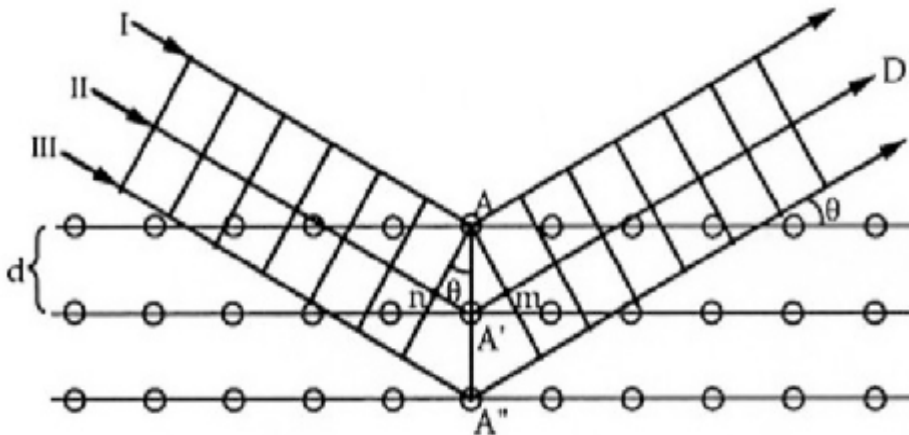


Figure 2 : Schéma de la diffraction des rayons X par un cristal.

Un cristal peut donc réfléchir les rayons X que sous certaines incidences: on parle de réflexion sélective. On peut exprimer cette relation dans le réseau réciproque; si on considère le nœud correspondant à la nième réflexion hkl, il faut que $d^*(hkl) \leq 2/\lambda$. La sphère centrée sur l'origine «E» du réseau réciproque et de rayon $2/\lambda$, est la sphère de résolution. La sphère passant par «E», de rayon $1/\lambda$ et centrée sur l'origine «O» des

vecteurs d'onde est «la sphère d'Ewald» (Figure 3). Pour qu'il ait réflexion il faut que le nœud considéré soit situé sur la surface de la sphère d'Ewald. Au cours d'une mesure usuelle, il faut que toute la sphère de résolution soit balayée [8].

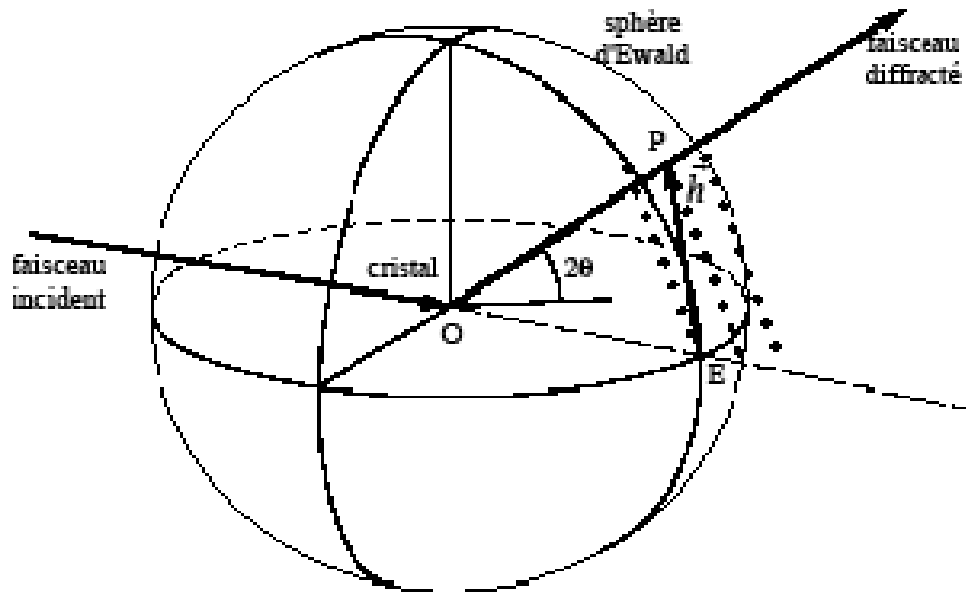


Figure 3 : La sphère d'Ewald permet une représentation simple de la condition de diffraction

I-6-b- Diffractomètre Nonius Kappa CCD :

Le diffractomètre kappa CCD à 4-cercles Bruker (Nonius) est dédié à l'étude de monocristaux. Cependant il permet aussi l'étude des textures de matériaux polycristallins[9].

Après la synthèse des produits, des cristaux ont été utilisés pour l'étude cristallographique et la détermination structurale, à l'aide de données de diffraction acquise avec un diffractomètre quatre cercles Kappa CCD (Charge Coupled Device) (Figure 4).

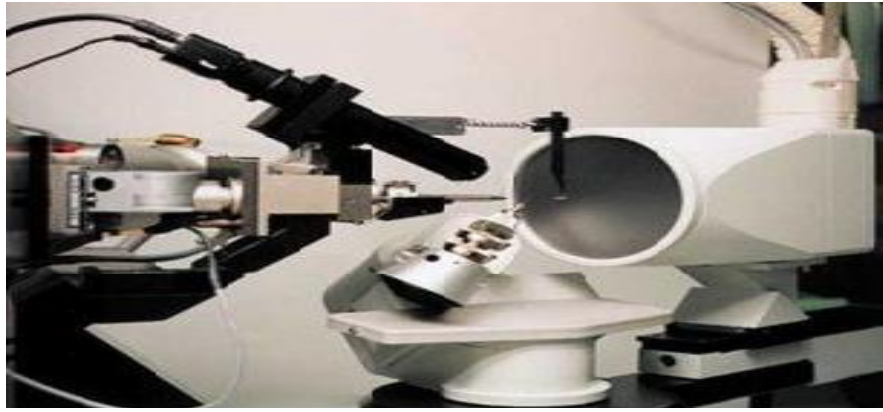


Figure 4 : *Diffractomètre à rayons X de géométrie Kappa CCD.*

Cet appareil de géométrie Kappa est caractérisé par les quatre éléments :

1. Une source des rayons X.
2. Un monochromateur à lame de graphite.
3. Un goniomètre permettant la rotation du cristal autour des trois axes et le positionnement des plans réticulaires en position de diffraction dans le plan horizontal (plan du détecteur).
4. Un détecteur bidimensionnel de type CCD dont la grande sensibilité permet de mesurer la diffraction de cristaux de petite dimension ($5 \cdot 10^{-3} \text{ mm}^3$) ou possédant un faible pouvoir diffractant [9].

I-7- Principe de la détermination structurale

I-7-a- Introduction :

Déterminer une structure cristalline, c'est pouvoir identifier la nature de chacun des atomes et fixer leurs coordonnées dans la maille élémentaire. Le problème serait simple si on pouvait connaître à la fois les modules des facteurs de structure et leurs phases, rapportées à une origine déterminée. Alors, il suffirait par transformation de Fourier, de calculer la fonction «densité électronique» dans tout le volume de la maille et de localiser chacun des maxima de la fonction. Malheureusement, la seule quantité directement observable est l'intensité diffractée $I(H)$. Par conséquent seuls les modules $|F(H)|$ sont connus, et l'information de phase a été perdue. Déterminer une structure reviendra donc à déterminer les phases des facteurs de structure dont les modules sont connus [4]. Contrairement à la méthode de Patterson qui vise à déterminer un modèle structural sans passer par l'information de phase, les méthodes directes cherchent à retrouver la phase, ou

plus exactement faire des restrictions sur les valeurs possibles de la phase, à partir des intensités mesurées. Les principes généraux de ces méthodes. Elles reposent sur deux propriétés importantes de la densité électronique :

- ▼ La densité électronique est positive en tous points (positivité).
- ▼ La structure est composée d'atomes discrets (atomicité) [10].

I-7-b- Enregistrement des données :

La première étape de l'enregistrement des données de diffraction a consisté à sélectionner un bon cristal, de faible mosaïcité, d'une taille convenable et possédant une morphologie la plus isotrope possible. L'enregistrement des données a été effectué en deux temps, tout d'abord une mesure rapide a permis de déterminer la matrice d'orientation nécessaire pour l'acquisition globale de données, d'obtenir les paramètres de maille, d'apprécier la qualité du cristal et de déterminer les conditions optimales d'enregistrements des données. Ensuite on lance les mesures. Chaque image est enregistrée deux fois afin d'éliminer des rayonnements extérieurs à la mesure ou des décharges accidentelles accumulées sur plusieurs pixels successifs du CCD, et l'image résultante ne contient alors que les valeurs communes des deux images.

I-7-c- Réduction des données et correction d'absorption :

L'acquisition des données a été effectuée par l'intermédiaire du programme COLLECT [10]. Les intensités intégrées et la moyenne des réflexions équivalentes ont été réalisées par les deux programmes SCALEPACK et DENZO [11].

I-7-d- Résolution structurale :

La structure cristalline de composé synthétisé a été résolue par les méthodes directes à l'aide de programme SIR 2002 [12] et SHELXS-97; Les différents paramètres structuraux : positions atomiques, paramètres de déplacement isotropes et les occupations statiques des sites cristallographiques ont été affinés par la méthode des moindres carrés appliquée sur le carré des modules des facteurs de structure, à l'aide du programme SHELXL-97. Les positions des atomes d'hydrogène ont été déterminées par analyse des cartes Fourier différence et calculées géométriquement par l'intermédiaire des programmes CALC-OH [13] ou XHYDEX [14]. Tous ces programmes ont été utilisés par l'intermédiaire de l'interface WinGX [15] (Figure 5). Les représentations structurales ont été réalisées à l'aide des programmes Diamond version 3.1 [16] et Ortep [17].

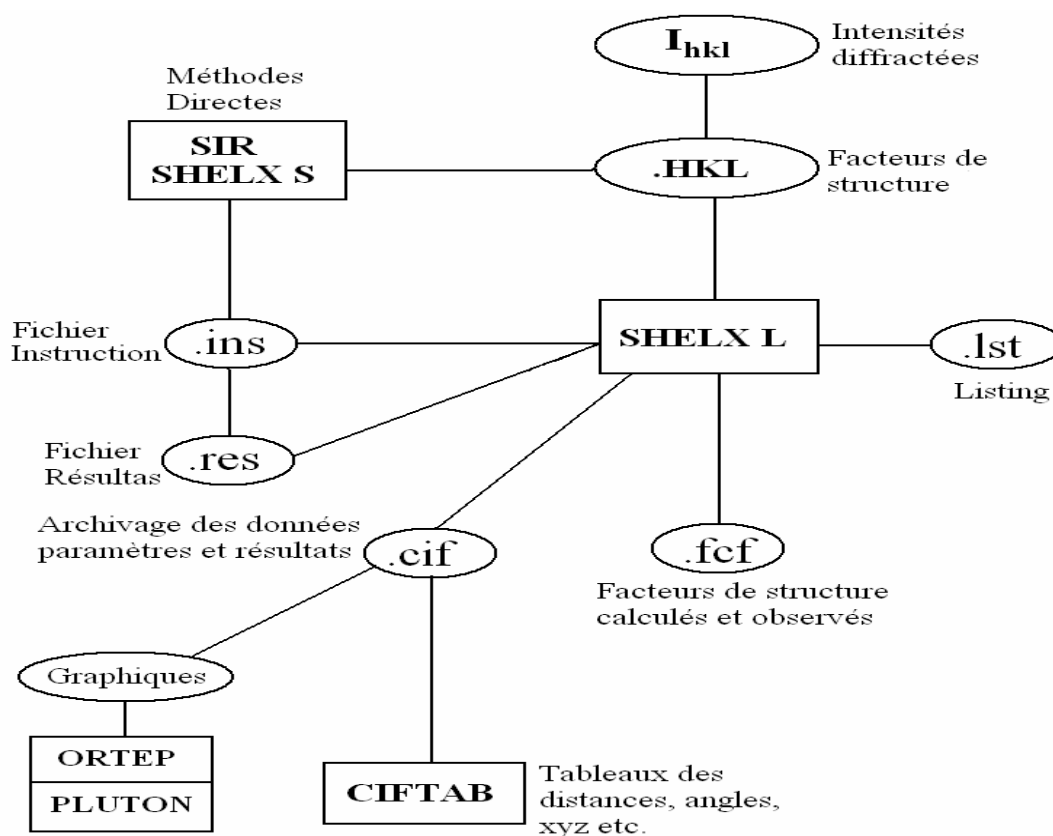


Figure 5 : Organigramme général de détermination structurale par WinGX.

I-7-e- Affinement des structures :

Au cours de l'affinement il est nécessaire d'analyser les résultats. Il faut vérifier que toutes les distances interatomiques et les angles entre les liaisons ont des valeurs plausibles et conformes aux données de la stéréochimie. De même les ellipsoïdes d'agitation thermique doivent avoir des volumes compatibles avec ceux des atomes voisins. L'affinement est réalisé par le programme SHELXL97 [18] qui ajuste les carrés des facteurs $F(hkl)$ par la méthode des moindres carrés. Pour caractériser la confiance que l'on peut accorder à une hypothèse structurale, on utilise les facteurs de reliabilité R et R_w défini par [10] :

$$R = \frac{\sum |F_o| - |F_c|}{\sum |F_o|}$$

$$R_w = \left\{ \frac{\sum [w (F_o^2 - F_c^2)^2]}{\sum [w (F_o^2)^2]} \right\}^{1/2}$$

Où les indices o et c se rapportent aux données observées, et calculées.

La bonne qualité de R et R_w est donnée par S [11]

$$G.O.F. = S = \left\{ \frac{\sum [w (F_o^2 - F_c^2)^2]}{(Nobs - Nvar)} \right\}^{1/2}$$

W_{hkl} : est le poids attribué à la tache de diffraction de vecteur réciproque.

$Nobs$: est le nombre des réflexions.

N_{var} : est le nombre total des paramètres affinés [19].

II- Les liaisons hydrogène

II-1- Introduction :

Les liaisons hydrogène sont l'un des types de liaisons physiques très présentes dans le monde qui nous entoure. C'est grâce aux liaisons hydrogène que l'eau, constituée de toutes petites molécules de H_2O est liquide à température ambiante, C'est elle qui attire entre elles les molécules d'eau et explique la formation de la glace, alors que des molécules de taille similaire ou plus grandes mais sans liaisons hydrogène, comme par exemple celles du méthane, du CO_2 , du propane... conduisent à des substances gazeuses à température ambiante. Les liaisons hydrogène apportent de la cohésion supplémentaire à un corps solide ou liquide, mais elles peuvent être dissociées par un facteur déclenchant comme la température. Vingt fois plus faible que la liaison covalente, mais plus forte que les liaisons de van der Waals. La liaison hydrogène est responsable de la formation des structures des protéines [20] surtout, des liaisons entre les paires de bases de l'ADN [21] ce qui a ouvert une nouvelle branche d'une science connue sous le nom de la biologie structurale. On peut donc la considérer comme la liaison chimique de la vie. Tout comme l'eau est la molécule de la vie. La liaison hydrogène possède un caractère de directivité semblable à celui de la liaison covalente.

II-2- Origine de la formation des liaisons hydrogène :

Les molécules n'ont pas besoin d'être chargées, elles doivent être avant tout polarisées. Pour pouvoir former une liaison hydrogène, il faut un atome électronégatif lié à l'atome d'hydrogène par une liaison covalente polarisée pour former le groupe X-H (X = O, S, N, F) qui est appelé groupe donneur de liaison hydrogène, et un second atome électronégatif qui doit être polarisé négativement et possède une paire d'électron libre, il est appelé accepteur de liaison hydrogène (Y). L'origine de la liaison hydrogène est essentiellement électrostatique et de type dipôle-dipôle [22]. L'hydrogène lié à un atome électronégatif porte une fraction de charge positive qui interagit fortement avec le dipôle produit par l'autre atome électronégatif fonctionnant comme accepteur (Figure 6). Les trois atomes X-H et Y sont alors alignés :

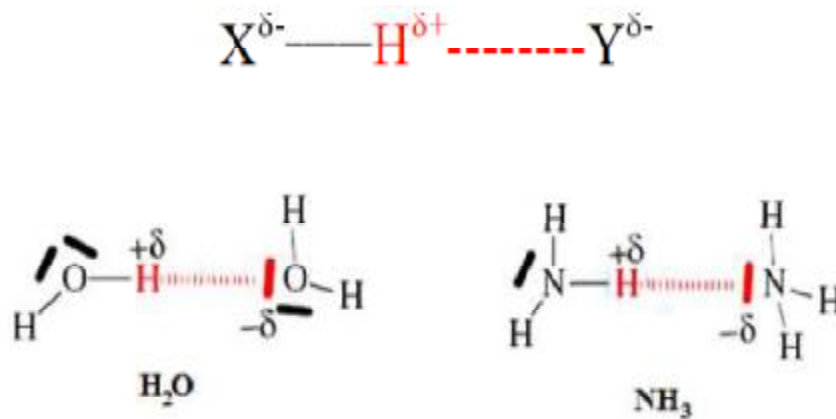


Figure 6 : *Liaison hydrogène.*

La liaison H est un phénomène statistique, à chaque instant les liaisons H peuvent se rompre puis se reforme sans détruire les molécules du milieu.

II-3- Importance de la liaison H :

La force d'une liaison hydrogène est d'autant plus grande que le donneur est plus électro-négatif. Les liaisons hydrogène sont présentes dans de nombreux édifices macromoléculaires dont elles assurent la stabilité. La cohésion de la structure en double hélice de l'ADN est assurée par les liaisons hydrogène (Figure 7) [23].

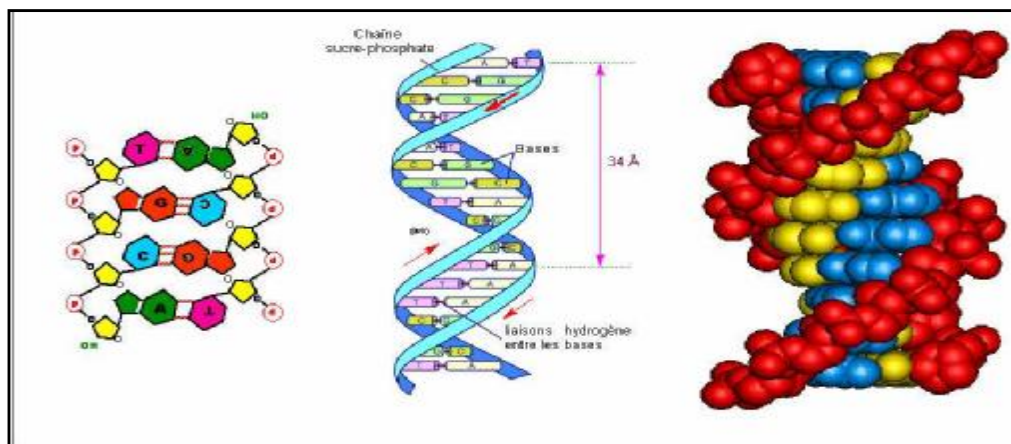


Figure 7 : *Liaisons hydrogène entre les bases de l'ADN.*

II-4- Différentes catégories de la liaison hydrogène :

Suivant les valeurs des trois variables : D-H, H...A et D-H...A, on peut classer les liaisons hydrogène dans trois catégories différentes : liaisons fortes, liaisons moyennes ou modérées et liaisons faibles [24] (Tableau 1).

	Forte	Moyenne	faible
Energie de liaison (Kcal/mol)	15-40	4-15	>4
Liaison H	[N...H...N] ⁺	O-H...O=C	C-H...O
Exemple	P-OH...O=P	O-H...O-H	Os-H...O
Vibration ν en IR (déplacement)	> 25 %	5-25 %	> 5 %
Longueurs de liaison (Å°)	H-A D-H	H...A > D-H	H...A >> D-H
D-H	0.05-0.2	0.01-0.05	< ou = 0.01
H...A	1.2-1.5	1.5-2.2	2.0-3.0
L'angle (D-H...A) (°)	175-180	130-180	90-180

Tableau 1 : Propriétés des liaisons hydrogène.

La valeur de la liaison hydrogène se situe dans un intervalle dont les limites supérieures et inférieures sont définies par les interactions de van Der Waals et les liaisons covalentes. Une forte liaison hydrogène ressemble à une liaison covalente et une liaison hydrogène faible ressemble à une interaction d type Van Der Waals [25].

II-4-a- Liaisons hydrogène fortes :

Ces liaisons sont formées quand il y'a déficience en électrons au niveau du donneur ou excès d'électrons au niveau de l'accepteur.

II-4-b- Liaisons hydrogène modérées :

Les liaisons hydrogène modérées sont formées entre un donneur et un accepteur généralement neutres. L'atome donneur est relativement plus électronégatif que l'atome d'hydrogène est l'atome accepteur possède un doublet libre d'électrons.

II-4-c- Liaisons hydrogène faibles :

L'énergie des liaisons hydrogène faibles est comparable à celle de l'interaction Van Der Waals, on distingue cette liaison par l'électronégativité de l'atome donneur par rapport à celle de l'hydrogène engagé dans une liaison covalente avec lui comme dans C-H ou Si-H. électrons comme dans un cycle aromatique.

II-5- Caractéristiques des liaisons hydrogène :

A l'état solide, l'empilement des molécules est déterminé par leur forme ainsi qu'une variété de forces intermoléculaires, dont les premiers sont les liaisons hydrogène [26]. On peut classer les liaisons hydrogène selon leurs attachements en cinq catégories :

II-5-a- Liaison hydrogène à trois centres :

L'atome d'hydrogène est engagé dans trois liaisons, une covalente, et deux hydrogènes. L'atome d'hydrogène étant soumis à des forces attractives, il se situe dans le plan A,B₁,B₂ avec $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 360^\circ$. Les liaisons à trois centres sont usuellement non symétriques ou r₁ est différente de r₂ (Figure 8).

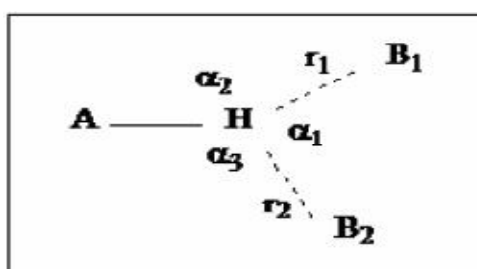


Figure 8 : Liaison hydrogène à trois centres

II-5-b- Liaison hydrogène chélatée :

L'atome d'hydrogène est lié à trois atomes (Figure 9). Il établit une liaison covalente et deux liaisons hydrogène avec deux atomes accepteurs qui sont liés au même atome X [27,28] (Figure A), la figure B présente aussi une liaison hydrogène chélatée, dans ce cas les deux liaisons hydrogène sont à deux centres (Figure B).

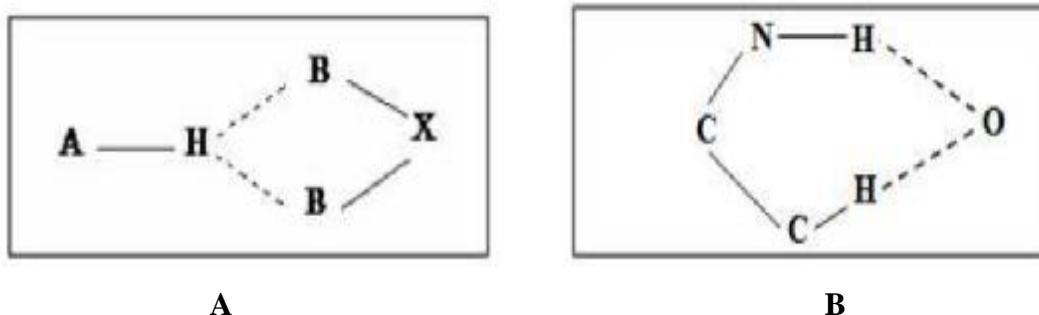


Figure 9 : Liaison hydrogène chélatée

II-5-c- Liaison hydrogène bifurquée :

La combinaison de deux configurations à trois centres conduit à une configuration bifurquée, ou ces liaisons à trois centres ne sont pas coplanaires et font un angle de l'ordre de 50° [29] (Figure 10).

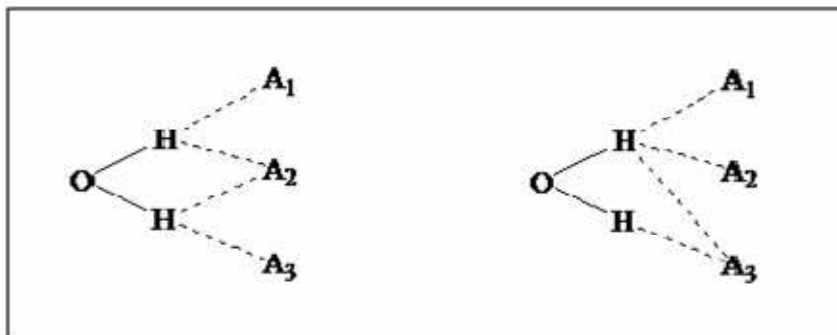


Figure 10 : Liaison hydrogène bifurquée

II-5-d- Liaison d'hydrogène à quatre centres :

Les liaisons à quatre centres (à trois groupements accepteurs) (Figure II-4-d), sont rarement observées dans les structures cristallines. Les distances H...B sont généralement plus longues que les liaisons d'hydrogène à trois centres et tous les angles A-H...Bi doivent être supérieures à 90° [24].

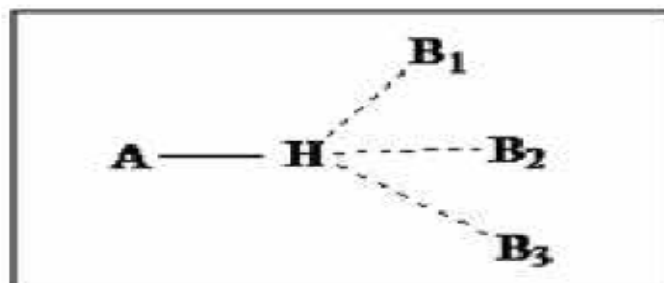


Figure 11 : Liaison d'hydrogène à quatre centres

II-5-e- Liaison hydrogène Tandem :

La liaison hydrogène tandem est généralement observée dans la structure de la molécule d'eau ou les atomes d'hydrogène sont désordonnés (Figure 12). Il existe une corrélation entre les liaisons et les angles, plus l'angle est large plus la liaison est courte. Par conséquent, les distances H...O peuvent varier de 1.6 à 3.0 Å [30].

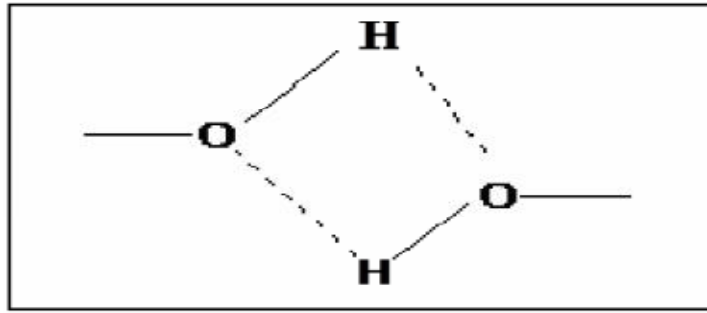


Figure 12 : *Liaison hydrogène Tandem*

II-6- Construction des graphes des liaisons hydrogène (Théorie de Bernstein) :

Le rôle des liaisons hydrogène dans de l'empilement de motifs des molécules dans les cristaux, exige la compréhension de l'association des systèmes des liaisons hydrogène, c'est à dire la structure des liaisons hydrogène. Etter a proposé une méthode d'établissement d'un graphe de ces liaisons, cette méthode a été décrite et développée par Etter-McDonald et Bernstein en 1990, puis par Etter et Bernstein en 1991 et enfin par Bernstein et ses collaborateurs en 1995 [31,32,33,34] La théorie des graphes (dite la théorie de Bernstein) permet de décrire les réseaux de liaisons hydrogène présentes dans le cristal en utilisant des lettres et des chiffres [35]. La nomenclature et les principes de cette méthode sont :

Tous les modèles de liaison hydrogène sont désignés par :

1-C pour les chaînes, R pour les cycles, D pour les modèles finies et S pour les liaisons hydrogène intramoléculaires.

2-Le nombre de donneurs et accepteurs de liaison hydrogène sont notés respectivement (d) et(a).

3-Le nombre d'atome noté (n) est appelé le degré du modèle.

4-Ces symboles sont combinés pour former un graphe qui s'écrit : $G_d^a(n)$, où G représente C, R, D ou S.[36] (Figure 13) [37].

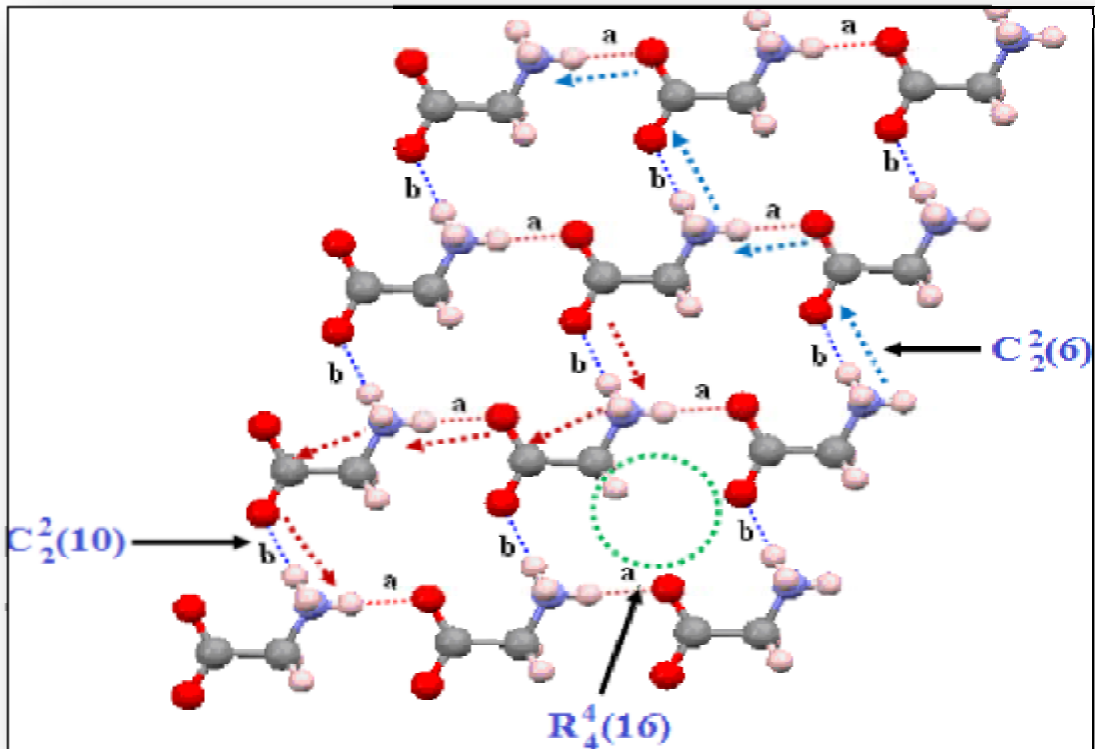


Figure 13: *Grphe binaire de l'α-glycine*

III-Chimie des bases azotées et de l'indium

III-1- Introduction :

Les bases azotées sont les composées essentielles de l'ADN et de l'ARN et sont composées des bases puriques et des bases pyrimidiques ; Les bases puriques sont des dérivés de la purine (Figure 14)

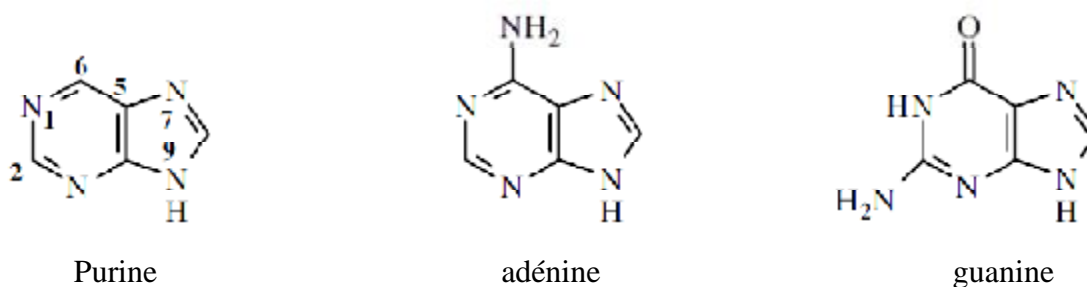


Figure 14 : bases puriques

La pyrimidine est une molécule azotée hétérocyclique aromatique ($\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2$) et comportant deux atomes d'azote. Dans un sens plus large, ses dérivés à bases pyrimidiques sont aussi appelés pyrimidines: cytosine, thymine, uracile (Figure 15) [38,39].

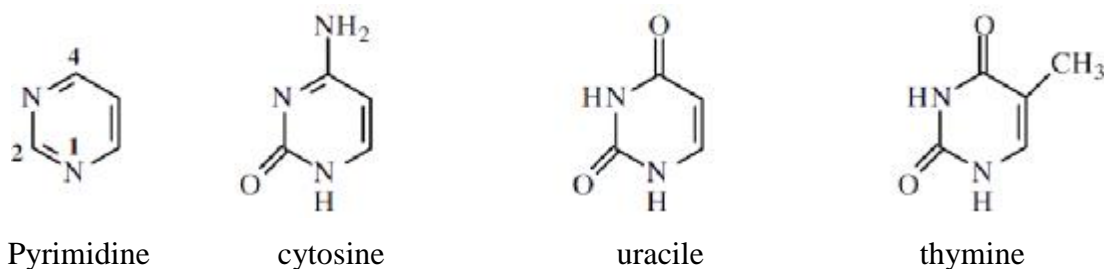


Figure 15 : bases pyrimidiques

Les bases azotées sont complémentaires deux à deux, une purique s'associant toujours à une pyrimidique: l'adénine s'associant avec la thymine et la guanine avec la cytosine pour former ce qu'on appelle un «brin» d'ADN. Les bases azotées complémentaires sont reliées entre-elles par des liaisons hydrogène.

III-2- Relation entre les bases azotées et les métaux :

Parmi les métaux capables de se fixer sur l'ADN, on retrouve très précisément les sept métaux dits alchimiques, à savoir le plomb, l'étain, le fer, l'or, le cuivre, le mercure, l'argent, plus de soufre. Ces métaux peuvent ouvrir ou fermer une chaîne d'ADN selon le site sur lequel ils se fixent. L'argent et le mercure ne peuvent qu'ouvrir de nouvelles chaînes d'ADN d'une grande spécificité. Les recherches de Guillé montrent par exemple que le plomb ouvre la séquence CA AG CG - CA TC GG, le soufre la séquence AT AG

AC AA ou TT TC TG TA Les lettres représentent ici les quatre bases azotées qui assurent la complémentarité des deux brins d'ADN, il s'agit de l'Adénine (A), Guanine (G), Thymine (T), Cytosine (C). On pourrait d'ailleurs à ce propos se demander si l'Azoth alchimique ne concerne pas directement les quatre bases azotées constituant notre ADN. Selon Guillé, l'ADN fonctionnait à l'origine avec les sept métaux traditionnels de l'alchimie mais au cours de l'évolution, par manque de mercure et d'or, l'ADN s'est adapté pour fonctionner avec des métaux ayant des propriétés voisines mais moins intenses et moins spécifiques. Ses expériences en laboratoire ont démontrées que des cellules privées d'un certain métal, sont capables au prix de grandes destructions, d'apprendre à se développer avec l'aide d'un métal très voisin. Certains métaux sont toxiques [40] ; La toxicité de l'indium et de ses composés est mal connue chez l'homme. Cependant, la part de cette toxicité, par rapport à celle des autres métaux contenus dans les alliages pour le brasage, semble mineure [41].

III-3- Définition d'indium :

L'indium a été découvert en 1863 par F.Reich et H.T.Richter, grâce à deux raies détectées par spectroscopie ; son nom dérive du latin "indicum" ou indigo à cause de la couleur de ces raies spectrales. L'Indium de numéro atomique 49 est placé dans le groupe IIIA du tableau périodique ; sa configuration électronique est In: [Kr] 4d10 5s2 5p1. La forme ionique la plus répandue en solution aqueuse est In^{3+} . Cependant, à pH supérieur à 4, l'Indium $^{3+}$ s'hydrolyse facilement et produit des formes insolubles. Plusieurs ligands contenant des atomes donneurs d'électrons tels que l'azote, l'oxygène et le soufre lient l'indium (III) avec une forte stabilité [42].

Bibliographie :

- [1]- Lien sur internet : Diffraction des rayons X - Techniques et études des structures cristallines.http://culturesciencesphysique.enslyon.fr/XML/db/csphysique/metadata/LOM_CSP_Diffraction
- [2]- Lien sur internet : Production des RX (Bases physiques des rayons X). <http://www.imre.ucl.ac.be/rpr/RDGN3120/rayonsX.pdf>.
- [3]- Lien sur internet : ARX. <http://sb.epfl.ch/files/content/users/123314/files/ARx.pdf>
- [4]- Lien sur internet : Axe « génie des procédés », Centre SPIN, Ecole des mines de Saint Etienne-Cours sur les méthodes spectrométriques d'analyse et de caractérisation ; diffraction des rayons. <https://www.emse.fr/spip/IMG/pdf/diffractxpdf.pdf>
- [5]- Lien sur internet : X section DTS en imagerie Médicale et radiologie thérapeutique. <http://forums.futura-sciences.com/orientation-apres-bac/71660-imagerie-medicale-therapeuth>
- [6]- Lien sur internet : Nature et propriétés des RX. <http://www.arnobio2.comArnaudDelahaye>.
- [7]- Lien sur internet : Diffraction des rayons X - Techniques et études des structures cristallines.http://culturesciencesphysique.enslyon.fr/XML/db/csphysique/metadata/LOM_CSP_Diffraction
- [8]- Lamraoui H (2004).Mémoire de Magistère : Synthèse et caractérisation de nouveaux composés hybrides à base d'acide nitrique. Oum el Bouaghi p 6.
- [9]- Nonius. (1998). KappaCCD Server Software. Nonius BV, Delft, The Netherlands.
- [10]- Lien sur internet : Rappels sur la détermination de structure par diffraction des rayons X 3. ChapitreI. <http://bu.umc.edu.dz/theses/physique/HAM5002.pdf>
- [11]- Carter Jr & Sweet R. M. (1997). Methods in Enzymology.Macromolecular Crystallography. Part A. Vol. 276. pp. 307–326.
- [12]- Burla M. C, Caliendo R, Camalli.M, Carrozzini. B, Cascarano. G. L, De Caro. L, Giacovazzo. C, Polidori.G.(2005). J. Appl. Cryst. & Spagna, R 38, 381–388.
- [13]- Nardelli.M, (1999). J.Appl. Crystallography. 32, 563-571.
- [14]- Orpen A. G, (1980) J. Chem. Soc., Dalton Trans. 2509.
- [15]- Farrugia L. J, (1999). J Appl. Cryst. 32, 837–838.
- [16]- Brandenburg K. & Berndt M, (2001). Diamond. Version 3.1e. Crystal Impact, Bonn, Germany.
- [17]- Farrugia L. J, (1997). J. Appl. Cryst. 30, 565.

- [18]- Warren B.E, (1968). X-Ray Diffraction, Addison-Wesley Publishing Company.
- [19]- Dieter Sc, Geravais C.(2006). Cristallographie. Édition 2, Revue et augmentée. Presses Polytechniques.
- [20]- Rich A. (1955). Crick the structure of collagen, nature 176: 915-916.
- [21]- Spomer J. Leszczynski J. and Hobza P. (1996). Structures and energies of hydrogenbonded DNA base pairs. A nonempirical study with inclusion of electron correlation, Phys. J. chem. 100:1965-1974.
- [22]- Hadzi D. (1997). Theoretical Treatments of Hydrogen Bonding. Wiley and Son, New York .
- [23]- Myers J.K, Pace C.N. (1996). Hydrogen Bonding Stabilizes Globular Proteins. Biophys. J. 71, 2033-2039.
- [24]- Desiraju G.R, and Steiner T. (1999). The weak hydrogen bond in structural chemistry and biology. Oxford University Press. P. 13.
- [25]- Desiraju G.R. (2002). Hydrogen Bridges in crystal Engineering: Interactions without Borders. Acc. Chem. Res. 35. 565-573.
- [26]- Albrecht G and Corey R.B.(1939). The crystal structure analysis of glycine. J Am chem soc 61:108-13.
- [27]- Arnett E.M and Mitchell E.J, (1971). Hydrogen bonding VI. J Am chem soc 93: 4052-53.
- [28]- Bagieu-Beucher M. (1990). Acta Cryst. C46, 238-24
- [29]- Balis M.E. (1968). Antagonists and Nucleic acids. American Elsevier. New York.
- [30]- Pace C.N, Shirley B.A, McNutt M. (1996). Forces contributing to the conformational stability of proteins. faseb J. 10, 75-83.
- [31]- Etter M.C. (1990). Acc. Chem. Res. 23, 120-126.
- [32]- Etter M.C, Mac Donald J.C and Bernstein J.(1990). Acta Cryst. B46, 256-262.
- [33]- Etter M.C. (1991). Hydrogen bonds as design elements in organic chemistry. J. Phys. Chem. 95, 4601-4610.
- [34]- Bernstein J. (1991). Polymorphism of L-glutamic acid. decoding the α - β phase relationships using graph-set analysis. Acta Cryst. B47, 1004-1010
- [35]- Bernstein J and Davis R.E. (1999). Graphe set analysis of hydrogen-bond motifs : Implications of molecular and materials structure for new technologies. (Eds. J.A.K. Howard et al.). kluwer academic publishers: Netherlands. pp.275-290.

- [36]- Bernstein J, Etter M.C and Leiserowitz L. (1994). The role of the hydrogen bonding in molecular assemblies ; structure correlation. (Eds. H.-B. Burgi and J.D. Dunitz). Volume 2. VCH: Weinheim. pp.431-507.
- [37]- Davis R.E and Bernstein J. (1998). Graph Set analysis of hydrogen-bond patterns in molecular crystals. American crystallographic association. 33,7-19.
- [38]- Lilley D. M. (1996). Nucleic Acids. Bioorganic Chemistry.Hecht S.M.Ed.Oxford University Press. p p 186–215.
- [39]- Belmont A, Constant J, Demeunynck M. (2001).Chem.Soc. Rev. 30, 70–81.
- [40]- Morin F. (1983) .L'alchimie de la Vie, Biologie et Tradition de Etienne Guillé aux éditions du Rocher,Publié dans Morphéus n°29 – 2008.
- [41]- Xu-Dong J, Li-Cai S, Hai-Bo W, & Chun-Hua G. (2011). Acta Cryst. E67, m1602.
- [42]- Mitra A. (2008).Thèse de Doctorat : Nouveaux radiotraceurs peptidiques pour l'imagerie nucléaire radiomarquage. Evaluations physico-chimiques et pharmacologiques .Université Joseph Fourier – Grenoble I.

PARTIE EXPERIMENTALE

I- Introduction :

La cytosine a été isolée de l'acide nucléique du tissu de thymus de veau en 1894. On lui a suggéré une structure qui a été confirmée dans la même année où cette base a été synthétisée dans le laboratoire en 1903.

La cytosine ou 6-aminopyrimidine-2-one est une base azotée (Figure1), et plus exactement une base pyrimidique principale constituant de l'ADN. Elle est toujours appariée avec la guanine par des liaisons hydrogène, contribuant ainsi à l'élaboration de la double hélice de l'ADN. La cytosine est l'une des cinq principales nucléobases permettant le stockage et le transport de l'information génétique dans les acides nucléiques ADN et ARN [1].

Une recherche bibliographique a mis en évidence quelques composés, à base de cytosinium qui sont: le cytosinium bisulfate [2], le di (1-méthylcytosinium) tetrachlorocobaltate (II) [3], 2-(2-Pyridyl) pyridinium triiodide [4], le bis (cytosinium) tetrachlorodiméthylstannate (IV) [5], le bis (1-méthylcytosinium) tetrachlorocuprate(II) [6], le 5-fluorocytosinium salicylate [7], le cytosinium hydrochloride [8], le cytosinium nitrate [9], le bis(5-bromocytosinium)Tetrachloropalladate (II) [10], le tridicytosiniumtetrachlorozincate [11], le bis (1 méthylcytosinium) tetrachlorocuprate [12], le cytosinium hemitetrachlorozincatecytosine [13] et le cytosinium dihydrogenmonophosphate [14].

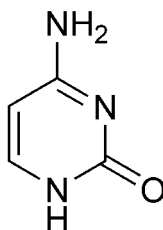


Figure 1 :*Cytosine*

II-Propriétés de cytosine [15] :

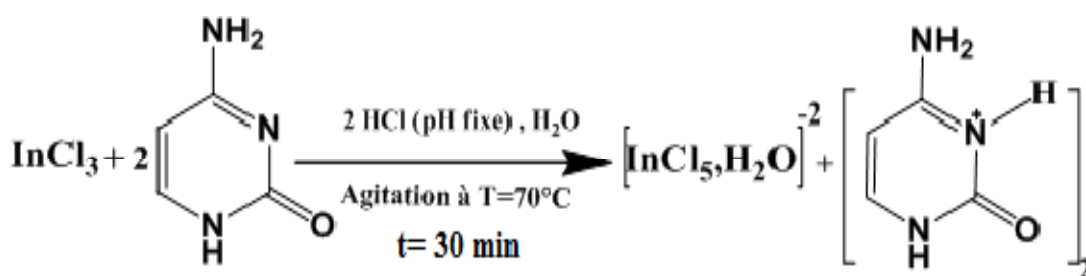
- Ø Nom IUPAC : 4-Amino-3H-pyrimidin-2-one
- Ø Formule brute : C₄H₅N₃O
- Ø Masse moléculaire : 111.1020 g/mol
- Ø Point de fusion : 320-325 °C
- Ø Densité : 1.55 g/cm³.
- Ø pka= 1.6 (base forte)

- ∅ Absorption de la lumière : La cytosine absorbe très fortement dans l'UV (du fait de doubles liaisons conjuguées dans la structure).
- ∅ Solubilité : la cytosine est peu soluble dans l'eau à cause de l'existence d'un cycle aromatique
- ∅ Indice de réfraction ${}^2_5N = 1.499$

III-Mode opératoire:

Le bis (cytosinium) aquapentachloridoindate(III) a été préparé à partir d'une quantité de trichlorure d'indium dissoute dans l'eau bi distillé avec une quantité deux fois équivalente de la cytosine dans un milieu aqueux, acidifié par l'acide hydrochlorique. Après trois semaines d'évaporation lente à la température ambiante ; il résulte des cristaux sous forme d'aiguilles rouges.

Le schéma réactionnel de la synthèse est présenté ci-dessous :



IV- Etude cristallographique :

IV- 1- Enregistrement des intensités :

L'enregistrement de données a été réalisé sur un diffractomètre à géométrie Kappa équipé d'un détecteur bidimensionnel de type CCD (Charged Coupled Device), utilisant la radiation K_α de Mo ($\text{Mo}K_\alpha = 0.71073 \text{ \AA}$) dans un domaine angulaire allant de $\theta_{\min} = 1.7^\circ$ à $\theta_{\max} = 27.6^\circ$, sur un monocristal de dimensions $(0.18 \times 0.09 \times 0.07) \text{ mm}^3$

L'acquisition de données a été réalisée par l'intermédiaire du programme COLLECT [16]. La mise à l'échelle des intensités et la moyenne des réflexions équivalentes sont effectuées à l'aide de programme SCALEPACK [17]. Le programme DENZO [18] a été utilisé pour l'indexation et l'intégration des pics de diffraction et le fichier final contient la liste des intensités des réflexions avec leurs indices de Miller (hkl), les écarts-types et les cosinus directeurs des faisceaux incident et diffracté par rapport au repère cristallographique. Une correction d'absorption semi empirique, MULTISCAN [19] a été appliquée afin

d'améliorer la qualité des données de diffraction. Sur les 18109 réflexions enregistrées dans le domaine ($h : -8 \rightarrow 8 / k : -13 \rightarrow 13 / l : -16 \rightarrow 16$), 3572 avec $I > 2 \sigma(I)$ ont été utilisées pour la résolution et l'affinement de la structurale.

Les données cristallographiques et les conditions d'enregistrement sont présentées dans le tableau 1 :

Formule chimique	$(C_4H_6 N_3 O)_2 [In Cl_5(H_2 O)]$
Masse molaire (g /mol)	Mr = 534.32
System cristallin	Triclinique
Groupe d'espace, N°	P -1,2
a(Å)	6.863(1)
b(Å)	10.487(2)
c(Å)	10.487(2)
α(°)	104.608(1)
β(°)	97.998(1)
γ(°)	98.121(1)
V (Å³)	865.3(2)
Z	2
d_{cal} (g/cm³)	2.051
Radiation, Longueur d'onde(Å)	MoK α , 0.71073
Facteur d'absorption (mm⁻¹)	2.16
Température (K)	295
Dimensions du monocristal (mm³)	0.18 × 0.09 × 0.07
Forme, Couleur	Aiguille, Rouge
Conditions d'enregistrement :	
Diffractomètre	Nonius Kappa CCD
Limites en θ(°)	$\theta_{min} = 1.7^\circ, \theta_{max} = 27.6^\circ$
Limites h, k, l	$h = -8 \rightarrow 8, k = -13 \rightarrow 13, l = -16 \rightarrow 16$
Réflexions mesurées	18109
Réflexions indépendantes	3933
Réflexions $I > 2\sigma(I)$	3572
R_{int}	0.032
Affinement : Affinement en F²	

R (%)	0.0233
R_w (%)	0.048
GOF	1.07
Nombre de paramètres affinés	214

Tableau 1: Les données cristallographiques

IV- 2- Résolution et affinement de la structure :

La structure cristalline de ce composé a été résolue par l'intermédiaire de l'interface WinGX [20] à l'aide du programme SIR 2002 [21] grâce auquel on a pu positionner tout les atomes (non hydrogènes) de la structure (In, Cl, N, C, O). Tous les atomes d'hydrogène ont été localisés à partir des cartes Fourier différence, au cours de l'affinement de la structure par la méthode des moindres carrés, à l'aide de SHELXL97 [22], ensuite ils ont été placés par calcul géométrique et leurs facteurs d'agitation thermique ont été définis comme isotrope tel que $U_{iso}(H) = 1.2U_{eq}(X)$, X étant l'atome parent auquel est lié l'atome d'hydrogène. A l'exception, les positions atomiques des hydrogènes de la molécule d'eau ont été affinées d'une façon isotrope. En tenant compte des facteurs d'agitation thermique anisotropes des atomes non hydrogène et après plusieurs cycles d'affinement, nous avons obtenu les facteurs de reliabilité suivants :

$$R = 2.33\% \text{ et } R_w = 4.8\% \text{ avec un GOF de } 1.07$$

A ce stade de l'affinement aucune densité résiduelle importante n'a été trouvée dans le fourrier différence ($\Delta\rho_{\max} = 0.35 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$).

Les coordonnées atomiques, facteurs d'agitation thermiques anisotropes et isotropes, distances interatomiques et angles de liaisons sont consignés dans les tableaux ci-jointe en annexe.

V- Description de la structure :

Le bis (cytosinium) aquapentachloridoindate (III) est un composé hybride contient deux entités cristallographiquement indépendantes, la structure de ce composé est formée d'un réseau cationique et d'un réseau anionique. L'empilement suivant les trois directions conduit à une structure tridimensionnelle.

L'édifice cristallin peut être décrit comme une alternance de couches cationiques et anioniques, ces couches sont parallèles entre eux.

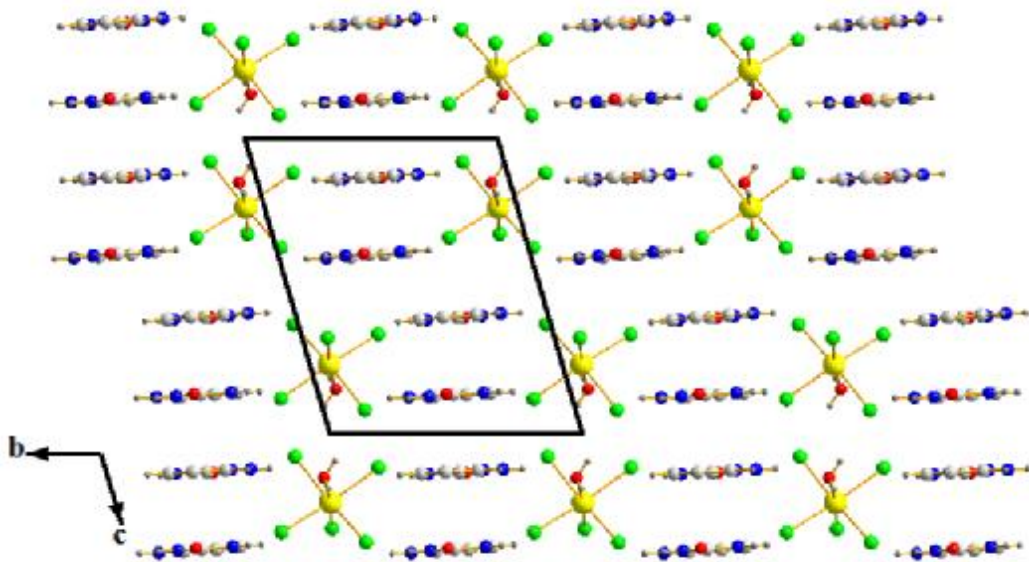


Figure 2 : *Disposition alternée des couches cationiques et anioniques dans la structure*

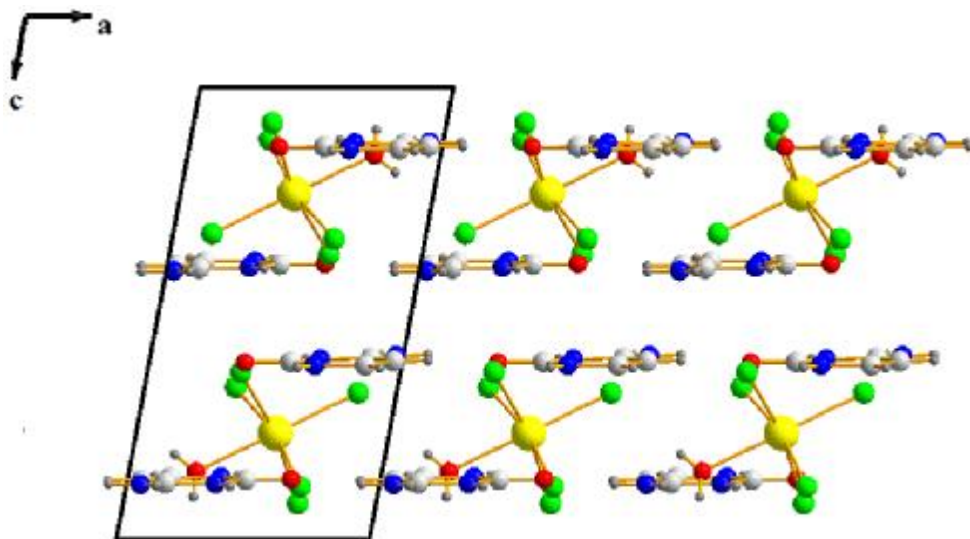


Figure 3 : *Projection de la structure sur le plan (010)*

V-1- Unité asymétrique:

La structure étudiée est formée de deux entités cationiques indépendantes de cytosinium monoprotonée (A), (B) et une entité anionique de l'aquapentachloridoindate(III).

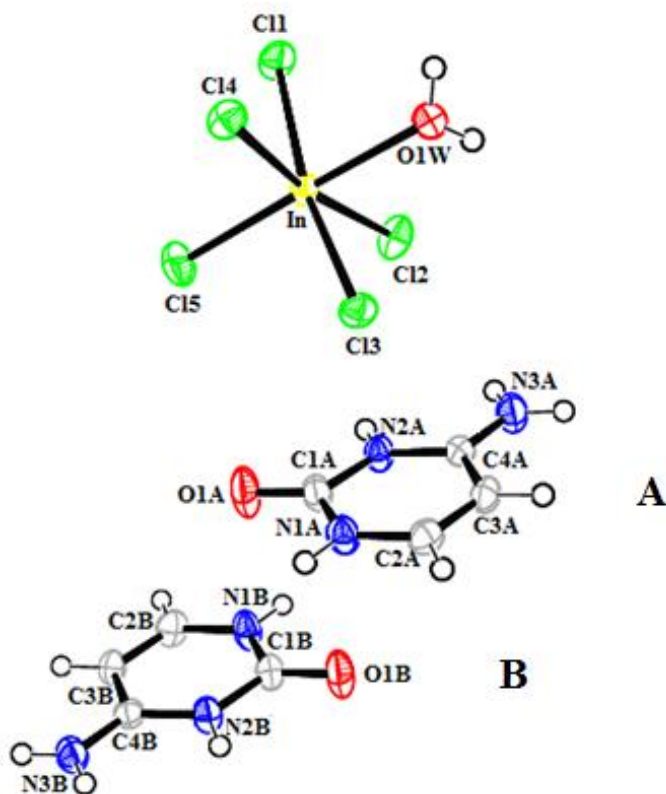


Figure 4 : Unité asymétrique de bis (cytosinium) aquapentachloridoindate(III)

V-2- La partie anionique :

La partie anionique est formée d'un complexe minéral à base d'indium .L'atome d'indium a un degré d'oxydation 3+, il est six fois coordonné par cinq atomes de chlore et une molécule d'eau (Figure 5). L'indium se trouve en position générale du groupe d'espace P-1 ; formant un octaèdre légèrement déformé (Tableau 2 et 3), cette déformation est due à l'insertion d'un volume différent concernant la molécule d'eau.

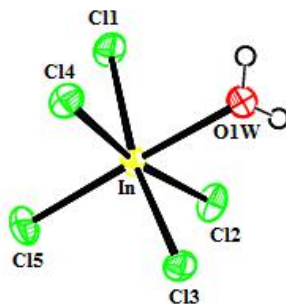


Figure 5: Environnement octaédrique de l'indium

Tableau 2 : Distances interatomiques des octaèdres

Atome 1	Atome 2	Distance(Å)
In	Cl1	2.5157(5)
In	Cl2	2.4721 (6)
In	Cl3	2.4728 (6)
In	Cl4	2.4785 (6)
In	Cl5	2.4716 (5)
In	O1w	2.3791 (15)

Tableau 3 : Angles de liaisons de l'environnement de l'indium

Atome 1	Atome 2	Atome3	Angle (°)
O1w	In	Cl5	175.10(5)
O1w	In	Cl4	80.67(5)
O1w	In	Cl3	86.45 (5)
O1w	In	Cl1	83.90(5)
O1w	In	Cl2	88.62(5)
Cl1	In	Cl5	93.22(2)
Cl1	In	Cl4	90.61 (2)
Cl1	In	Cl3	170.11 (2)
Cl1	In	Cl2	88.06 (2)
Cl5	In	Cl4	95.43 (2)
Cl5	In	Cl2	95.26 (2)
Cl4	In	Cl3	89.94 (2)
Cl3	In	Cl2	89.57 (2)
Cl5	In	Cl3	96.55 (2)
Cl4	In	Cl2	169.29 (2)

Les octaèdres se développent sous forme de filament en zigzag deux à deux parallèlement au plan (b, c) et (a, c) (Figure 6 et7).

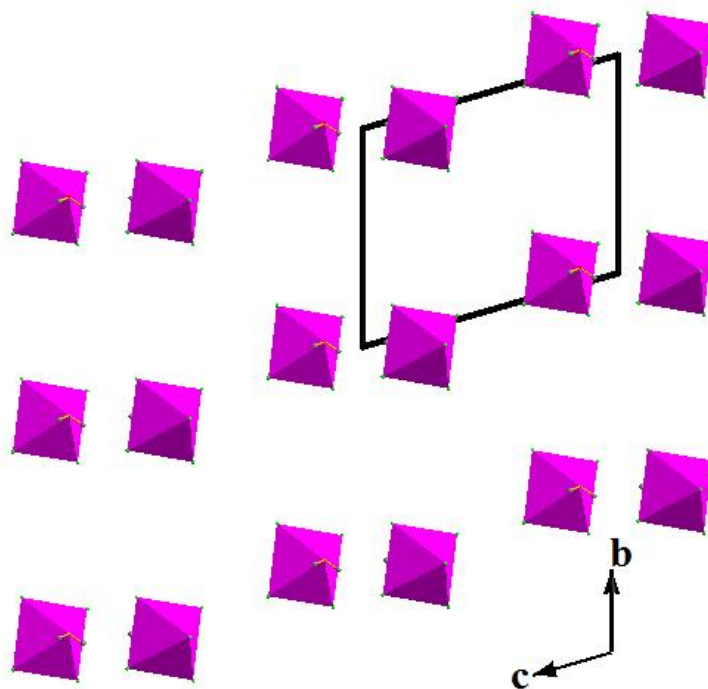


Figure 6 : Projection des polyèdres $[InCl_5(H_2O)]^{-2}$ sur le plan (b, c)

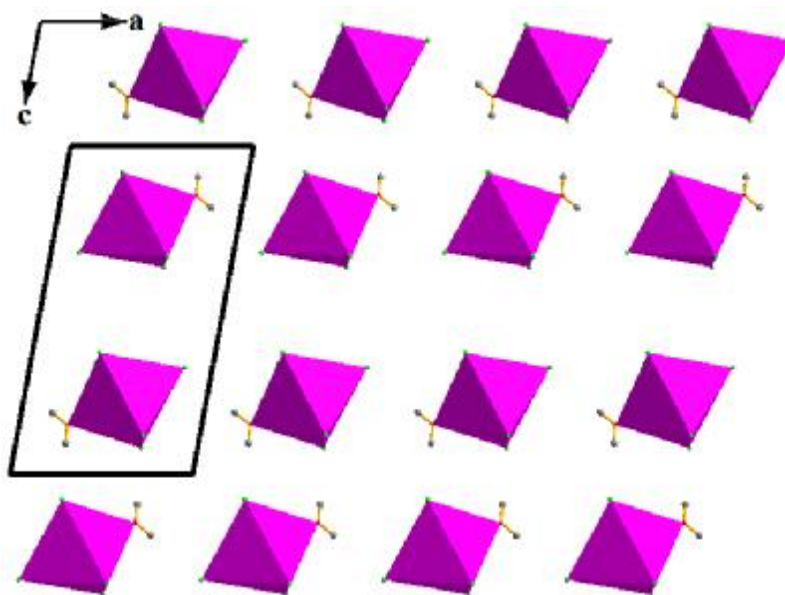


Figure 7 : Projection des polyèdres $[InCl_5(H_2O)]^{-2}$ sur le plan (a, c)

V-3- La partie cationique :

La partie cationique est formée de deux molécules organiques de la cytosinium cristallographiquement indépendantes $(C_4H_6 N_3 O)_2^+$, elle présente un système cyclique conjugué d'où la déviation par rapport au plan moyen de la radicale pyrimidine est représentée dans le tableau 4.

Tableau 4 : Déviation des atomes par rapport au plan moyen de cytosinium(A) et (B)

Atome	Déviaton	Atome	Déviaton
C1A	0.008(2)	C1B	0.008(2)
N2A	-0.012(2)	N2B	-0.012(2)
C3A	-0.001(2)	C3B	0.006(2)
C4A	0.008(2)	C4B	0.006(2)
N1A	-0.001(2)	N1B	0.003(2)
C2A	-0.003(2)	C2B	-0.009(2)
O1A	0.017(2)	O1B	0.007(2)
N3A	0.048(2)	N3B	-0.023(2)

Les valeurs présentées dans ce tableau sont très intéressantes par rapport à la planéité du cycle. Une grande déviation relative est observée pour les deux atomes d'azote N3A et N3B par rapport au plan du cycle (A) et (B) respectivement.

L'entité cationique se déploie sous forme de couches intercalées les unes par rapport aux autres parallèlement au plan (a, b)

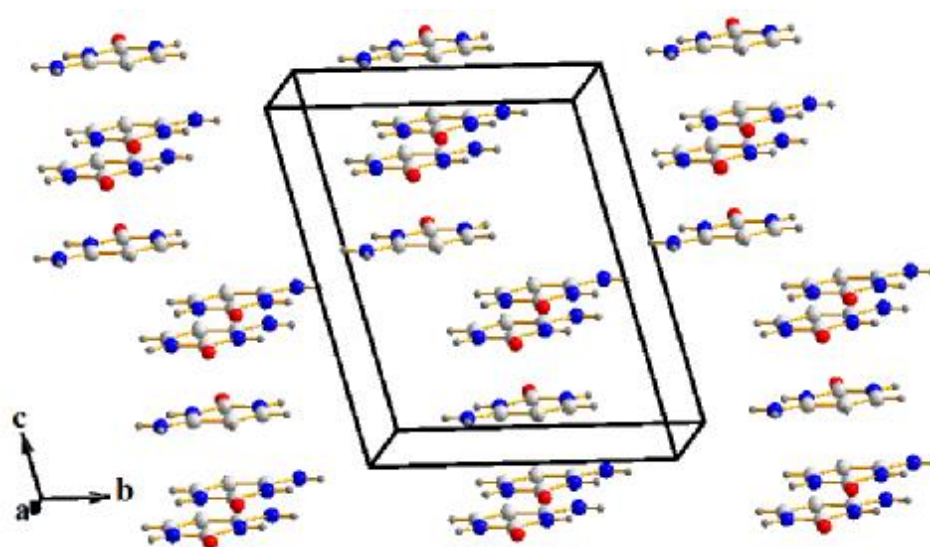


Figure 8 : Développement des couches des cations parallèlement au plan (a, b)

La figure 9 montre que les entités cytosinium s'enchainent en zigzag quatre à quatre parallèlement au plan (b, c)

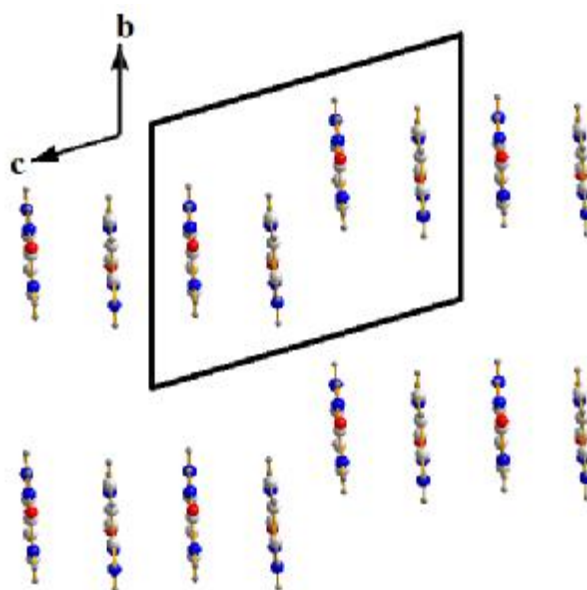


Figure 9 : Projection des cations sur le plan (b, c)

VI- Les liaisons hydrogène

VI-1- Types de liaisons hydrogène

VI-1-a- Liaison cation-cation :

Pour ce type de liaisons, on a deux interactions intermoléculaires N3-H3...O1 et C3-H3...O1, le cation joue le rôle d'un donneur par deux liaisons covalentes de type N-H et C-H, et le rôle d'accepteur par l'atome d'oxygène (Figure10). Cette interaction est légèrement forte (Tableau 5).

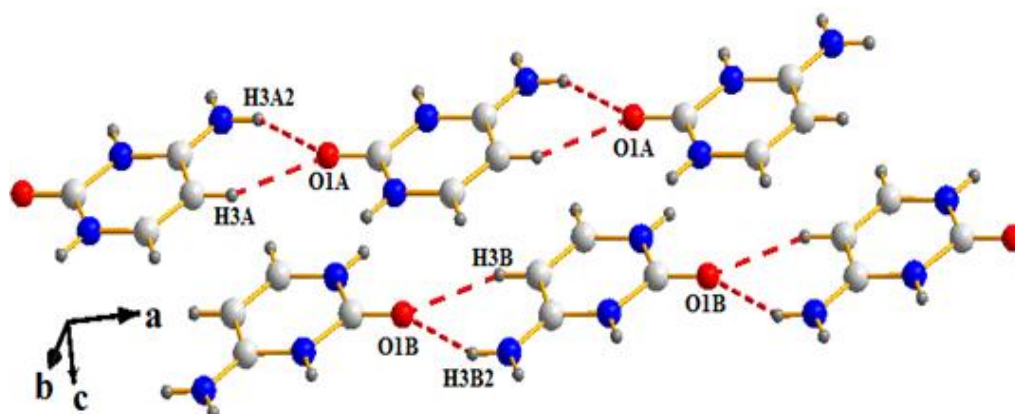


Figure 10 : Vue en perspective d'une couche

Les liaisons hydrogène de type cation-cation forment des cycles (Rings) qui assurent la cohésion entre deux cations successifs ; ces liaisons intermoléculaires possèdent un motif

noté R chacun contient six atomes et on les note $R_2^1(6)$ selon la théorie des graphes du modèle des liaisons hydrogène de Bernstein (Figure 11).

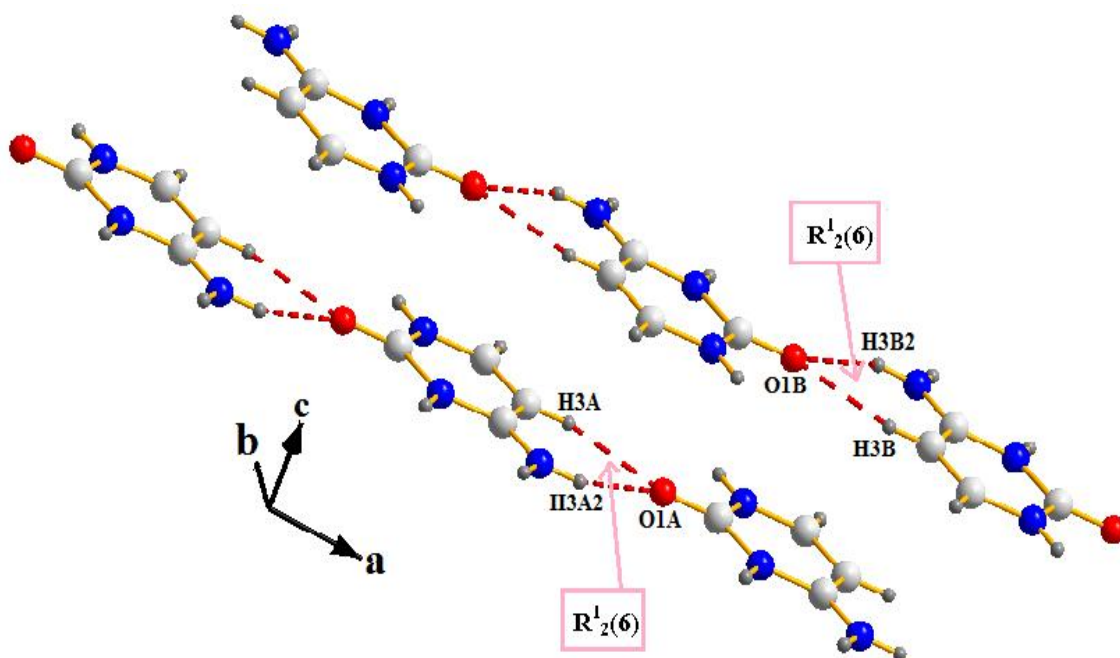


Figure 11: *Grphe quantitatif des liaisons hydrogène de type cation-cation*

Tableau 5 : *Liaisons hydrogène cation-cation*

D-H...A	D-H (Å)	H...A (Å)	D...A(Å)	D-H...A(Å)
C3A-H3A...O1A(i)	0.93	2.27	3.050(3)	141
C3B-H3B...O1B (ii)	0.93	2.30	3.066(3)	140
N3A-H3A2...O1A(i)	0.86	2.22	2.987(3)	149
N3B-H3B2...O1B (ii)	0.86	2.19	2.965(3)	150

Codes de symétrie : (i) 1+x, y, z (ii)-1+x, y, z

VI-1-b- Liaisons anion-anion :

Pour ce type de liaison, on a deux interactions intermoléculaires O1w-H1A...Cl1 et O1w-H1B... Cl5. L'anion joue le rôle d'un donneur par la liaison covalente O-H et le rôle d'accepteur par l'atome du chlore (Figure 12).

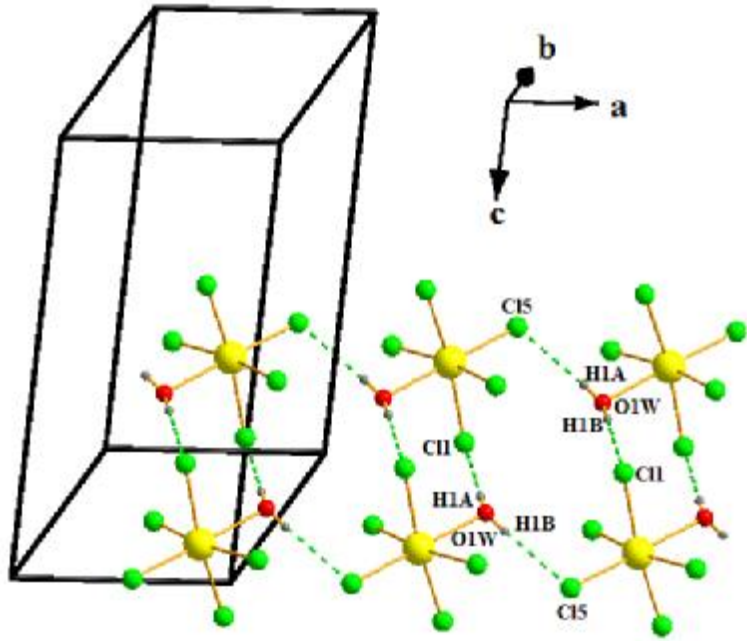


Figure 12 : Enchaînement des anions via la liaison hydrogène $O_w-H...Cl$

Le réseau de liaisons hydrogènes de type anion-anion de cette structure est défini comme une alternance des chaînes liés en deux les unes avec les autres le long de l'axe a de la maille via des interactions intermoléculaires formant des cycles qui ont un degré de 8 et de 12 atomes, on les note $R_2^2(8)$ $R_4^4(12)$ respectivement, et des chaînes notés $C_1^1(4)$ (Figure 13).

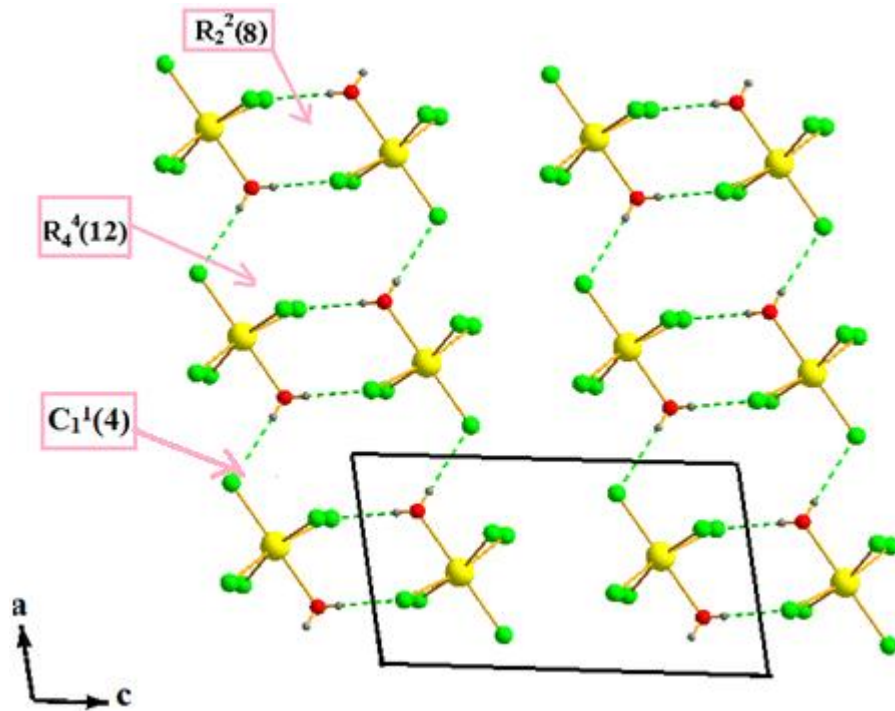


Figure 13 : Motifs de liaisons hydrogènes de type anion-anion

VI-1-c- Liaisons cation-anion :

Les atomes d'azote (N1, N2 et N3) de la cytosinium s'engagent à des interactions intermoléculaires avec les ligands de l'indium à savoir les atomes du chlore et l'atome d'oxygène de la molécule d'eau de l'entité anionique entant que donneur, afin d'assurer la cohésion entre les deux entités organique et inorganique.

L'ion aquapentachloridoindate(III) est entouré de quatre entités cytosinium, suite à l'existence de six interactions intermoléculaires de type N-H...O et N-H...Cl ; la première entité s'engage par deux liaisons hydrogène de type N-H...Cl, la deuxième entité est coordonné par deux liaisons hydrogène de type N-H...Cl et N-H...O par contre les deux autres participent par une seule interaction intermoléculaire (Figure 14).

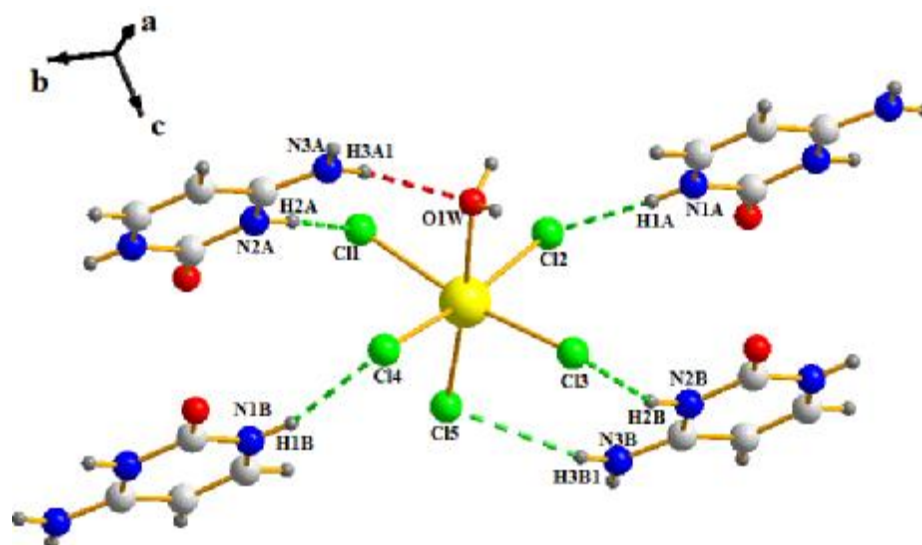


Figure 14 : *Les différentes interactions intermoléculaires de l'anion*

On constate ainsi que les anions jouent le rôle d'accepteurs par ces atomes de chlore et d'oxygène, et les cations contribuent à ces interactions intermoléculaires par ces atomes d'azote entant que des donneurs. Selon la théorie des modèles de liaisons hydrogène on possède dans ce réseau un motif noté R pour les cycles $R_2^2(8)$ et $R_4^4(16)$ (Figure 15).

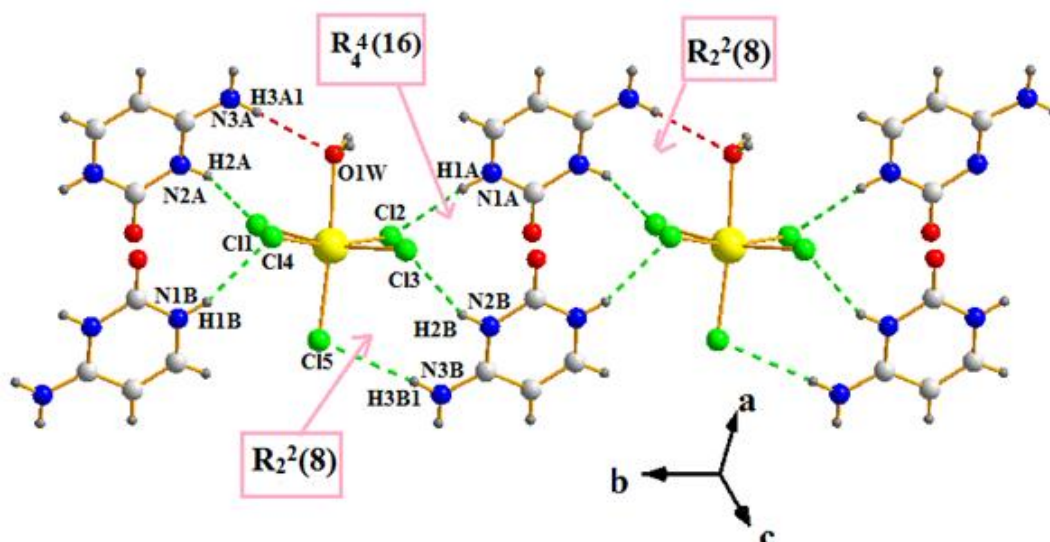


Figure 15: Motifs de liaisons hydrogènes de type cation-anion

Les valeurs numériques de ces interactions sont consignées dans le tableau 6

Tableau 6 : Liaisons hydrogène cation-anion

D-H...A	D-H (Å)	H...A (Å)	D...A (Å)	D-H...A (°)
N2A -H2A... Cl1	0.86	2.47	3.2777(17)	157
N1A-H1A...Cl2 (i)	0.86	2.38	3.217(2)	164
N2B-H2B...Cl3 (i)	0.86	2.41	3.2193(17)	156
N1B-H1B...Cl4	0.86	2.38	3.2109(16)	164
N3B-H3B1...Cl5 (i)	0.86	2.69	3.470(2)	152
N3A-H3A1...O1W	0.86	2.38	3.226(3)	168

Codes de symétrie (i) x, 1+y, z

VII- Interaction π - π :

Les cycles aromatiques s'empilent par des interactions π - π stabilisant le cristal. Ces interactions incluent des termes électrostatiques, de van de Waals [23]. On les représente par une combinaison entre les centroïdes des cycles concernant la partie organique.

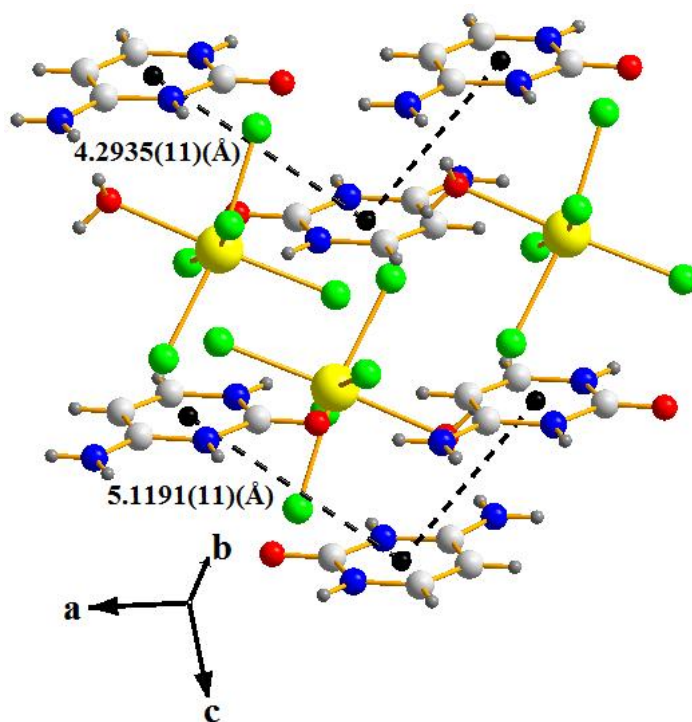


Figure 16 : Interaction π - π entre les cycles

Les distances entre les centroïdes : Cg1_Cg2 4.2935(11) (Å), Cg1_Cg2 5.1191(11) (Å)

VIII- Analyse des entités

VIII-1- Analyse de l'anion :

L'anion est entouré de quatre cations de cytosinium (2B et 2A) formant six interactions dont cinq de type N-H...Cl et une de type N-H...O_w et de deux molécules d'anion formant ainsi deux interactions intermoléculaires de type O_w-H...Cl ; deux liaisons autant que donneur et la troisième autant qu'accepteur (Figure 17).

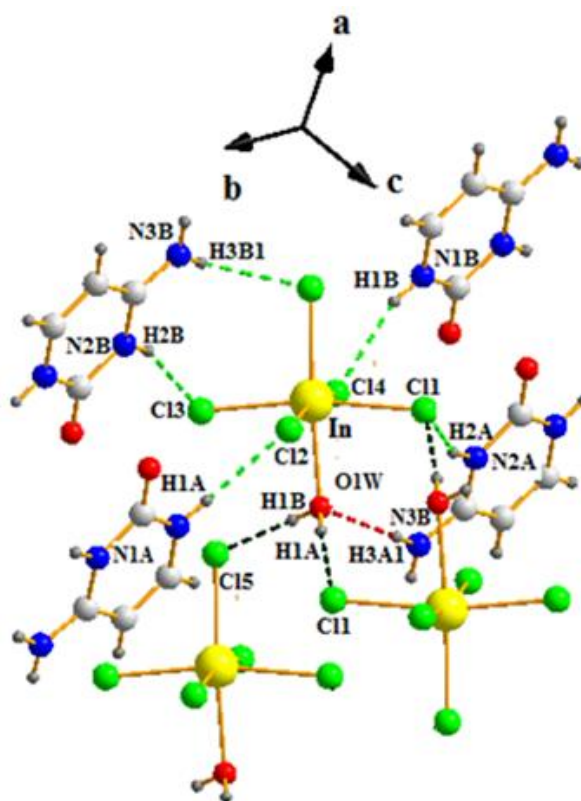


Figure 17 : Environnement de l'anion

Tableau 7 : Liaisons hydrogène de l'anion aquapentachloridoindate(III)

D-H...A	D-H (Å)	H...A (Å)	D...A (Å)	D-H...A (°)
O1W-H1B...Cl5 (i)	0.79(3)	2.53(3)	3.3036(17)	169(3)
O1W-H1A...Cl1 (ii)	0.82(3)	2.44(3)	3.2648(19)	176(3)
N2A -H2A ...Cl1	0.86	2.47	3.2777(17)	157
N1A-H1A...Cl2 (iii)	0.86	2.38	3.217(2)	164
N2B -H2B ...Cl3 (iii)	0.86	2.41	3.2193(17)	156
N1B -H1B...Cl4	0.86	2.38	3.2109(16)	164
N3B-H3B1...Cl5 (iii)	0.86	2.69	3.470(2)	152
N3A -H3A1 ...O1W	0.86	2.38	3.226(3)	168

Codes de symétrie : (i) 1+x, y, z (ii) 1-x,-y,-z (iii) x, 1+y, z

VIII-2- Analyse des cations

VIII-2-a- Cation A :

Chaque cation(A) dans la structure présente sept interactions moléculaires, dont quatre avec deux autres cation (A) de type : N-H...O et C- H...O (où le cation (A) joue le rôle

d'un donneur par la liaison covalente de N-H et C-H, et le rôle d'accepteur par l'atome d'oxygène), et trois autres interactions avec deux molécules d'aquapentachloroindate (III) de type : N-H...Cl et N-H...O_w ou le cation joue seulement le rôle d'un donneur par la liaison N-H (Figure 18).

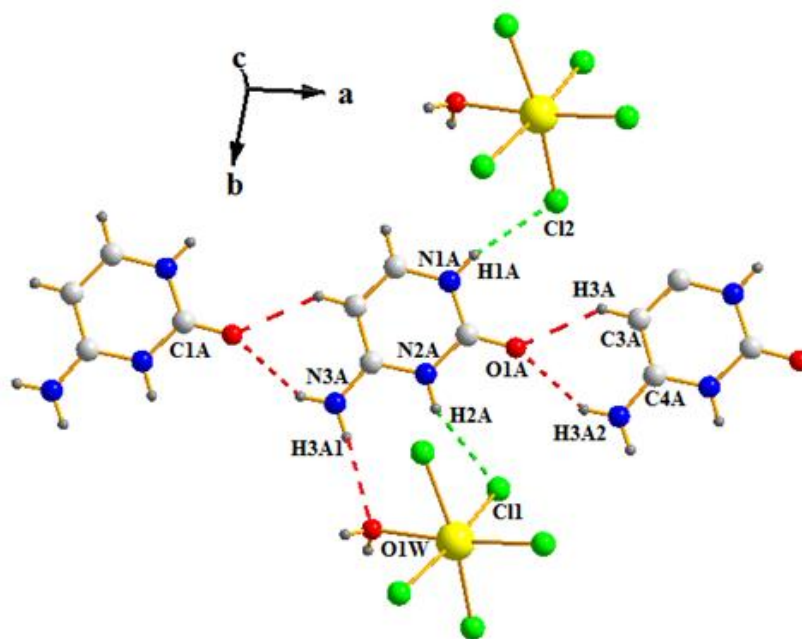


Figure 18: Liaisons hydrogène engagées par le cation (A)

Tableau 8 : Liaison hydrogène du cation(A) cytosinium

D-H...A	D-H (Å)	H...A (Å)	D...A (Å)	D-H...A (°)
N2A -H2A ...Cl1	0.86	2.47	3.2777(17)	157
N1A -H1A ...Cl2(i)	0.86	2.38	3.217(2)	164
N3A -H3A2 ...O1A (ii)	0.86	2.22	2.987(3)	149
C3-H3A...O1A (ii)	0.93	2.27	3.050(3)	141
N3A-H3A1...O1W	0.86	2.38	3.226(3)	168

Codes de symétrie (i) x, 1+y, z (ii) 1+x, y, z

VIII-2-b- Cation B :

Chaque cations (B) dans la structure présente sept interactions moléculaires, dont trois avec deux molécules d'anion via des liaisons hydrogènes de type : (N-H...Cl) ou le cation dans ce cas joue le rôle d'un donneur avec la liaison N-H, et quatre avec deux autres cations via des liaisons hydrogènes de type : (N-H...O et C-H...O), dont deux le cation contribue avec l'atome d'oxygène autant que accepteur, et les deux autres via les liaisons C-H et N-H autant que donneur (Figure19)

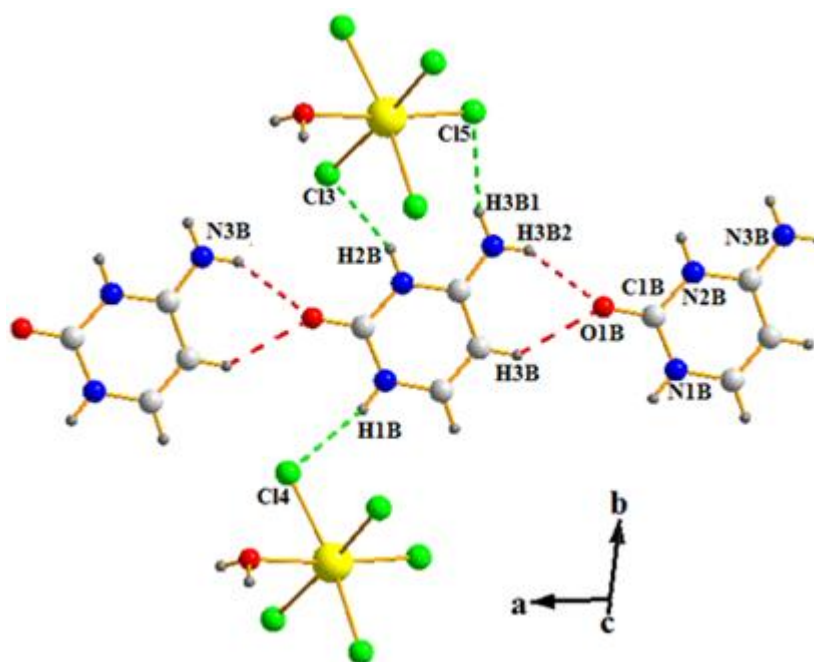


Figure 19 : Liaisons hydrogène engagées par le cation (B)

Tableau 9 : Liaison hydrogène du cation(B) cytosinium

D-H...A	D-H (Å)	H...A (Å)	D...A (Å)	D-H...A (°)
N1B -H1B ...Cl4	0.86	2.38	3.2109(16)	164
N2B-H2B ...Cl3 (i)	0.86	2.41	3.2193(17)	156
N3B-H3B1...Cl5(i)	0.86	2.69	3.470(2)	152
N3B-H3B ...O1B (ii)	0.86	2.19	2.965(3)	150
C3B-H3 ...O1B (ii)	0.93	2.30	3.066(3)	140

Codes de symétrie (i) $x, 1+y, z$ (ii) $-1+x, y, z$

Bibliographie :

- [1]- Omrani A. (2011).Mémoire de master : Synthèse, Caractérisation structurale et analyse thermique d'un composé hybride a base d'étain et de cytosine. Département de Chimie. Faculté des Sciences Exactes Université Larbi ben M'hidi - Oum El Bouaghi. p20
- [2]- Fantazi Boubakeur .(2012).Mémoire de Magistère. Préparation et étude structurale de nouveaux composés hybrides à base d'amine et d'indium .Département de Chimie. Faculté des Sciences Exactes. Université Mentouri de Constantine.p25
- [3]- Hillgeris E. C. & Lippert, B. (1994). Acta Cryst. C50, 670-671.
- [4]- Fialho D E, Howie, A. & Wadell, L. (1996). Acta Cryst. C52.955-957.
- [5]- Cassellato U, Graziani R, Martelli M & plazzogna G. (1995). Acta Cryst. C51. 2293-2295.
- [6]- Valle G, Ettorre R & Peruzzo V. (1995). Acta Cryst. C51. 2273-2275.
- [7]- Parabakaran P, Murugesan S, Muthiah P. T, Bocelli G & Righi L. (2001). Acta Cryst. E57. o933-o936.
- [8]- Neil S. M, (1977). Acta Cryst. B33. 1079-1082.
- [9]- Cherouana A, Benali-Cherif N & Bendjeddou L. (2003). Acta Cryst. E59. o180- o182.
- [10]- Casellato U, Ettorre R & Graziani R. (1993). Acta Cryst.C49. 956-957.
- [11]- Bourne P. E & Taylor M. R. (1983). Acta Cryst. C39. 430-432.
- [12]- Ogawa K, Nishitani K, Fujiwara T, Shirotake S & Tomita K. (1979).Acta Cryst. B35.965-967
- [13]- Fujinami F, Ogawa K, Arakawa Y, Shirotake S, Fujii S & Tomita K. (1979). Acta Cryst. B35. 968-970.
- [14]- Bagieu-Beucher M. (1990). Acta Cryst. C46, 238-240.
- [15]- Chahwan R, Wontakal S.N and Roa S. (2010). Cross talk between genetic and epigenetic information through cytosine deamination. Trends in Genetics 26, 443–448
- [16]- Nonius. (1998). KappaCCD Server Software. Nonius BV, Delft, The Netherlands.
- [17]- Otwinski Z & Minor W. (1997).Methods in Enzymology. Vol. 276, Macromolecular Crystallography.Part A, Edited by Carter Jr C. W & Sweet R. M. pp. 307 326. New York: Academic Press.
- [18]- Blessig R. (1995).Acta Cryst. A51, 33-38.
- [19]- Farrugia L. (1997).J. Appl. Cryst. 30, 565.
- [20]- Farrugia L. (1999). J. Appl. Cryst. 32, 837-838.

[21]- Burla M .C, Camalli M, Carrozzini B, Cascarano G.L, Giacovazzo C, Polidori G & Spagna R. (2003). *J. Appl. Cryst.* 36, 1103.

[22]- Sheldrik G. M. (2008). *Acta Cryst.* A64, 112-122.

[23]- Delsuc N. (2007). Thèse de Doctorat. Structures tertiaires proteomimetiques issues d'oligoamides aromatiques. Ecole Doctorale des Sciences Chimiques. Université de Bordeaux. p34

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail, nous avons présenté un nouveau composé hybride à base d'indium et de base azotée (cytosine) préparé par voie aqueuse. Ce dernier a été caractérisé par diffraction des rayons X et l'analyse des liaisons hydrogène.

Le composé est de formule $(C_4H_6 N_3 O)_2 [InCl_5(H_2 O)]$, qui possède deux cations organiques de la cytosinium et un anion minéral de l'aquapentachloridoindate (III). Il cristallise dans le système triclinique avec le groupe d'espace P-1. Elle a mis en évidence l'alternance de couches cationiques et anioniques le long de l'axe c. La structure est stabilisée par des liaisons hydrogène moyennes de type N-H...O, N-H...Cl et O-H...Cl et faibles de type C-H...O ; et d'autre part par des interactions π - π entre les cycles aromatiques.

ANNEXE

ANNEXE

Table 1

Les coordonnées atomiques ainsi que leurs facteurs de déplacement isotropes
équivalents (\AA^2)

	x/a	y/b	z/c	U
IN(1)	0.44903(2)	0.07671(1)	0.23496(1)	0.021
CL(1)	0.31011(8)	0.16348(5)	0.07904(4)	0.031
CL(4)	0.64030(7)	0.30354(5)	0.33588(4)	0.028
CL(2)	0.31137(8)	-0.15284(5)	0.11584(5)	0.034
CL(3)	0.63099(8)	-0.01813(5)	0.36952(5)	0.036
CL(5)	0.15334(8)	0.10044(6)	0.32385(5)	0.042
O(1W)	0.7359(2)	0.0735(2)	0.1496(2)	0.033
O(1A)	0.6454(2)	0.4936(2)	0.8675(1)	0.043
N(2A)	0.3498(2)	0.5664(2)	0.8764(1)	0.027
H(2A)	0.40812	0.64688	0.88265	0.030
N(1B)	0.6557(2)	0.4861(2)	0.6151(1)	0.030
H(1B)	0.58906	0.55022	0.61971	0.034
N(2B)	0.6738(2)	0.2648(2)	0.6018(1)	0.027
H(2B)	0.61729	0.18530	0.59950	0.031
O(1B)	0.3779(2)	0.3372(2)	0.6087(2)	0.048
N(1A)	0.3675(3)	0.3449(2)	0.8630(2)	0.034
H(1A)	0.43388	0.28065	0.85918	0.038
N(3A)	0.0540(3)	0.6447(2)	0.8783(1)	0.032
H(3A1)	0.11730	0.72274	0.88111	0.037
H(3A2)	-0.07277	0.63213	0.87761	0.037
C(4A)	0.1509(3)	0.5451(2)	0.8752(2)	0.024
C(3B)	0.9654(3)	0.4180(2)	0.6064(2)	0.027
H(3B)	1.10132	0.43749	0.60510	0.031
C(3A)	0.0563(3)	0.4142(2)	0.8694(2)	0.028
H(3A)	-0.08002	0.39495	0.86982	0.032
C(4B)	0.8722(3)	0.2864(2)	0.5992(2)	0.024
N(3B)	0.9704(3)	0.1871(2)	0.5938(2)	0.036
H(3B1)	0.90896	0.10895	0.59194	0.042
H(3B2)	1.09640	0.20006	0.59209	0.042
C(2A)	0.1684(3)	0.3181(2)	0.8633(2)	0.032
H(2A1)	0.10799	0.23143	0.85928	0.036
C(1B)	0.5564(3)	0.3620(2)	0.6079(2)	0.030
C(2B)	0.8546(3)	0.5142(2)	0.6153(2)	0.028
H(2B1)	0.91505	0.60158	0.62165	0.032
C(1A)	0.4668(3)	0.4688(2)	0.8684(2)	0.029
H(1B)	0.832(4)	0.068(3)	0.188(2)	0.06(1)
H(1A)	0.727(4)	0.011(3)	0.094(3)	0.06(1)

Table 2

Les paramètres d'agitation thermique dans l'expression de calcul de U_{eq} :

$$U_{eq} = (1/3) \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i a_j$$

	U11	U22	U33	U12	U13	U23
IN(1)	0.0196(1)	0.0162(1)	0.0251(1)	0.0020(1)	0.0038(1)	0.0061(1)
CL(1)	0.0331(3)	0.0271(3)	0.0304(3)	0.0062(2)	0.0002(2)	0.0106(2)
CL(4)	0.0290(3)	0.0184(2)	0.0309(3)	0.0009(2)	0.0022(2)	0.0031(2)
CL(2)	0.0312(3)	0.0185(2)	0.0444(3)	-0.0001(2)	-0.0014(2)	0.0018(2)
CL(3)	0.0287(3)	0.0312(3)	0.0427(3)	0.0014(2)	-0.0020(2)	0.0197(2)
CL(5)	0.0277(3)	0.0490(3)	0.0453(3)	0.0106(3)	0.0166(2)	0.0159(3)
O(1W)	0.0263(8)	0.0365(9)	0.0298(9)	0.0081(7)	0.0049(7)	0.0027(7)
O(1A)	0.0207(8)	0.0375(9)	0.0681(12)	0.0080(7)	0.0131(8)	0.0187(8)
N(2A)	0.0210(8)	0.0215(8)	0.0349(10)	0.0038(7)	0.0063(7)	0.0119(7)
N(1B)	0.0253(9)	0.0234(9)	0.0383(10)	0.0090(7)	0.0066(8)	0.0099(8)
N(2B)	0.0191(8)	0.0213(8)	0.0371(10)	0.0017(7)	0.0062(7)	0.0095(7)
O(1B)	0.0206(8)	0.0368(9)	0.0811(13)	0.0067(7)	0.0145(8)	0.0175(9)
N(1A)	0.0244(9)	0.0253(9)	0.0506(12)	0.0098(7)	0.0089(8)	0.0162(8)
N(3A)	0.0254(9)	0.0267(9)	0.0390(10)	0.0073(7)	0.0056(8)	0.0073(8)
C(4A)	0.023(1)	0.026(1)	0.020(1)	0.005(1)	0.003(1)	0.006(1)
C(3B)	0.0181(9)	0.0298(11)	0.0287(11)	0.0012(8)	0.0043(8)	0.0091(9)
C(3A)	0.0185(9)	0.0299(11)	0.0317(11)	0.0024(8)	0.0050(8)	0.0114(9)
C(4B)	0.021(1)	0.023(1)	0.024(1)	0.003(1)	0.004(1)	0.004(1)
N(3B)	0.0237(9)	0.0264(9)	0.0526(12)	0.0055(7)	0.0074(8)	0.0053(8)
C(2A)	0.027(1)	0.024(1)	0.041(1)	-0.001(1)	0.005(1)	0.014(1)
C(1B)	0.022(1)	0.028(1)	0.035(1)	0.006(1)	0.007(1)	0.008(1)
C(2B)	0.026(1)	0.025(1)	0.027(1)	0.000(1)	0.004(1)	0.008(1)
C(1A)	0.021(1)	0.031(1)	0.031(1)	0.008(1)	0.006(1)	0.012(1)

Table 3

Les distances interatomiques (Å)

O(1W) - H(1B)	0.79(3)	O(1W) - H(1A)	0.83(4)
O(1A) - C(1A)	1.218(3)	N(2A) - H(2A)	0.860(2)
N(2A) - C(4A)	1.350(3)	N(2A) - C(1A)	1.380(3)
N(1B) - H(1B)	0.860(2)	N(1B) - C(1B)	1.356(3)
N(1B) - C(2B)	1.354(3)	N(2B) - H(2B)	0.860(2)
N(2B) - C(4B)	1.355(3)	N(2B) - C(1B)	1.380(3)
O(1B) - C(1B)	1.218(3)	N(1A) - H(1A)	0.860(2)
N(1A) - C(2A)	1.357(3)	N(1A) - C(1A)	1.360(3)
N(3A) - H(3A1)	0.860(2)	N(3A) - H(3A2)	0.860(2)
N(3A) - C(4A)	1.311(3)	C(4A) - C(3A)	1.412(3)
C(3B) - H(3B)	0.930(2)	C(3B) - C(4B)	1.411(3)
C(3B) - C(2B)	1.339(3)	C(3A) - H(3A)	0.930(2)
C(3A) - C(2A)	1.345(3)	C(4B) - N(3B)	1.312(3)
N(3B) - H(3B1)	0.860(2)	N(3B) - H(3B2)	0.860(2)
C(2A) - H(2A1)	0.930(2)	C(2B) - H(2B1)	0.930(2)

Table 4

Les angles de liaisons (°)

H(1B)-O(1W)-H(1A)	103.6(30)	H(2A)-N(2A)-C(4A)	117.6(2)
H(2A)-N(2A)-C(1A)	117.6(2)	C(4A)-N(2A)-C(1A)	124.9(2)
H(1B)-N(1B)-C(1B)	118.3(2)	H(1B)-N(1B)-C(2B)	118.3(2)
C(1B)-N(1B)-C(2B)	123.3(2)	H(2B)-N(2B)-C(4B)	117.8(2)
H(2B)-N(2B)-C(1B)	117.9(2)	C(4B)-N(2B)-C(1B)	124.3(2)
H(1A)-N(1A)-C(2A)	118.6(2)	H(1A)-N(1A)-C(1A)	118.6(2)
C(2A)-N(1A)-C(1A)	122.9(2)	H(3A1)-N(3A)-H(3A2)	120.0(2)
H(3A1)-N(3A)-C(4A)	120.0(2)	H(3A2)-N(3A)-C(4A)	120.0(2)
N(2A)-C(4A)-N(3A)	119.3(2)	N(2A)-C(4A)-C(3A)	117.6(2)
N(3A)-C(4A)-C(3A)	123.0(2)	H(3B)-C(3B)-C(4B)	120.6(2)
H(3B)-C(3B)-C(2B)	120.6(3)	C(4B)-C(3B)-C(2B)	118.8(2)
C(4A)-C(3A)-H(3A)	120.8(2)	C(4A)-C(3A)-C(2A)	118.3(2)
H(3A)-C(3A)-C(2A)	120.8(3)	N(2B)-C(4B)-C(3B)	117.6(2)
N(2B)-C(4B)-N(3B)	119.5(2)	C(3B)-C(4B)-N(3B)	122.8(2)
C(4B)-N(3B)-H(3B1)	120.0(2)	C(4B)-N(3B)-H(3B2)	120.0(2)
H(3B1)-N(3B)-H(3B2)	120.0(2)	N(1A)-C(2A)-C(3A)	121.5(2)
N(1A)-C(2A)-H(2A1)	119.3(2)	C(3A)-C(2A)-H(2A1)	119.3(3)
N(1B)-C(1B)-N(2B)	114.9(2)	N(1B)-C(1B)-O(1B)	123.3(2)
N(2B)-C(1B)-O(1B)	121.8(2)	N(1B)-C(2B)-C(3B)	121.0(2)
N(1B)-C(2B)-H(2B1)	119.5(2)	C(3B)-C(2B)-H(2B1)	119.5(2)
O(1A)-C(1A)-N(2A)	121.9(2)	O(1A)-C(1A)-N(1A)	123.3(2)
N(2A)-C(1A)-N(1A)	114.8(2)		

Table 5
Les angles de torsion (°)

H(2A) - N(2A) - C(4A) - N(3A)	3.1
H(2A) - N(2A) - C(4A) - C(3A)	-177.5
H(2A) - N(2A) - C(1A) - O(1A)	-1.6
H(2A) - N(2A) - C(1A) - N(1A)	177.6
C(4A) - N(2A) - C(1A) - O(1A)	178.4
C(4A) - N(2A) - C(1A) - N(1A)	-2.4
C(1A) - N(2A) - C(4A) - N(3A)	-176.9
C(1A) - N(2A) - C(4A) - C(3A)	2.5
H(1B) - N(1B) - C(1B) - N(2B)	-179.4
H(1B) - N(1B) - C(1B) - O(1B)	-0.7
H(1B) - N(1B) - C(2B) - C(3B)	-178.9
H(1B) - N(1B) - C(2B) - H(2B1)	1.1
C(2B) - N(1B) - C(1B) - N(2B)	0.6
C(2B) - N(1B) - C(1B) - O(1B)	179.3
C(1B) - N(1B) - C(2B) - C(3B)	1.1
C(1B) - N(1B) - C(2B) - H(2B1)	-178.9
H(2B) - N(2B) - C(4B) - C(3B)	-178.1
H(2B) - N(2B) - C(4B) - N(3B)	-0.3
H(2B) - N(2B) - C(1B) - N(1B)	177.9
H(2B) - N(2B) - C(1B) - O(1B)	-0.9
C(4B) - N(2B) - C(1B) - N(1B)	-2.1
C(4B) - N(2B) - C(1B) - O(1B)	179.1
C(1B) - N(2B) - C(4B) - C(3B)	1.9
C(1B) - N(2B) - C(4B) - N(3B)	179.7
H(1A) - N(1A) - C(2A) - C(3A)	179.8
H(1A) - N(1A) - C(2A) - H(2A1)	-0.2
H(1A) - N(1A) - C(1A) - O(1A)	0.4
H(1A) - N(1A) - C(1A) - N(2A)	-178.8
C(2A) - N(1A) - C(1A) - O(1A)	-179.6
C(2A) - N(1A) - C(1A) - N(2A)	1.2
C(1A) - N(1A) - C(2A) - C(3A)	-0.2
C(1A) - N(1A) - C(2A) - H(2A1)	179.8
H(3A1) - N(3A) - C(4A) - N(2A)	0.0
H(3A1) - N(3A) - C(4A) - C(3A)	-179.3
H(3A2) - N(3A) - C(4A) - N(2A)	180.0
H(3A2) - N(3A) - C(4A) - C(3A)	0.7
N(2A) - C(4A) - C(3A) - H(3A)	178.8
N(2A) - C(4A) - C(3A) - C(2A)	-1.2
N(3A) - C(4A) - C(3A) - H(3A)	-1.9
N(3A) - C(4A) - C(3A) - C(2A)	178.1
H(3B) - C(3B) - C(4B) - N(2B)	179.9
H(3B) - C(3B) - C(4B) - N(3B)	2.2
H(3B) - C(3B) - C(2B) - N(1B)	178.7
H(3B) - C(3B) - C(2B) - H(2B1)	-1.3
C(4B) - C(3B) - C(2B) - N(1B)	-1.3
C(2B) - C(3B) - C(4B) - N(2B)	-0.1

C(2B) - C(3B) - C(4B) - N(3B)	-177.8
C(4B) - C(3B) - C(2B) - H(2B1)	178.7
C(4A) - C(3A) - C(2A) - N(1A)	0.2
C(4A) - C(3A) - C(2A) - H(2A1)	-179.8
H(3A) - C(3A) - C(2A) - N(1A)	-179.8
H(3A) - C(3A) - C(2A) - H(2A1)	0.2
N(2B) - C(4B) - N(3B) - H(3B1)	0.0
N(2B) - C(4B) - N(3B) - H(3B2)	180.0
C(3B) - C(4B) - N(3B) - H(3B1)	177.7
C(3B) - C(4B) - N(3B) - H(3B2)	-2.4

RESUME

Le travail de recherche réalisé au cours de ce master s'articule sur la préparation, la caractérisation structurale par la diffraction des rayons X sur monocristal et l'analyse des interactions interatomiques pour un composé hybride à base d'indium (III) et de cytosine.

Cette étude a mis en évidence l'alternance de couches cationiques et anioniques stabilisées par un réseau tridimensionnelle de liaisons hydrogène et des interactions π - π stacking pour ce nouveau composé hybride préparé par voie aqueuse.

Mots-Clés :

- ✓ -Composés hybrides
- ✓ -Diffraction des rayons X
- ✓ -Liaisons hydrogène

ABSTRACT

The research done in this master revolves on the preparation, structural and characterization by X-ray diffraction on single crystal and analysis of interatomic interactions for a hybrid compound based on indium (III) and cytosine .This study showed alternating cationic and anionic layers stabilized by a three-dimensional network of hydrogen bonds and π - π stacking interactions .this new hybrid compound is prepared in aqueous route.

Keywords:

- ✓ Hybrid-Compounds
- ✓ X-ray diffraction
- ✓ Hydrogen bonds

المخلص

البحث الذي أجري في هذا الماستر يركز على إعداد ووصف الهيكلية بواسطة حيود الأشعة السينية على بلورة واحدة ثم تحليل التفاعلات التي تكون بين الذرات لهذا المركب الهجين الذي يعتمد في تركيبه على أنديوم و السيتوزين أظهرت هذه الدراسة أن التناوب في الطبقات الموجبة والسالبة يستقر بواسطة شبكة ثلاثية الأبعاد من الروابط الهيدروجينية وتفاعلات التراص π - π . هذا المركب الهجين الجديد يتم إعداده وتحضيره في وسط ممي.

الكلمات المفتاحية :

المركبات الهجينة
X-حيود أشعة السينية
الروابط الهيدروجينية