

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère De l'enseignement supérieur et de la recherche Scientifique

Université Mentouri de Constantine
Faculté des sciences Exactes
Département de Chimie

N° d'ordre :.....

Série :.....

Mémoire de Magister

Présentée par

Mme. Fellahi Zineb ép Beldjou

Pour obtenir

Le grade de MAGISTER en Chimie

Option: Cristallochimie

Intitulée

*« Transfère de protons et étude des graphes qualitatifs
et quantitatifs du modèle des liaisons hydrogène de
nouveaux composés hybrides »*

Soutenu le : 03 / 07 /2012
Devant le jury composé de

Mr. H. MERAZIG

Professeur à l'Université Mentouri-Constantine

Mme L. BENDJEDDOU

Professeur à l'Université Mentouri-Constantine

Mme A. CHEROUANA

Professeur à l'Université Mentouri-Constantine

Mme C.BEGHIDJA

Maître de conférences à l'université de Constantine

Mme F. BOUDJAADA

Maître de conférences à l'Université Mentouri-Constantine

Président

Rapporteur

Examinatrice

Examinatrice

Examinatrice

Dédicace

Je dédie ce travail à

Mes très chers parents,

Pour tous lessacrifices et les encouragements que vous m'avez octroyé, trouvez dans ce travail l'expression de mon profond amour et le fruit du grain que vous avez semé.

Mes sœurs, Loubna et Hamida

Mon neveu et ma nièce : Isslame et Ouissal

Toute ma famille

Tous mes amis *sans oublier choubiala*

Mon humble mari Djalel

Remerciements

Ce travail a été réalisé à l'unité de recherche de chimie de l'environnement et moléculaire structurale (CHEMS) du Département de Chimie à l'université Mentouri-Constantine.

Je souhaite remercier tout particulièrement **Mme L.BENDJEDDOU**, Professeur à l'université Mentouri de Constantine pour son accueil chaleureux son aide et ses conseils avisés. C'est avec une extrême gentillesse, qu'elle a toujours fait preuve d'une grande disponibilité.

Je remercie **Mr. H. MERAZIG**, Professeur à l'université Mentouri de Constantine, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury de soutenance de ce mémoire.

J'exprime toute ma gratitude à **Mme A. CHEROUANA**, Professeur à l'université Mentouri de Constantine, d'avoir accepté de faire partie de ce jury et d'examiner ce travail.

Je tien à adresser mes plus vifs remerciements à **Mme C. BEGHIDJA**, maître de conférence à l'université Mentouri de Constantine, d'avoir accepté de juger ce travail.

Mes sincères remerciements à **Mme F. Boudjaada**, maître de conférences à l'université Mentouri de Constantine, pour le très grand honneur qu'elle m'a fait en jugeant ce travail.

A tous ceux et celles qui ont contribués de près ou de loin à la réalisation de ce travail, qu'il trouve ici mes vifs remerciements.

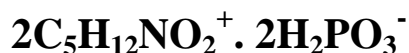
Sommaire

Introduction générale	01
-----------------------------	----

Chapitre I Les liaisons hydrogène

I- Introduction	03
II- Origine de la formation des liaisons hydrogène	03
II-1- Importance de la liaison H	04
III- Liaisons intramoléculaires et intermoléculaires	05
IV - Différentes catégories	06
a) Liaisons hydrogène fortes	07
b) Liaisons hydrogène modérées	07
c) Liaisons hydrogène faibles	07
V - Caractéristiques des liaisons hydrogène.....	07
IV-1- Liaison hydrogène à trois centres	08
IV-2- liaison hydrogène chélatée	08
IV-3- Liaison hydrogène bifurquée	08
IV-4- Liaison d'hydrogène à quatre centres	09
IV-5- Liaison hydrogène Tandem.....	09
VI - Construction des graphes des liaisons hydrogène	10
VII - Techniques Expérimentales dans l'Etude des liaisons hydrogène.....	11

Chapitre II :
Synthèse, étude structurale et liaisons hydrogène du
Composé Di (L-valinium monohydrogenephosphite)



I- Introduction	12
II- Partie expérimentale	12
III- Etude cristallographique	12
III-1- Enregistrement des intensités	12
III-2- Résolution et affinement de la structure	12
IV- Description de la structure	13
V- Liaisons hydrogène	15
V -1- Environnement des cations L-valinium $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{NO}_2^+$	15
V -2- Environnement des anions H_2PO_3^-	16
VI- Graphes du modèle des liaisons hydrogène	17
VI-1- Graphes qualitatifs	17
VI-2- Graphes quantitatifs	18
VII- Réseau de liaison hydrogène	20
a) Liaison hydrogène de type O-H...O	20
b) Liaison hydrogène de type N-H...O	21
c) Liaison hydrogène de type C-H...O	25
VIII- Etude comparative	27
IX- Conclusion	30

Chapitre III :

Synthèse, étude structurale et liaisons hydrogène du Composé tétra guininium dibisulfate sulfate dihydrate.



I- Introduction	31
II- Partie expérimentale	31
III- Etude cristallographique	31
III-1- Enregistrement des intensités	31
III-2- Résolution et affinement de la structure	31
IV- Description de la structure	32
V- Liaisons hydrogène	34
V-1- Environnement des entités cationiques	35
V-2- Environnement des entités anioniques	37
VI- Graphes et modèle des liaisons hydrogène de la structure	37
VI-1- Graphes qualitatifs	37
VI-2- Graphes quantitatifs	39
VI-2-1- Liaison hydrogène de type N-H...N	39
VI-2-2- Liaison hydrogène de type N-H...O	39
VI-2-3- Liaisons hydrogène de type O-H...O	41
VI-2-4- les liaisons hydrogène de type C-H...O	44
VII- Etude comparative	46
VIII- Conclusion	49
Conclusion générale	50
Références	51
Annexes	54

*INTRODUCTION
GÉNÉRALE*

Introduction générale

Au fil du temps, la chimie est devenue une science omniprésente, selon l'adage : "la chimie est dans tout et réciproquement" et sa contribution au progrès et au bien-être de l'homme est incomparable. Longue serait la liste des inventions et innovations qui, sans elle, n'auraient jamais vu le jour non seulement dans son propre domaine mais aussi dans d'autres domaines à savoir : Physique, Biologie, Science de la vie, ...etc. Pour s'en convaincre, il suffit d'évoquer quelques exemples : les transistors, les supraconducteurs H.T, le code génétique, les pesticides, les principes actifs pharmaceutiques, les cosmétiques, ...etc.

La chimie est au carrefour de plusieurs disciplines avec lesquelles elle développe des interfaces où elle s'y révèle indispensable pour fournir les matières premières, élucider les relations propriétés - structure. C'est l'importance de la chimie au sein de ces interfaces qui la positionnera soit comme : "science centrale" ou comme "discipline - outil", lui permettant ainsi d'affirmer son identité et de délimiter son espace épistémologique.

La biologie a vu s'effacer depuis le début de ce siècle ce qui la séparait de la physique du fait que l'on s'est accordé à reconnaître qu'une modélisation en termes physicochimiques pourrait, sans doute, expliquer les architectures et les processus qui caractérisent le vivant. Cependant la description d'édifices atomiques complexes, les macromolécules, est nécessaire pour faire le lien entre le monde quasi minéral et le monde mouvant [1, 2]. La forme de ces édifices poly atomiques complexes ne dépend pas seulement des liaisons chimiques covalentes qui associent fermement les atomes les uns aux autres, mais aussi d'une famille de liaisons, qu'on classe sous le nom de liaisons hydrogène.

Dans le but de comprendre l'influence des liaisons hydrogène sur des structures cristallines complexes constituées par des composés élémentaires de l'ADN (bases azoté) et des protéines (acides aminés) associé à des acides minéraux. Des techniques de diffraction des rayons X sont utilisées pour collecter le maximum d'information sur les structures de ces complexes moléculaire. A l'heure actuelle, la structure de plus d'une centaine de complexes protéines-ADN a pu être déterminée à l'échelle atomique. Ces techniques ont permis d'étudier certaines caractéristiques essentielles des protéines telles : la chaîne apolaire, les hélices alpha et les feuilletts bêta [3] où la liaison hydrogène est la plus importante interaction assurant la cohésion de ces structures [4].

Depuis que les chimistes se sont rendus compte du rôle dominant que jouent les liaisons hydrogène dans le processus biochimique, plusieurs tentatives ont été faites pour comprendre le modèle formé par ces liaisons. L'utilisation de « la théorie des graphes » pour décrire les réseaux cristallins formés par les liaisons hydrogène a réalisé un grand bond dans l'étude de ces structures, établies essentiellement par ce type de liaisons [5, 6]. Une notation caractéristique dans ces graphes a été introduite et exploitée avec succès, ce qui a motivé plusieurs chercheurs à explorer ce domaine, notamment dans la chimie organique [7, 8].

Le travail que nous présentons dans ce mémoire fait partie d'une investigation systématique sur les composés hybrides [9], riches en liaisons hydrogène, à base d'acides aminés en interactions avec un acide minéral et un acide organique, dont les propriétés structurales et physico-chimique servent de mime pour comprendre le comportement de certains macromolécules biologiques in vivo.

Ce travail est constitué de deux parties:

- *La partie bibliographique* : traite les liaisons hydrogène et la méthode de construction des graphes du modèle de ce type de liaisons, utilisée pour décrire nos structures

- *La partie expérimentale* :, Nous présentons dans cette partie deux structures

- ✓ La première à base de valine et d'acide phosphoreux.
- ✓ La deuxième à base de guanine et d'acide sulfurique.

Et on termine par une conclusion générale.

CHAPITRE I

Les liaisons hydrogène

I- 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 non seulement du haut point d'ébullition de l'eau, mais aussi de la formation des structures des protéines [10] principalement en hélice α ou en feuillet β et surtout, des liaisons entre les paires de bases de l'ADN [11] et triple hélice de collagène [12, 13] 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. Bien qu'elle soit en grande partie d'origine électrostatique et de type dipôle-dipôle, il semblerait malgré tout, suite à de récentes études, qu'une partie de la liaison hydrogène soit bien une forme de liaison covalente comme l'avait proposé il y a longtemps le prix Nobel Linus Pauling [14]. La liaison hydrogène possède en effet un caractère de directivité semblable à celui de la liaison covalente.

II- Origine de la formation des liaisons hydrogène:

Les molécules n'ont pas besoin d'être chargées, elles doivent être avant tout polarisées. Cette interaction provient du partage d'un atome d'hydrogène entre deux atomes très électronégatifs (**O, N, F...**). 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 [15]. L'hydrogène lié à un atome électronégatif porte une fraction de charge positive très localisée qui interagit fortement avec le dipôle produit par l'autre

atome électronégatif fonctionnant comme accepteur. Les trois atomes **X-H** et **Y** sont alors alignés:

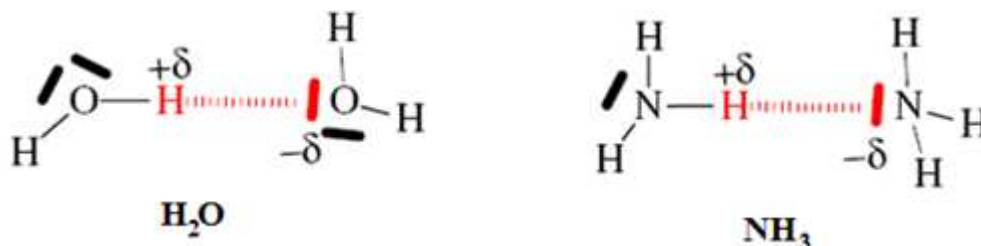
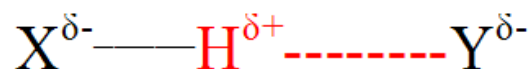


Figure [1] : Liaison hydrogène.

L'énergie de cette liaison est de l'ordre de quelques dizaines de kJ mol⁻¹. Exemple [NH₃: 5 kJ mol⁻¹; H₂O: 25 kJ mol⁻¹; HF: 29 kJ mol⁻¹]. Elle est donc dix fois plus faible que celle des liaisons covalentes (quelques centaines de kJ mol⁻¹).

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

II-1-Importance de la liaison H :

La force d'une liaison hydrogène est d'autant plus grande que le donneur est plus électronégatif. En l'absence de contrainte stérique, la liaison hydrogène est linéaire, des écarts angulaires sont néanmoins tolérés mais ils réduisent son intensité.

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 que forment entre elles les bases complémentaires de chaque brin [16], (figure 2).

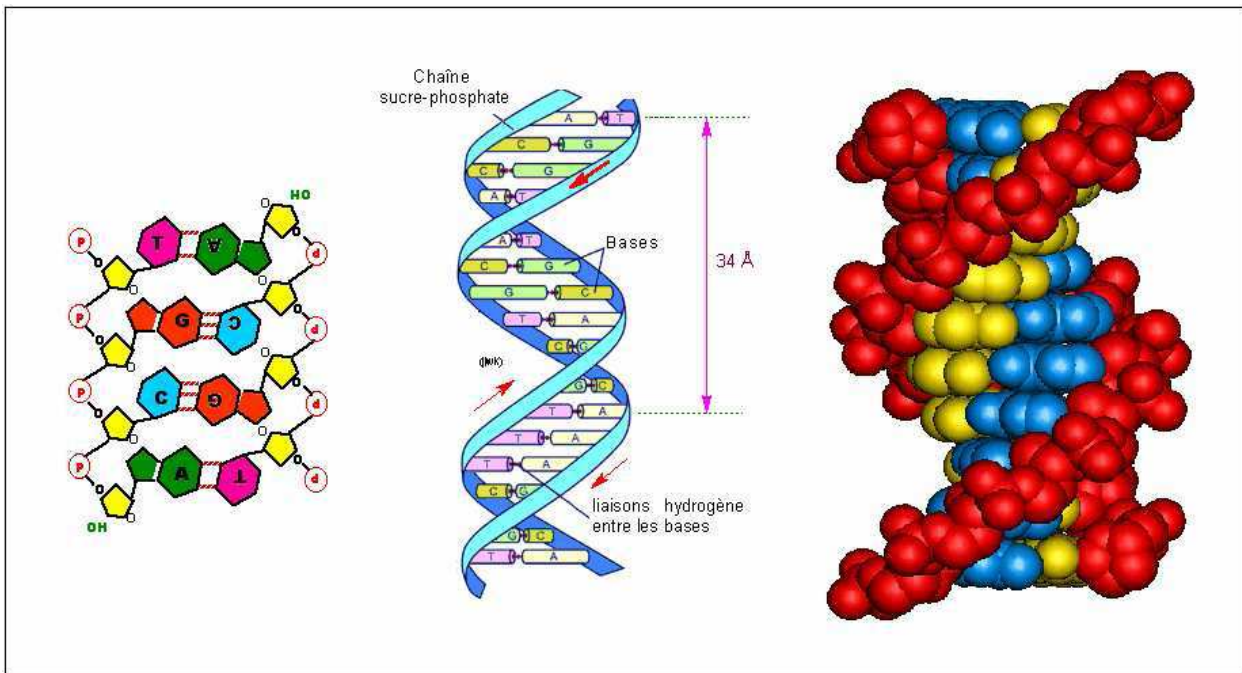


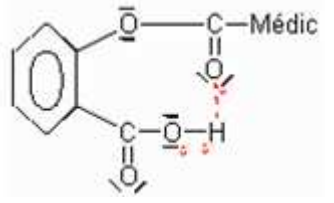
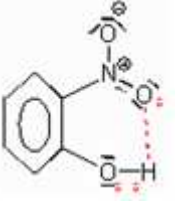
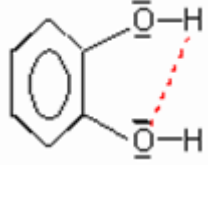
Figure [2]: Liaisons hydrogène entre les bases de l'ADN.

III- Liaisons intramoléculaires et intermoléculaires :

La liaison chimique, qu'elle soit covalente ou ionique, assure la cohésion des atomes au sein des édifices moléculaires. L'assemblage de ces entités microscopiques pour former les différents états de la matière, relève des forces plus faibles qui ne modifient pas la structure de ces fragments. Les liaisons hydrogène sont souvent intermoléculaires [17, 18], elles peuvent être aussi intramoléculaires [19].

Les liaisons hydrogène intramoléculaires peuvent avoir lieu dans les trois phases, mais elles sont rarement observées dans les solvants polaires et dans les cristaux, où elles sont en compétition avec les liaisons hydrogène intermoléculaires, et très souvent, c'est les liaisons intermoléculaires qui prédominent.

Tableau I: Molécules présentant des liaisons hydrogène intramoléculaires :

Noms	Aspirine acide	Nitrophénol	phénols
Molécules			

La liaison hydrogène intermoléculaire joue un grand rôle dans la cohésion des phases condensées solides et liquides. Elle est aussi responsable de la formation d'agrégats dans la phase gazeuse. Elle est d'une très grande importance dans les systèmes biomolécules [20].

IV- 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 [21] (Tableau III).

Tableau III: Propriétés des liaisons hydrogène.

	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
D... A	2.2-2.5	2.5-3.2	3.0-4.0
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

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 type Van Der Waals [22].

IV-1- 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. Les liaisons hydrogène fortes sont aussi formées quand la conformation de la molécule est telle, qu'elle force les groupes donneurs et les groupes accepteurs neutres à se lier par le biais d'un atome d'hydrogène. Elles sont connues dans ce cas sous le nom de liaisons hydrogène fortes forcées. Exemples : Dimères en phase gazeuse d'acides forts ou de bases fortes, Pseudohydrates, Complexes d'acide fluorhydrique.

IV-2- 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. Acides. Exemples : Alcools, Phénols, Hydrates, Molécules biologiques.

IV-3-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. Les meilleurs exemples pour ce type de liaisons sont 16 observés dans les phases gazeuses comme dans les réactions d'addition de HF, HCl , HBr et HCN avec N₂, CO, OCs et CO₂ qui ont une énergie d'environ 3Kcal/Mole-1 [23]. Dans certains cas l'atome accepteur participe avec des électrons comme dans un cycle aromatique.

V- Caractéristiques des liaisons hydrogènes :

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 [24]. On peut classer les liaisons hydrogène selon leurs attachements en cinq catégories :

V-1 Liaison hydrogène à trois centres :

L'atome d'hydrogène est engagé dans trois liaisons, une covalente, et deux hydrogène. 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 r_1 est différente de r_2 [25] (figure 3).

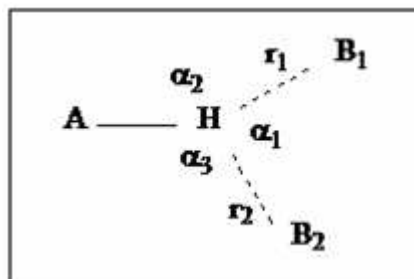


Figure [3] : Liaison hydrogène à trois centres

V-2 Liaison hydrogène chélatée :

L'atome d'hydrogène est lié à trois atomes. Il établit une liaison covalente et deux liaisons hydrogène avec deux atomes accepteurs qui sont liés au même atome X [25, 26] (figure 4a), la figure 4b présente aussi une liaison hydrogène chélatée, dans ce cas les deux liaisons hydrogène sont à deux centres (figure 4b).

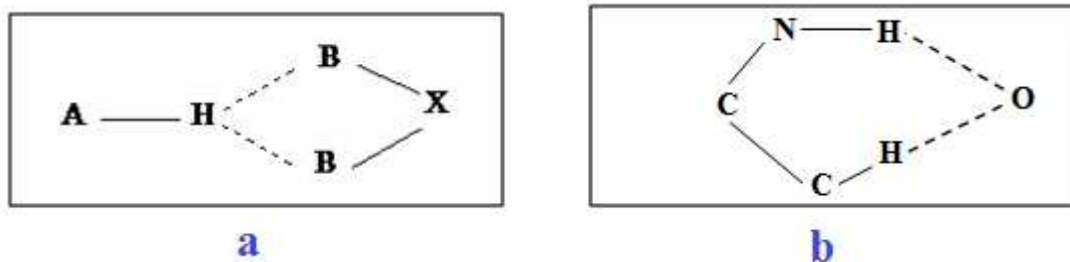


Figure [4] : Liaison hydrogène chélatée

V-3 Liaison hydrogène bifurquée :

La combinaison de deux configurations à trois centres conduit à une configuration bifurquée, où ces liaisons à trois centres ne sont pas coplanaires et font un angle de l'ordre de 50° [27] (Figure 5).

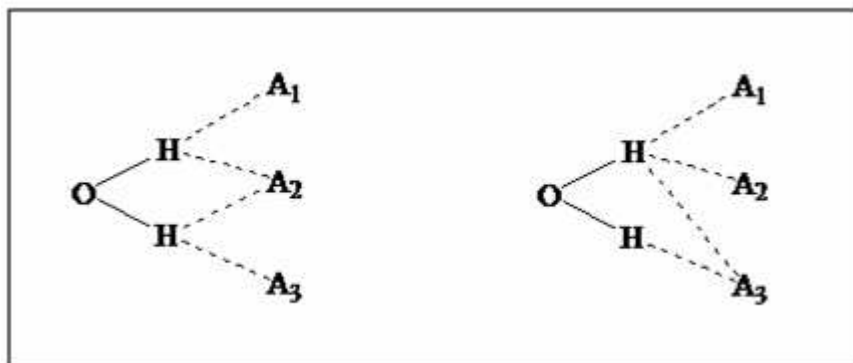


Figure [5]: Liaison hydrogène bifurquée.

V-4 Liaison d'hydrogène à quatre centres :

Les liaisons à quatre centres (à trois groupements accepteurs), sont rarement observées dans les structures cristalline. 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 supérieurs à 90° [21] (figure 6).

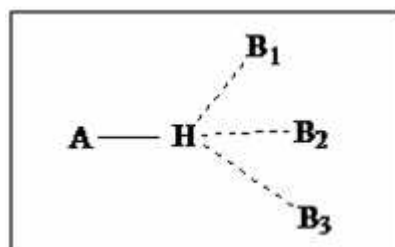


Figure [6]: Liaison d'hydrogène à quatre centres.

V-5 Liaison hydrogène Tandem :

La liaison hydrogène tandem est généralement observée dans la structure de la molécule d'eau où les atomes d'hydrogène sont désordonnés (figure 7). 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 [28].

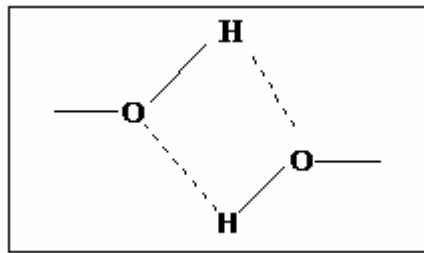


Figure [7]: Liaison hydrogène Tandem.

VI- Construction des graphes des liaisons hydrogène (Théorie des Graphes) :

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 [5, 6, 29, 30] La théorie des graphes (dits la théorie de Bernsein) permet de décrire les réseaux de liaisons hydrogène présentes dans le cristal en utilisant des lettres et des chiffres [31].

Pour établir un graphe qualitatif il faut :

1. Réduire la structure cristalline en points représentant les atomes, en liaisons covalentes et en liaisons hydrogène.
2. Libeller les différentes liaisons hydrogène symétriquement indépendantes.
3. Suivre les deux orientations possibles :
 - ❖ Du donneur à l'accepteur ($D \rightarrow A$), cette liaison s'écrit : \vec{a}
 - ❖ De l'accepteur au donneur ($A \rightarrow D$), la liaison est notée : \tilde{a}

La nomenclature et les principes de cette méthode sont :

- Tous les modèles de liaison hydrogène sont désignés par : C pour les chaînes, R pour les cycles, D pour les complexes ou modèles finies et S pour les liaisons hydrogène intramoléculaires.
- Le nombre de donneurs et accepteurs de liaison hydrogène sont notés respectivement (d) et(a).
- Le nombre d'atome noté (n) est appelé le degré du modèle.

Pour éviter les ambiguïtés dues à l'application de cette approche sur les modèles de liaison hydrogène, des niveaux plus hauts doivent être obtenus en combinant les différentes liaisons. Ces niveaux sont définis par des symboles : $N_n(a,b,c\dots)$ où n est le niveau et a, b, c , dénotent les différents types des liaisons hydrogène [32] (figure 8).

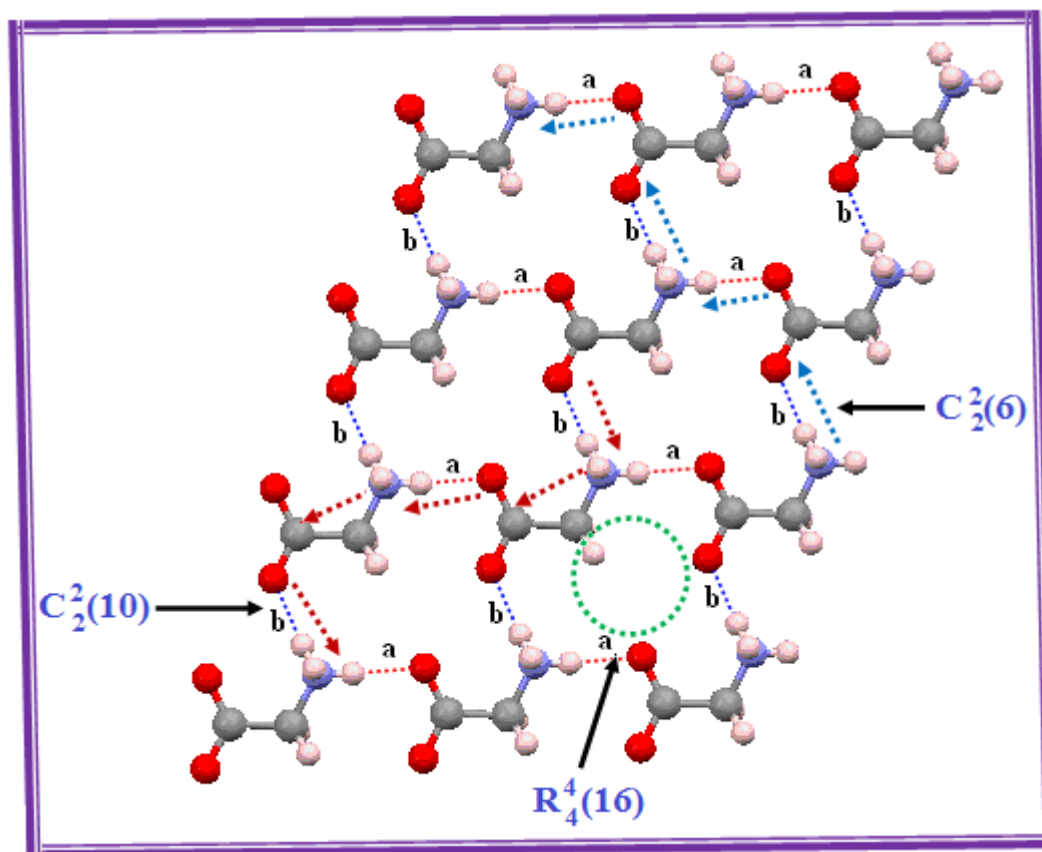


Figure [8]: Graphe montrant le niveau binaire de l' β -glycine [33].

VII- Techniques expérimentales dans l'étude des liaisons hydrogène:

La diffraction des rayons X est une technique expérimentale de choix pour caractériser la structure tridimensionnelle d'un composé à l'état cristallin, en association ou non avec d'autres molécules. En effet, la localisation des positions atomiques constituant un édifice moléculaire cristallin permet, d'une part, de décrire la géométrie d'une conformation stable du système en termes de longueur de liaison, d'angle de valence et d'angle de torsion.

D'autre part, l'examen des forces intermoléculaires (interactions électrostatiques, ponts hydrogène, interaction π , contacts de van der Waals...) assurant la cohésion cristalline fournit des interactions sur les liaisons faibles susceptibles d'être mises en jeu lors des différentes interactions intermoléculaires [34, 35].

CHAPITRE II

*Etude structurale et liaisons hydrogène du
composé :*

Di (L-valinium monohydrogènposphite)



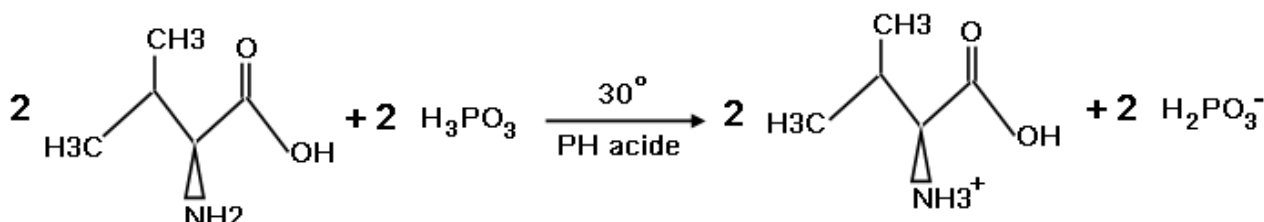
I-Introduction :

La Valine est un acide aminé des plus commun, on le caractérise de branché à cause de sa structure moléculaire. La valine est essentielle pour le corps et on la retrouve en forte concentration dans les tissus musculaires. Cet acide aminé n'est pas faisable par le corps, les apports doivent donc venir de l'alimentation ou des suppléments. Par contre les plantes la synthétisent à partir de l'acide pyruvique, de même que pour la L-Leucine.

La Valine possède des effets stimulants sur le métabolisme et elle est nécessaire au métabolisme musculaire, à la réparation du muscle et à la croissance des tissus. Elle permet de maintenir une balance azotée positive. Comme il s'agit d'un acide aminé branché, elle peut servir de source d'énergie musculaire et préserver les réserves de glucose par ce biais.

II- Partie expérimentale:

Les monocristaux du composé di(valinium monohydrogenphosphite) sont obtenus après chauffage et par évaporation lente d'un mélange équimolaire de la L-valine et de l'acide phosphoreux. La solution est maintenue sous agitation pendant 20 minutes. Après une semaine des cristaux transparents sous forme de plaquettes se sont formés.



III- Étude cristallographique:

III-1-Enregistrement des intensités:

La collection des données d'un monocristal de dimensions 0.4x0.4x0.2 mm a été réalisée à température ambiante à l'aide d'un diffractomètre à quatre cercles Enraf Nonius [36] équipé d'un détecteur bidimensionnel de type CCD, utilisant la radiation K_α de Mo ($\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$). Les données cristallographiques et les conditions d'enregistrement sont consignées dans le tableau I.

III-2-Résolution et affinement de la structure:

La résolution de la structure a été effectuée en utilisant l'ensemble des programmes disponibles dans le logiciel WinGX [37]. Le modèle structural a été proposé par les méthodes directes à l'aide du programme Sir92 [38]. Tous les atomes d'hydrogène ont été localisés sur des cartes de Fourier différence. Les paramètres des atomes d'hydrogène liés aux atomes d'azote et d'oxygène sont affinés avec leurs facteurs d'agitations thermiques isotropes tel que $U_{iso}(H) = 1.2U_{eq}(N, O)$. Les atomes d'hydrogène liés aux atomes de carbone sont affinés en mode rigide avec $C-H = 0.93 \text{ \AA}$ et $U_{iso}(H) = 1.2U_{eq}(C)$. L'affinement final du modèle structural effectué par la méthode des moindres carrés, à l'aide du programme SHELXL-97 [39], en considérant les facteurs d'agitation thermique isotropes des atomes d'hydrogène, contrairement aux autres atomes qui sont définis comme anisotropes, conduit aux facteurs de reliabilité non pondéré $R = 5.07\%$ et pondéré $R_w = 13.18\%$ avec une estimée de la variance de 1.0370 (Tableau I). Les coordonnées atomiques, facteurs d'agitation thermique, distances interatomiques et angles de liaisons sont données respectivement dans les tableaux 1, 2, 3,4 (Annexe 1).

Tableau I : Données cristallographiques et conditions d'enregistrement :

<p><u>Données cristallographiques</u> $2C_5H_{12}NO_2^+$, $2H_2PO_3^-$ $M_r = 398.28$ Monoclinique P 2₁/n $a = 16.3590(3) \text{ \AA}$ $b = 6.2540(3) \text{ \AA}$ $c = 19.4560(3) \text{ \AA}$ $\beta = 109.238(1)^\circ$ $V = 1879.37(8) \text{ \AA}^3$ $Z = 4$ $D_x = 1.408 \text{ Mg m}^{-3}$</p> <p><u>Condition d'enregistrement</u></p> <p>Diffractomètre Enraf-Nonius Kappa CCD $T = 100 \text{ K}$ Mode de balayage : φ 3674 réflexions mesurées. 3674 réflexions indépendantes. 3303 réflexions avec $I > 2\sigma(I)$ Plaquette, $0.4 \times 0.4 \times 0.2$</p> <p><u>Affinement :</u> $R = 0.0507$ $R_w = 0.1318$ $S = 1.0370$ 3674 réflexions 249 paramètres</p>	<p>$F_{000} = 848$</p> <p>Radiation $K\alpha$ du Mo La maille à partir de 3674 réflexions $\theta = 1.42 - 26.36^\circ$</p> <p>$R_{int} = 0.000$ $\theta_{max} = 26.36^\circ$</p> <p>$h = 0 \longrightarrow 20$ $k = 0 \longrightarrow 7$ $l = -23 \longrightarrow 22$ $(\Delta/\sigma)_{max} = 0.049$ $\Delta\rho_{max} = 0.899 \text{ e \AA}^{-3}$ $\Delta\rho_{min} = -0.319 \text{ e \AA}^{-3}$</p>
---	--

IV - Description de la structure:

La détermination structurale du di(L-valinium monohydrogenphosphate) a permis d'établir le modèle structural, dont l'unité asymétrique est constituée de deux cations organiques monoprotonés et de deux anions monohydrogenphosphate.

La cohésion de la structure est assurée par des liaisons hydrogène moyennes et faibles qui relient les anions monohydrogenphosphate et les cations valinium (figure 1).

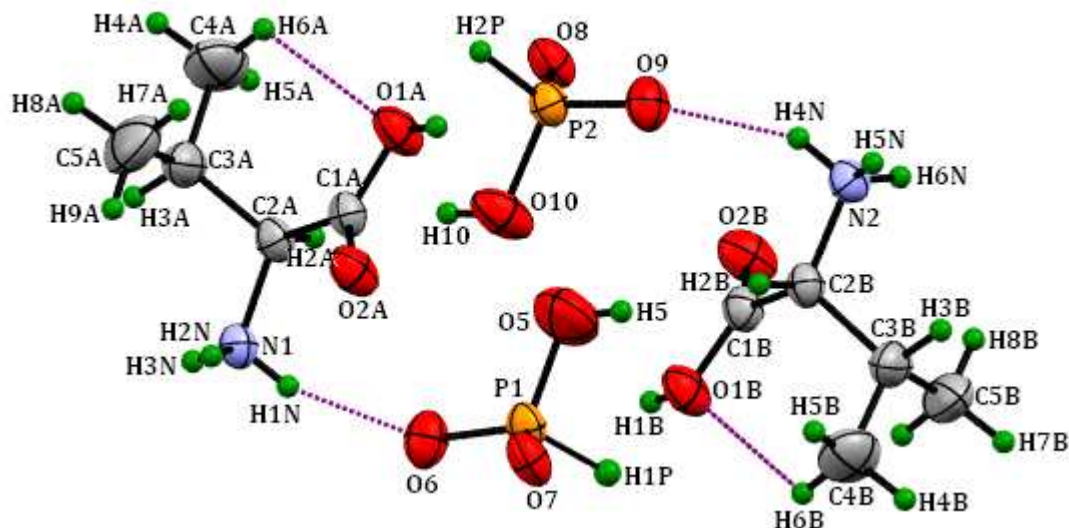


Figure [1]: ORTEP-3[40]-L'unité asymétrique du composé di(valiniummonohydrogenphosphate).

L'empilement cristallin de la di(L-valinium monohydrogenphosphate) est constitué par un enchaînement et un croisement suivant les deux rangées [011] et [0-11] de couches mixtes valinium A - monohydrogenphosphate 2 à $c = 1/4$ et $3/4$; et un enchaînement de double couches mixtes valinium B - monohydrogenphosphate 1 suivant les même rangées respectivement à $c = 0$ et $1/2$ (figure 2).

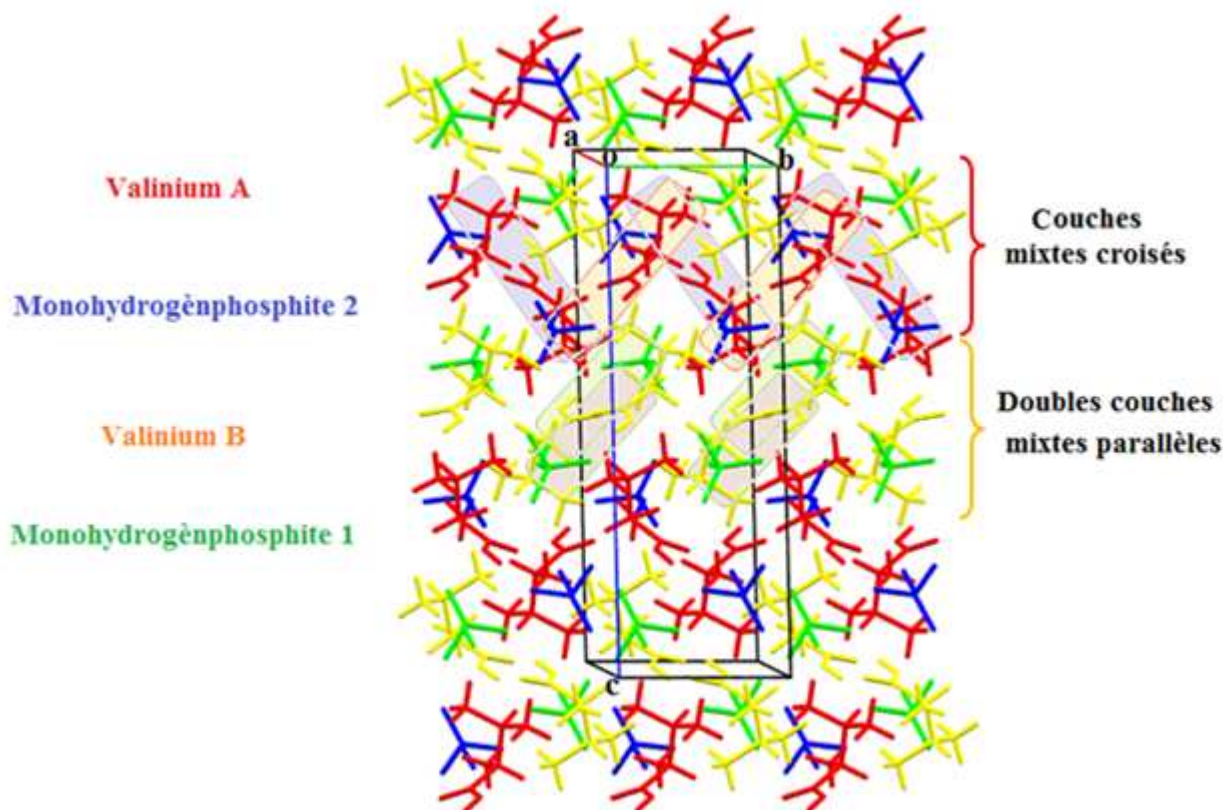


Figure [2]: Empilement de la structure parallèlement au plan (\vec{b}, \vec{c}) .

V- Les liaisons hydrogène:

Le composé étudié est engagé dans quinze liaisons hydrogène, dont quatre moyennement fortes de type O-H...O, sept moyennes de type N-H...O et quatre liaisons faibles de type C-H...O qui renforcent la cohésion de l'édifice cristallin (tableauII).

Tableau II: Liaisons hydrogène dans le composé di(L-valinium monohydrogenphosphate).

D-H...A	D-H (Å°)	H...A (Å°)	D-A (Å°)	D-H...A(°)
O1A-H1A...O8 ⁱ	0.76(3)	1.76(3)	2.510(2)	168(4)
O1B-H1B...O7 ^v	0.79(4)	1.75(4)	2.536(2)	171(4)
O5-H5...O2B	0.82(4)	2.27(4)	2.025(3)	154(4)
O10-H10...O2A ^{ix}	0.82(4)	1.91(4)	2.630(2)	146(4)
N1-H1N...O6 ⁱⁱ	0.84(3)	1.98(3)	2.786(2)	162(2)
N1-H2N...O6 ⁱⁱⁱ	0.87(2)	1.94(3)	2.799(2)	168(2)
N1-H3N...O7 ^{iv}	0.86(2)	1.99(2)	2.838(2)	169(2)
N2-H4N...O2B ^{vi}	0.90(3)	2.58(3)	3.132(3)	121(2)
N2-H4N...O9 ^{vii}	0.90(3)	2.09(3)	2.846(2)	141(2)
N2-H5N...O8	0.94(2)	1.94(2)	2.847(2)	161(2)
N2-H6N...O9 ^{viii}	0.84(3)	1.90(3)	2.727(2)	169(3)
C4A-H6A...O1A	0.96	2.51	3.081(4)	118
C4B-H6B...O1B	0.96	2.60	3.160(3)	118
C5B-H8B...O8	0.96	2.52	3.429(3)	157
C3A-H3A...O7 ^{iv}	0.97	2.64	3.475(3)	142

Code de symétrie:(i): $x, -1+y, z$; (ii): $1-x, 1-y, 1-z$; (iii): $1/2+x, 1/2-y, -1/2+z$; (iv): $1/2+x, 3/2-y, -1/2+z$;

(v): $1/2-x, -1/2+y, 1/2-z$; (vi): $-x, 1-y, -z$; (vii): $-1/2+x, 3/2-y, -1/2+z$; (viii): $1/2-x, 1/2+y, 1/2-z$; (ix): $x, 1+y, z$.

V-1- Environnement des cations L-valinium:

V-1-a- Environnement de l'entité cationique A:

L'entité cationique A est environnée par quatre anions, établissant ainsi sept liaisons hydrogène, dont trois de type N-H...O, deux de type O-H...O et deux liaisons hydrogène faibles de type C-H...O. On note la présence d'une liaison intramoléculaire, et une liaison chélatée mise en jeu entre les atomes d'hydrogène H3N du groupement $-NH_3^+$, l'atome d'hydrogène H3A et l'atome d'oxygène O7 de l'anion $H_2P(1)O_3^-$. Toutes les autres liaisons sont à deux centres (figure 3).

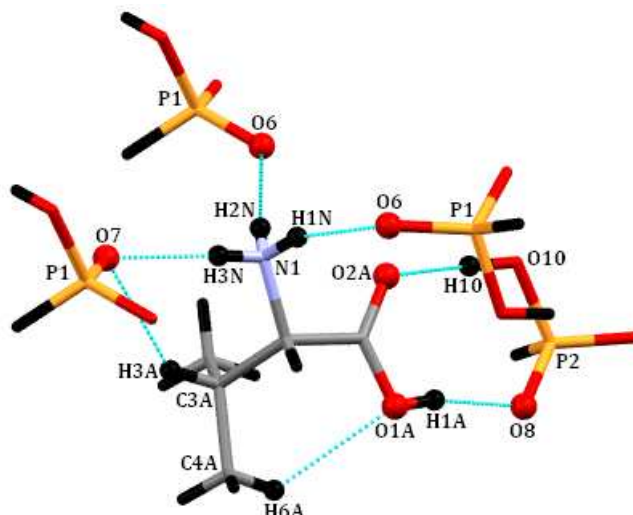


Figure [3]: Environnement du cationvalinium A.

V-1-b- Environnement de l'entité cationique B:

L'entité cationique B est environnée par un seul cation et quatre anions différents, établissant ainsi neuf liaisons hydrogène, dont sept modérées: deux de type O-H...O qui sont à deux centres, cinq de type N-H...O, et deux liaisons faibles de type C-H...O. L'entité cationique présente une liaison à trois centres entre l'atome H4N du groupement $-NH_3^+$, O2B du groupement carboxylique d'un cation valinium B, et O9 de l'anion $HP(2)O_3^-$. On note aussi la présence d'une liaison chélatée entre l'atome H5N du groupement $-NH_3^+$, l'atome H8B, et l'atome O8 de l'anion $H_2P(2)O_3^-$ (figure 4).

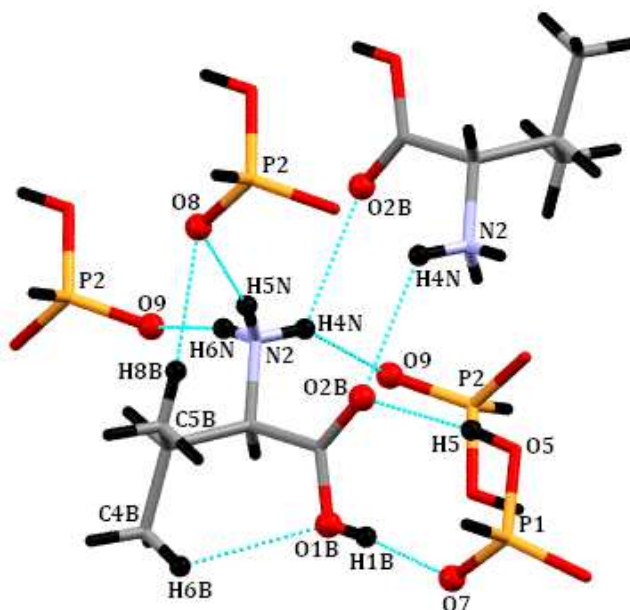


Figure [4]: Environnement du cation B.

VI-2- Environnement des anions monohydrogenphosphite:

Les deux anions monohydrogenphosphite $H_2PO_3^-$ présentent le même environnement, ils sont entourés de quatre cations organiques, formant ainsi une seule interaction intermoléculaire, de type O-H...O (figure 5).

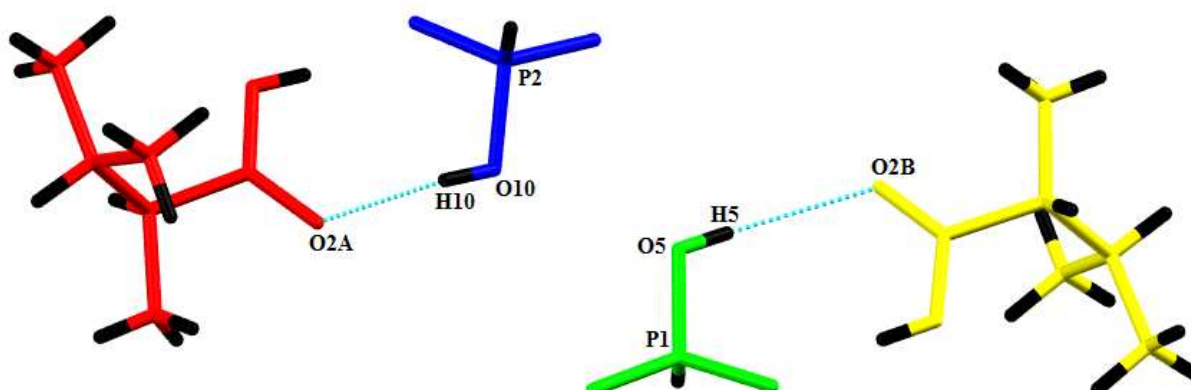


Figure [5] : Environnement des deux anions monohydrogénophosphite $H_2PO_3^-$.

VII- Graphes du modèle des liaisons hydrogène:

Pour bien comprendre l'agencement des différentes entités dans cette structure cristalline via les liaisons hydrogène, nous avons utilisé la théorie des graphes.

VII- 1 : Graphe qualitatif :

Pour établir un graphe qualitatif il faut :

1. Réduire la structure cristalline en points représentant les atomes, en liaisons covalentes et en liaisons hydrogène.
2. Libeller les différentes liaisons hydrogène symétriquement indépendantes.
3. Suivre les deux orientations possibles :
 - ✓ Du donneur à l'accepteur ($D \rightarrow A$), cette liaison s'écrit \vec{a}
 - ✓ De l'accepteur au donneur ($A \rightarrow D$), la liaison est noté \overleftarrow{a}

Un graphe est une organisation des différentes liaisons hydrogène présentes dans le composé. Les modèles de liaison hydrogène sont désigné par :

C : pour les chaînes infinies.

D : pour les chaînes finies.

R : pour les cycles.

S : pour les liaisons hydrogène intramoléculaires.

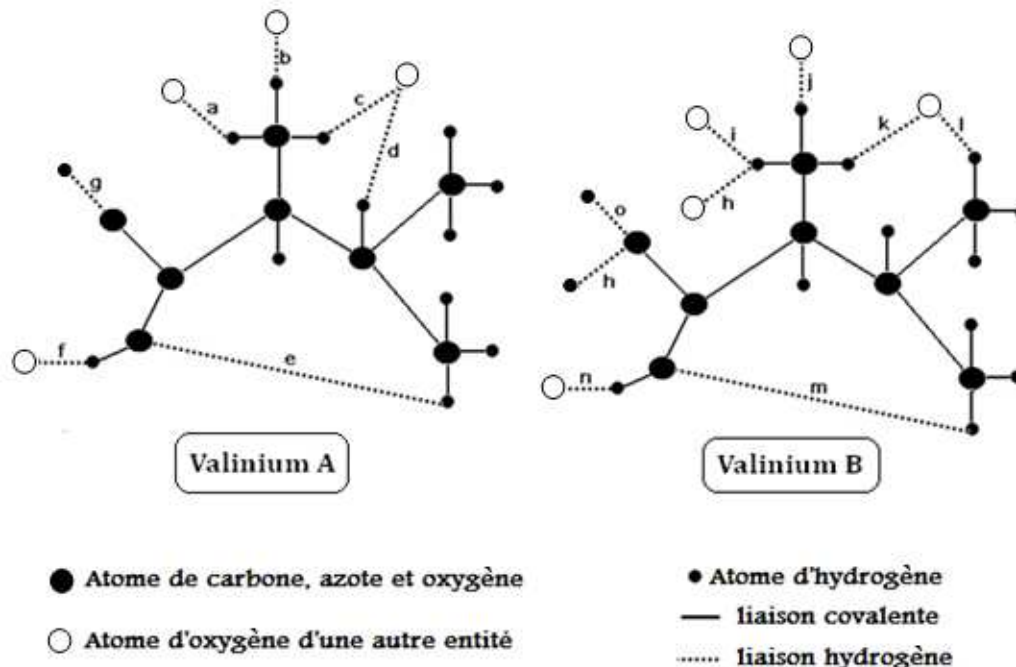


Figure [6] : Représentation graphique des liaisons hydrogène dans le composé di(L-valinium monohydrogenphosphite).

La combinaison de ces symboles (R, C, D et S) et les deux orientations (\vec{a} ou \overleftarrow{a}), forme le graphe qualitatif des liaisons hydrogène noté $G(\vec{a})$ ou bien $G(\overleftarrow{a})$.

Le cation valinium A étudié présente sept liaisons hydrogène établies entre cation-anion, parmi eux, six liaisons hydrogène (**a,b,c,d,f,g**) ont comme modèle des chaînes finies (figure 7a), et une liaison hydrogène (**e**) intramoléculaire (figure 7b).

Le cation valinium B présente neuf liaisons hydrogène, dont six (**i,j,k,l,n,o**) forment des chaînes finies (figure 7a), une liaison hydrogène (**m**) intramoléculaire, et une liaison (**h**) qui forme un cycle (figure 7b).

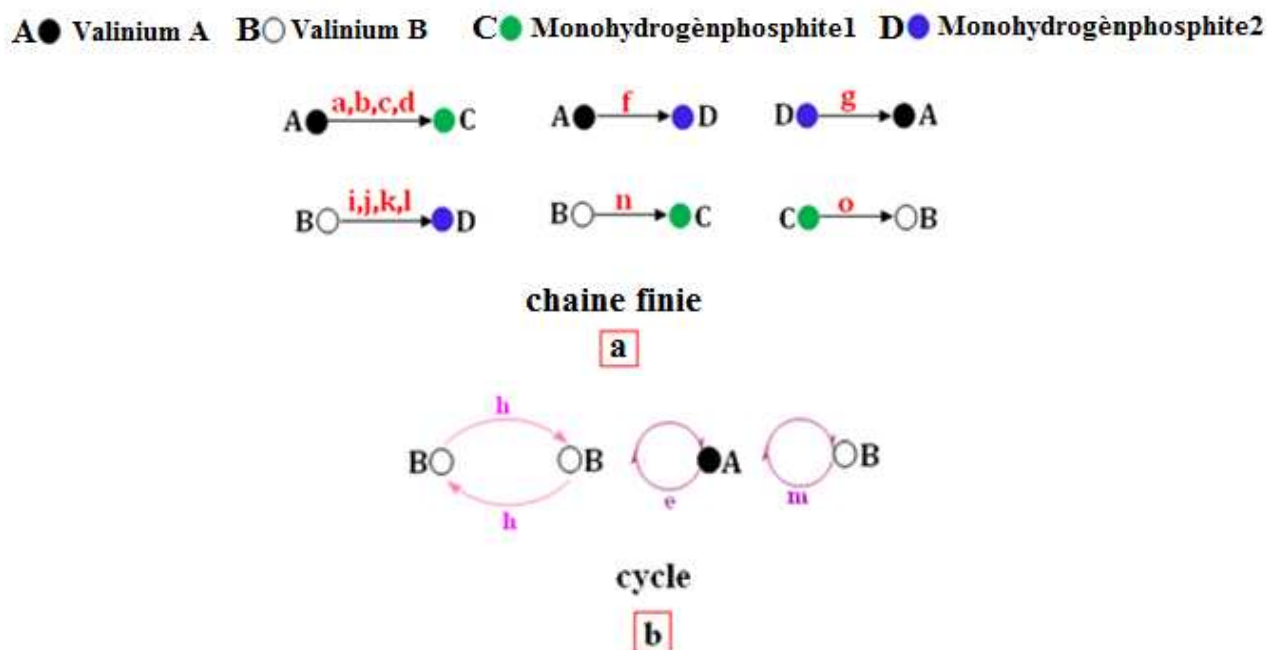


Figure [7] : Représentation schématique des différentes liaisons hydrogène.

VII- 2 - Graphe quantitatif:

Le graphe quantitatif dérive du graphe qualitatif, ce dernier inclut:

- ❖ Un indice **d** pour dénombrer le nombre d'atomes donneurs dans le modèle.
- ❖ Un exposant **a** qui représente le nombre d'atomes accepteurs.
- ❖ Un nombre **n** qui définit le nombre des atomes participant dans la liaison hydrogène.

Pour déterminer le nombre d'atomes participants dans la liaison hydrogène (**n**), le nombre de donneur (**d**), et le nombre d'accepteur (**a**), il faut dénombrer les liaisons covalentes entre deux liaisons hydrogène, en passant par le chemin le plus court (Tableaux IIIa, IIIb Annexe 1).

a- Détermination du nombre de donneur « d » :

Si le nombre de liaison covalente entre deux liaisons hydrogène **queue à queue** (\overline{aa}) est égale à zéro, le nombre de donneur, c'est le nombre de liaisons hydrogène présentes dans le graphe qualitatif moins un.

Si le nombre de liaison covalente entre deux liaisons hydrogène **queue à queue** est différent de zéro, le nombre de donneur c'est le nombre de liaisons hydrogène présentes dans le graphe qualitatif.

b- Détermination du nombre d'accepteur « a » :

Si le nombre de liaison covalente entre deux liaisons hydrogène **tête-à-tête** (\vec{aa}) est égale à zéro, le nombre d'accepteur c'est le nombre de liaisons hydrogène présentes dans le graphe qualitatif moins un.

Si le nombre de liaison covalente entre deux liaisons hydrogène **tête-à-tête** est différent de zéro, le nombre d'accepteur c'est le nombre de liaisons hydrogène présentes dans le graphe qualitatif.

c- Détermination du nombre d'atomes participants dans la liaison hydrogène :

Le nombre d'atomes participants dans la liaison hydrogène (**n**) c'est le nombre de liaisons hydrogène présentes dans le graphe qualitatif plus le nombre de liaison covalente entre les différentes orientations.

Exemple 1:

➤ Soit le graphe qualitatif C(\vec{ca})

- Le nombre de donneur **d** : $d = 2$ (absence de liaison hydrogène queue à queue (voir tableau IIIa, annexe 1).
- Le nombre d'accepteur **a** : $a = 2$ (Le nombre de liaison covalente entre les deux liaisons hydrogène qui sont tête à- tête est différent de zéro ($\vec{ca} = 2$ Voir tableau IIIa annexe 1)
- Le degré $n = 2 + 2 + 2 = 6$ (pour le **2** il y a deux liaisons covalentes entre les deux liaisons (\vec{ca}), le chiffre 2 correspond au nombre de liaisons covalentes entre les deux liaisons (\vec{ca}))

Le graphe quantitatif s'écrit: **C²₂(6)**

Exemple2:

- Soit le graphe qualitatif D(\vec{hj})
- Le nombre de donneur pour cette chaîne finie **d** est égale à 3, sachant que le nombre de liaison covalente entre les deux liaisons hydrogène queue-à-queue (\vec{hj}) est égale à **deux** (Tableau IIIb annexe 1).
- Le nombre d'accepteur **a** est égale à 3 (absence de liaison hydrogène tête-à-tête).
- Le degré $n = 3 + 2 + 4 = 9$.

Le graphe quantitatif s'écrit : **D³₃(9)**

Exemple3:

➤ Soit le graphe qualitatif R(\vec{ki})

- Le nombre de liaison covalente entre deux liaisons hydrogène queue à queue est différent de zéro (\vec{ki})= 2 Voir tableau IIIb) donc $d = 4$
- Le nombre de liaison covalente entre deux liaisons hydrogène tête-à-tête est différent de zéro (\vec{ki})=2 Voir tableau IIIb), donc $a = 4$
- Le degré n:
- ✓ Il existe deux orientations de type **queue à queue** ou le nombre de liaison covalente est égale à 2 (\vec{ki})=2.
- ✓ Deux orientations de type tête-à-tête (\vec{ki})= 2

$$n = 2(2) + 2(2) + 4 = 12.$$

Le graphe quantitatif s'écrit donc : **R⁴₄(12)**.

VIII- Réseau de liaison hydrogène dans la Di(L-valinium monohydrogenphosphite) :

a) Liaison hydrogène de type O-H...O :

La structure cristalline du composé di (L-valinium monohydrogenphosphite) est assurée par quatre liaisons hydrogène moyennement fortes de type O-H...O, qui sont établies entre cations-anions. La plus forte liaison hydrogène est établie entre l'atome H1B de l'entité cationique B et O7 de l'anion $\text{H}_2\text{P}(2)\text{O}_3^-$. Toutes ces liaisons sont des chaînes finies notées **D**. Le graphe unitaire s'écrit: $\text{N1} = \text{DDDD}$ (figure 8). La combinaison binaire des liaisons hydrogène de type O-H...O, conduit à des cycles formés de huit atomes : $\text{N}_2 = \text{R}_2^2(8)$.

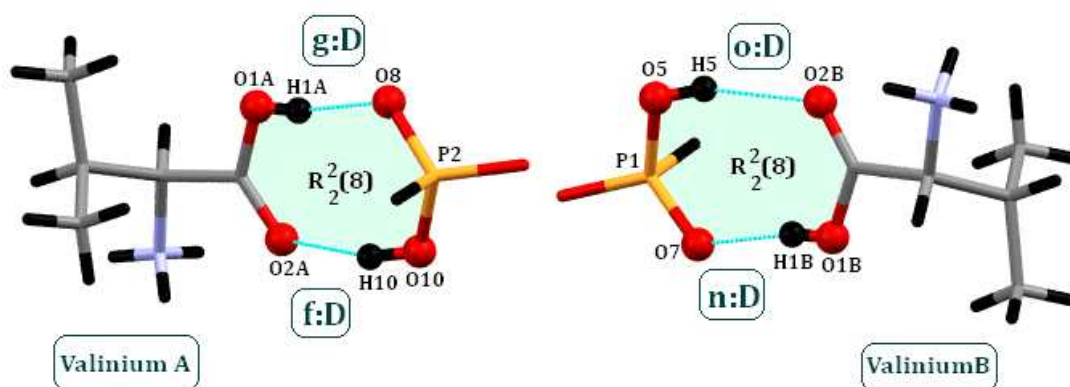


Figure [8] : Motifs des liaisons hydrogène de type O-H...O.

Ces cycles créent des couches mixtes croisées valinium A - monohydrogenphosphite 2 qui se déploient respectivement le long des rangées [011] et [0-11] à $c = 1/4$ et $3/4$ (figure 9a); et des double couches mixtes valinium B - monohydrogenphosphite 1 qui se développent aussi le long des mêmes rangées à $c = 0$ et $1/2$ (figure 9b).

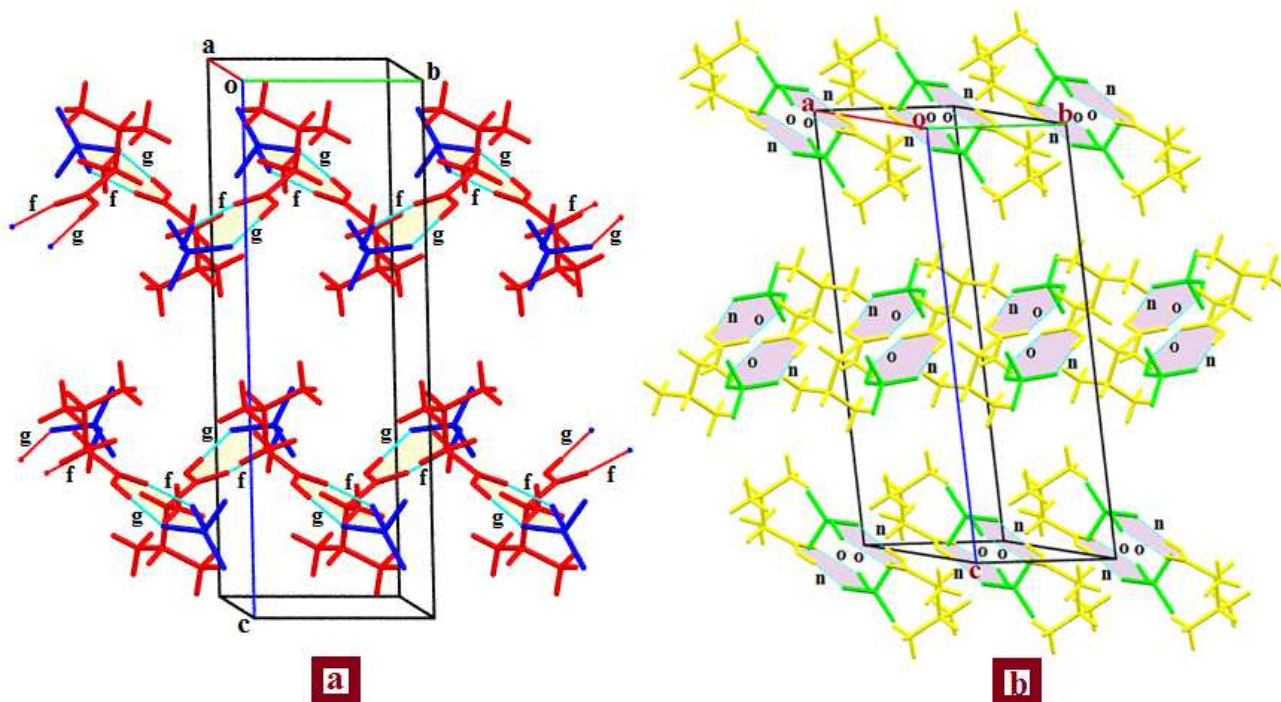


Figure [9]: Enchaînement de couches mixtes croisées et de double couche.

b) Liaison hydrogène de type N-H...O :

➤ b- 1- Liaisons hydrogène de type N-H...O entre les cations valinium B:

La structure étudiée établit une seule liaison hydrogène de type N-H...O entre cations, elle est mise en jeu entre les atomes H4N et O2B, et forme un cycle $R^2_2(10)$, suite à l'existence d'un centre d'inversion *i* (figure 10a). Cette liaison donne naissance à des dimères cationiques valinium B, qui se déploient parallèlement au plan (\vec{b}, \vec{c}) (figure 10b). Le graphe quantitatif s'écrit: $N_1 = R^2_2(10)$.

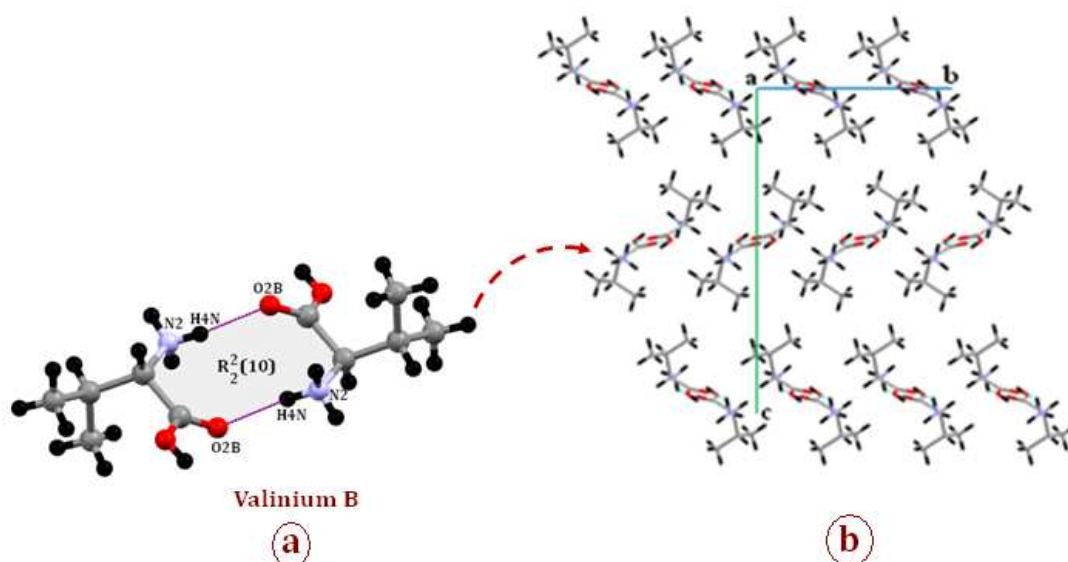


Figure [10] : Modèle de la liaison N-H...O et dimères cationiques.

➤ b- 2- Liaison hydrogène de type N-H...O entre cations et anions :

Les groupements ammonium $-NH_3^+$ des deux cations valinium A et B établissent chacun trois liaisons hydrogène moyennes de type N-H...O. Chaque liaison se présente sous forme de chaîne finie, qui a comme modèle **D**. Les graphes unitaires quantitatifs sont: $N_1 = \mathbf{DDD}$, $N_1' = \mathbf{DDD}$ (figure 11).

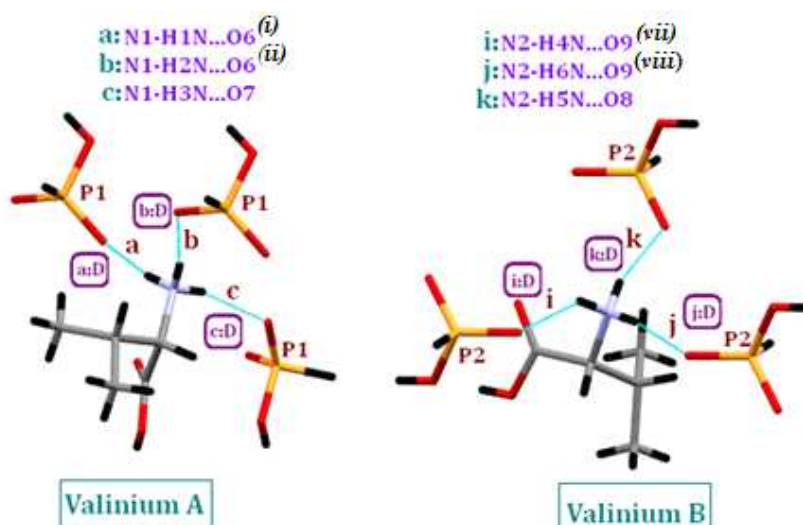


Figure [11]: Motifs des liaisons hydrogène de type N-H...O entre cations-anions.

La combinaison binaire et ternaire des liaisons hydrogène de type N-H...O via le groupement ammonium du cation valinium A donne :

- Des chaînes infinies $C^2_2(6)$ qui se développent le long de l'axe \vec{b} (figure 12a).
- Des chaînes infinies $C^2_2(4)$, $C^2_2(6)$ et des cycles $R^5_6(16)$ qui assurent la jonction entre les couches mixtes croisées (figure 12b).

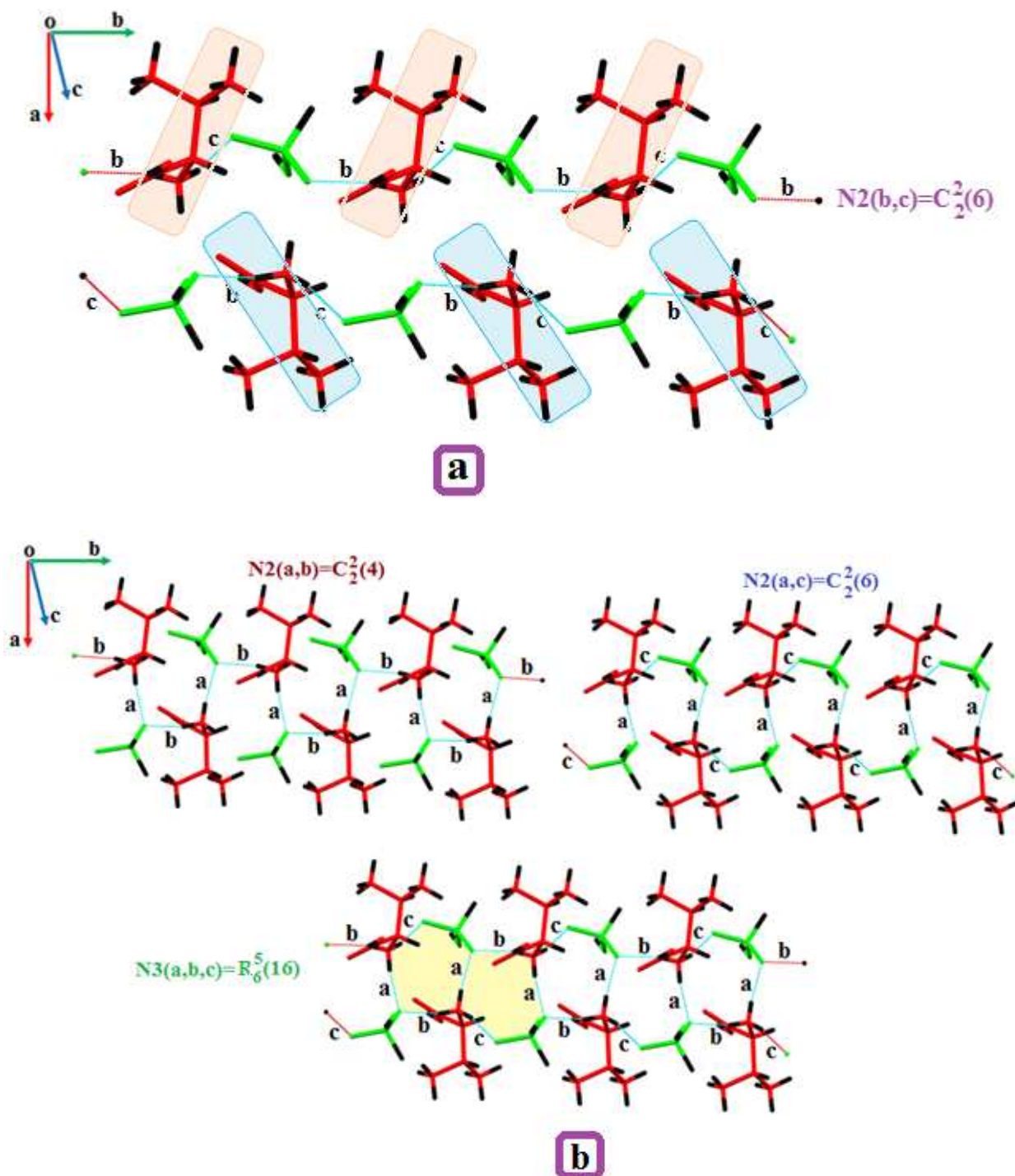


Figure [12]: Graphes quantitatifs binaire et ternaire des liaisons hydrogène de type N-H...O entre les couches mixtes croisées.

La combinaison binaire et ternaire des liaisons hydrogène de type N-H...O via le groupement ammonium du cation valinium **B** donne :

- Des chaînes infinies $C_2^2(6)$ qui se développent le long de l'axe \vec{b} (figure 13a).
- Des cycles $R_4^2(8)$, $R_4^4(12)$ et $R_6^5(16)$ qui assurent la jonction entre les doubles couches mixtes parallèles (figure 13b).

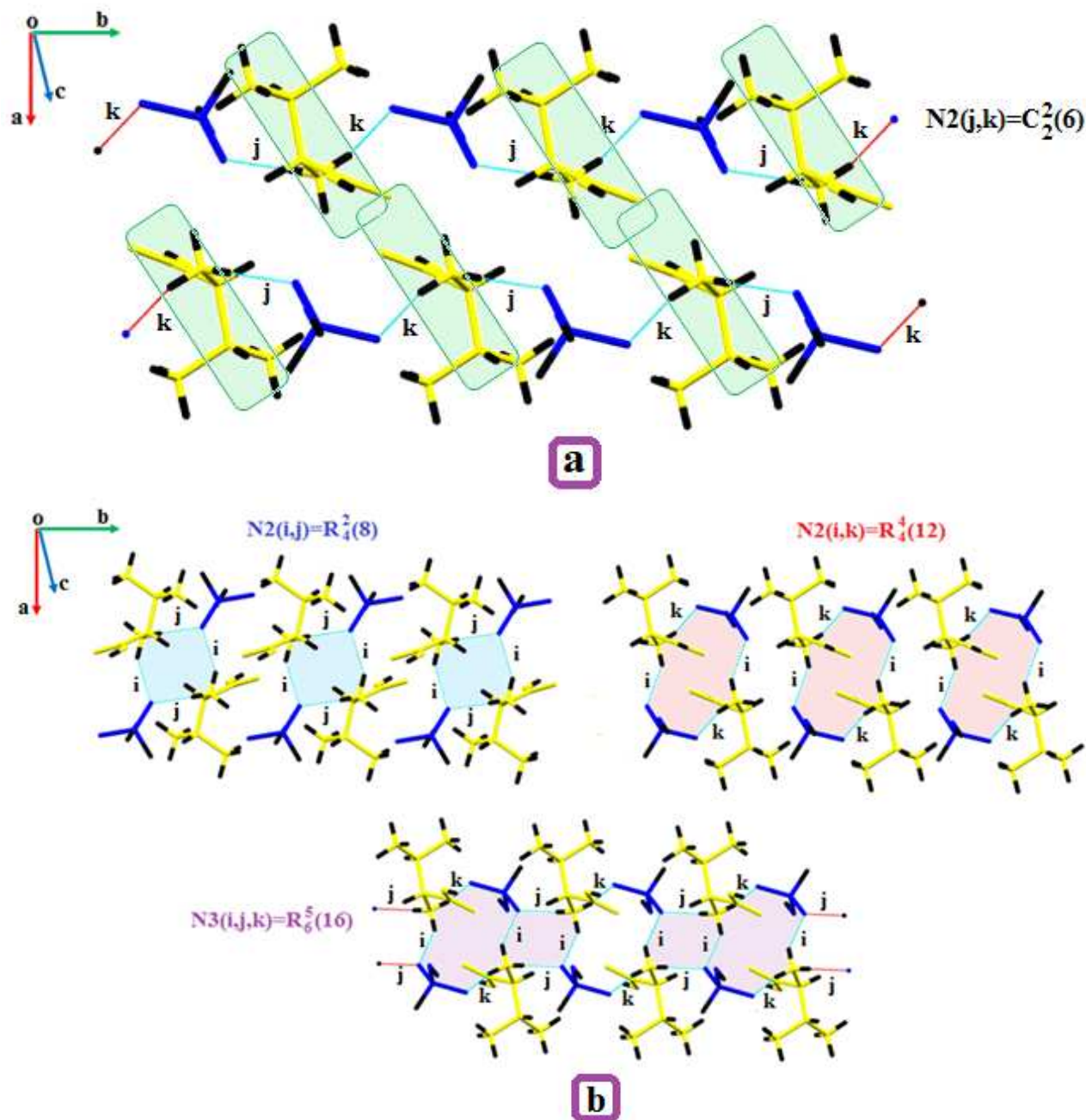


Figure [13]: Quelques graphes quantitatifs binaires et ternaires des liaisons hydrogène de type N-H...O entre les doubles couches mixtes.

La combinaison ternaire des liaisons hydrogène de type N-H...O établies entre cations et entre cations et anions, donne des cycles $R^3_3(11)$ qui se développent suivant l'axe \vec{b} (figure 14).

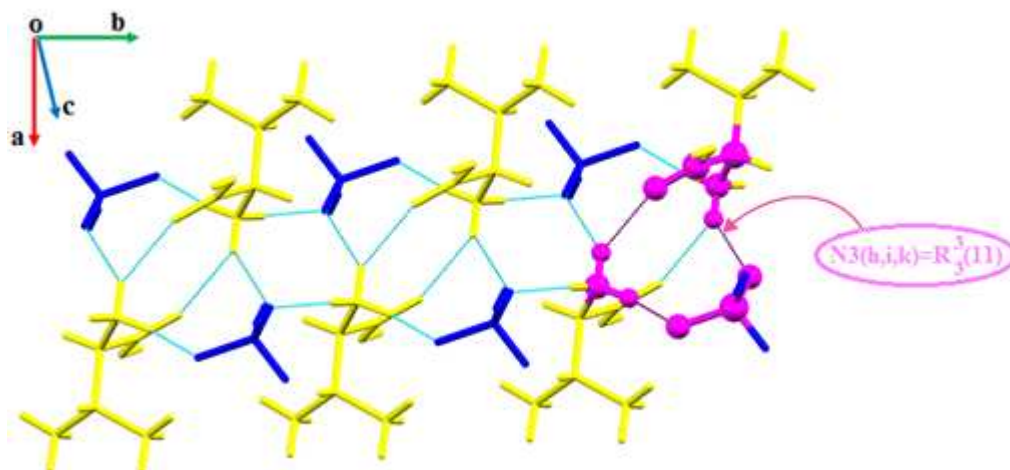


Figure [14]: Graphes quantitatifs ternaires des liaisons hydrogène de type N-H...O entre cations et entre cations-anions.

La jonction entre les couches mixtes croisées et les doubles couches mixtes est assurée par des chaînes finies $D^2_2(8)$, $D^3_3(13)$ et des cycles $R^4_4(18)$, suite à la combinaison binaire et ternaire de liaisons hydrogène de type N-H...O et O-H...O, formant ainsi un réseau tridimensionnel de liaisons hydrogène (figure 15).

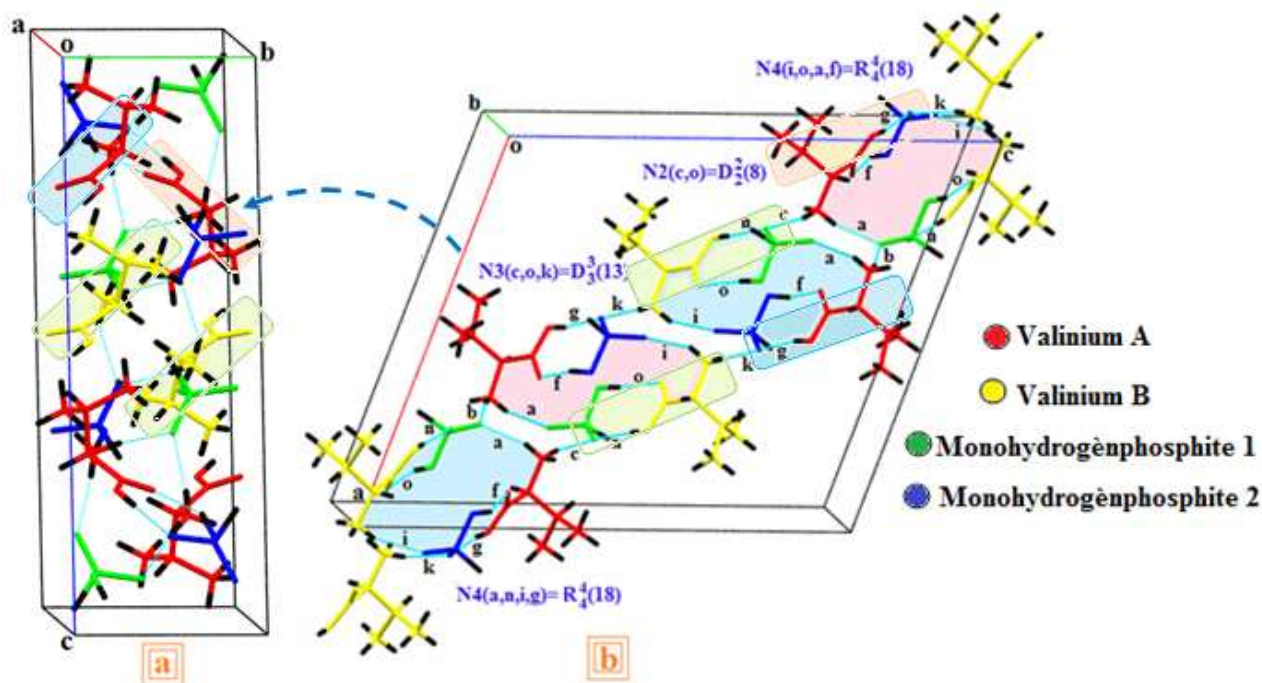


Figure [15]: Graphe binaire, ternaires et quaternaire quantitatif des liaisons hydrogène de type N-H...O et O-H...O entre cations-anions.

c) Liaisons hydrogène de type C-H ...O :

La structure du composé di(L-valinium monohydrogènephosphate) présente quatre liaisons hydrogène faibles de type C-H...O.

- Deux liaisons faibles entre le cation valinium **A** et l'anion monohydrogenphosphate **1**; et entre le cation valinium **B** et l'anion monohydrogenphosphate **2**
- Deux liaisons intramoléculaires.

Les motifs de ces liaisons sont notés respectivement **D** et **S(6)** (figure 16).

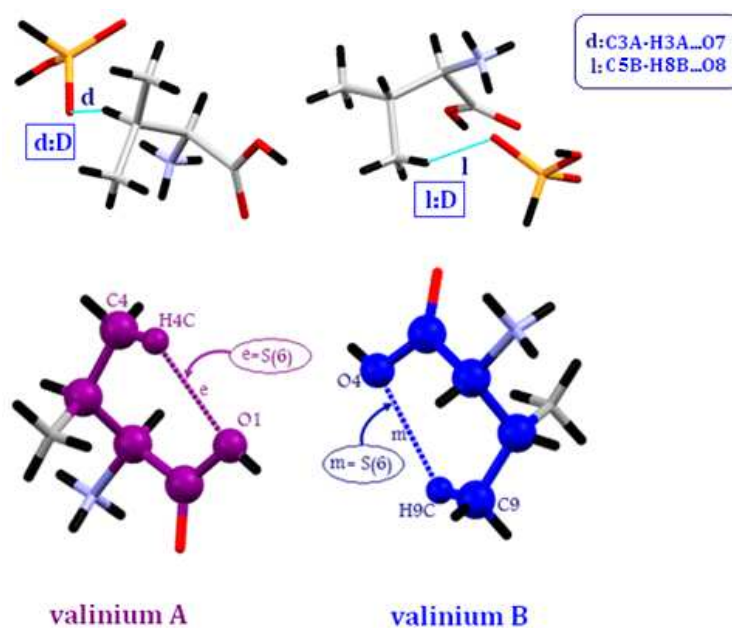


Figure [16]: Modèle de la liaison hydrogène de type C-H...O.

La jonction entre les différentes couches mixtes croisées et les doubles couches mixtes est assurée par un réseau tridimensionnel très complexe de liaisons hydrogène de type N-H...O, O-H...O et C-H...O (figure 17).

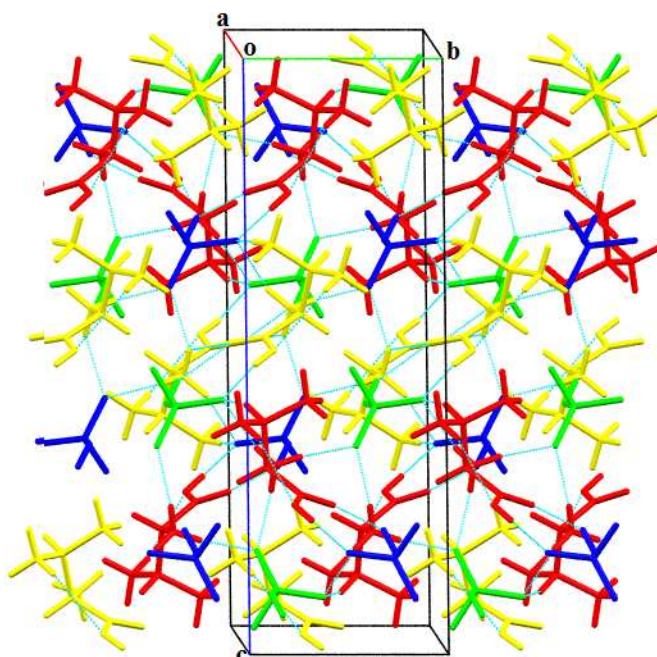


Figure [17]: Réseauté liaisons hydrogène dans le composé.

Le composé di(L-valinium monohydrogenphosphate) présente 15 liaisons hydrogène moyennes et faibles. Le graphe unitaire quantitatif s'écrit: $N=DDDDDDDDDDDDDR_2^2(10)S(6)S(6)$.

La combinaison binaire, ternaire et quaternaire des différents types de liaisons hydrogène donne naissance à des chaînes finies, infinies et principalement des cycles (figure 18 et 19).

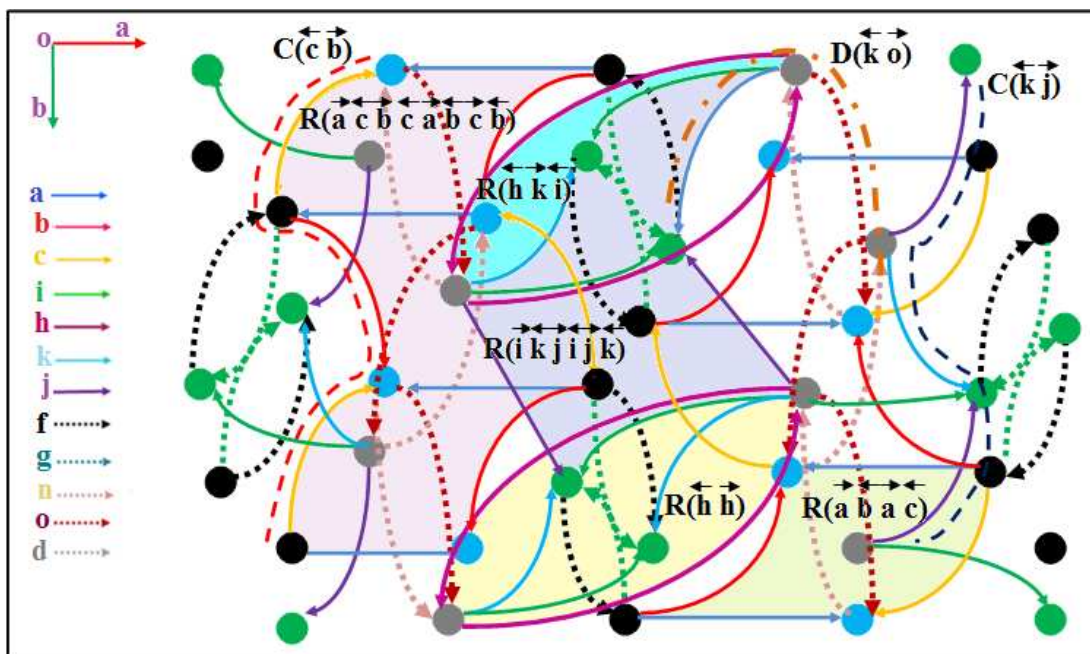


Figure [18]: Projection des différentes liaisons hydrogène suivant le plan (\vec{a}, \vec{b}) .

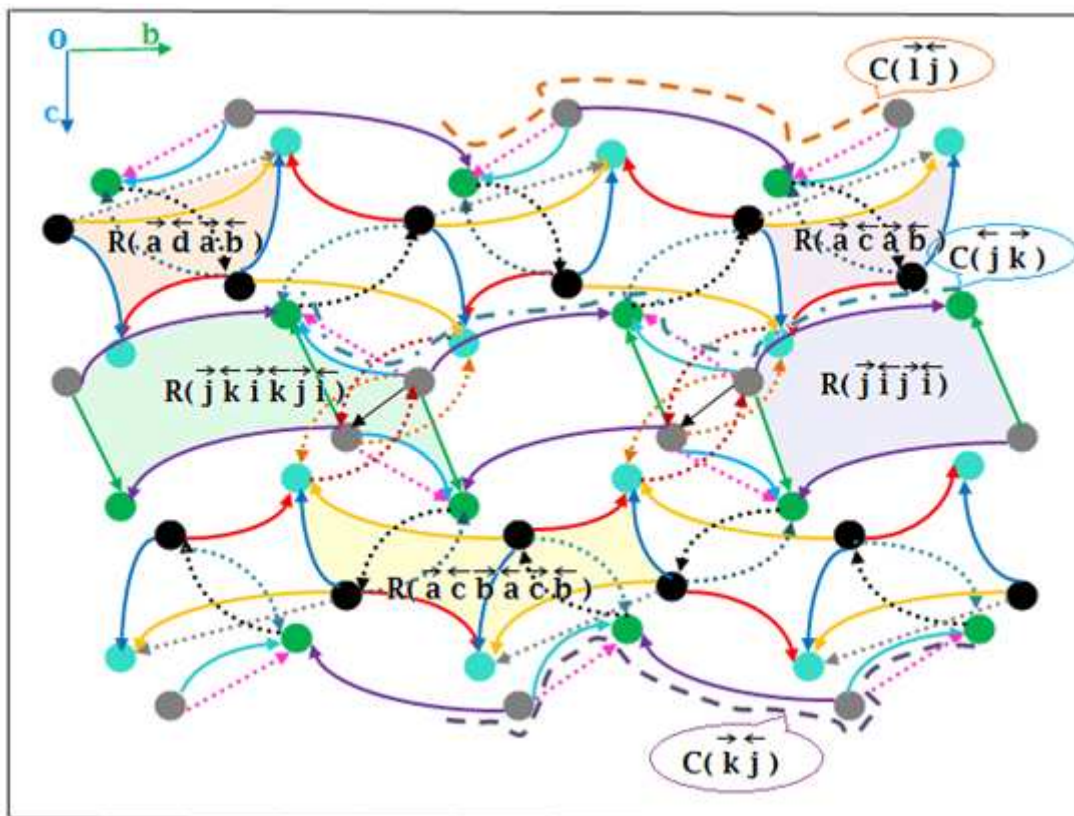


Figure [19]: Projection des différentes liaisons hydrogène suivant le plan (\vec{b}, \vec{c}) .

IX-Etude comparative :

L'étude comparative des liaisons hydrogène dans la structure DL-valinium nitrate [41] ($C_5H_{12}NO_2^+, NO_3^-$), DL-valinium perchlorate [42] ($C_5H_{12}NO_2^+, ClO_4^-$) et dans la structure di(L-valinium monohydrogenphosphite) du présent travail est effectuée dans cette partie (Tableau V).

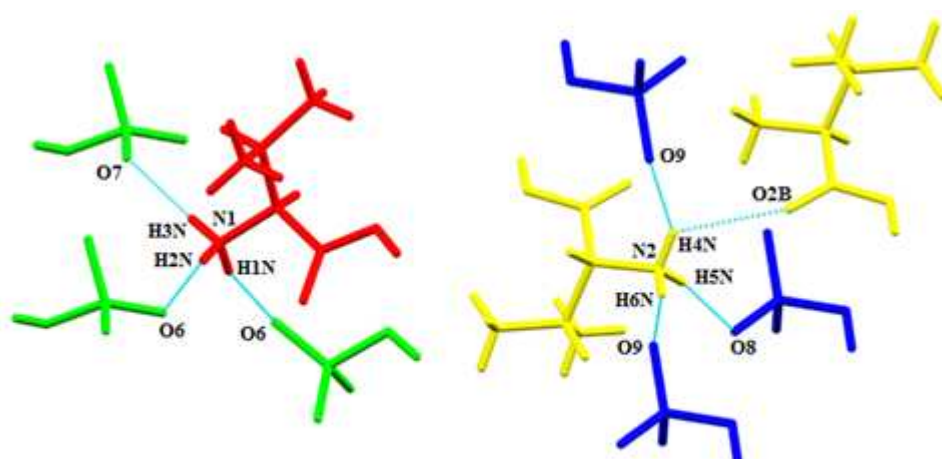
Tableau V : Données cristallographiques des trois composés.

Di(L-valinium monohydrogenphosphite)	DL-valinium nitrate	DL-valinium perchlorate
$2C_5H_{12}NO_2^+, 2H_2PO_3^-$ Monoclinique (P2 ₁ /n) a = 16.3590(3) Å b = 6.2540(3) Å c = 19.4560(3) Å β = 109.238(1)° V = 1879.37(8) Å ³ Z = 4	$C_5H_{12}NO_2^+, NO_3^-$ Triclinique (P-1) a = 9.5695(10) Å b = 11.2104(16) Å c = 17.537(3) Å α = 108.52(3)° β = 104.14(2)° γ = 90.25(2)° V = 1722.97 Å ³ . Z = 8	$C_5H_{12}NO_2^+, ClO_4^-$ Triclinique (P-1) a = 10.3005(6) Å b = 13.0905(8) Å c = 14.6105(9) Å α = 81.288(2)° β = 88.4473(19)° γ = 75.9648(19)° V = 1889.1 Å ³ . Z = 8

1- La structure présente le même type de liaisons hydrogène à savoir : N-H...O, O-H...O et C-H...O.

2- Les entités cationiques ne présentent pas le même environnement, on note que:

✓ Le groupement ammonium des composés DL-valinium perchlorate et DL-valinium nitrate présentent des liaisons a deux centres, trois centres et chélatées, à la différence du composé du présent travail qui présente des liaisons à deux centres et une liaison à trois centres.

**Di(L-valinium monohydrogènephosphite)**

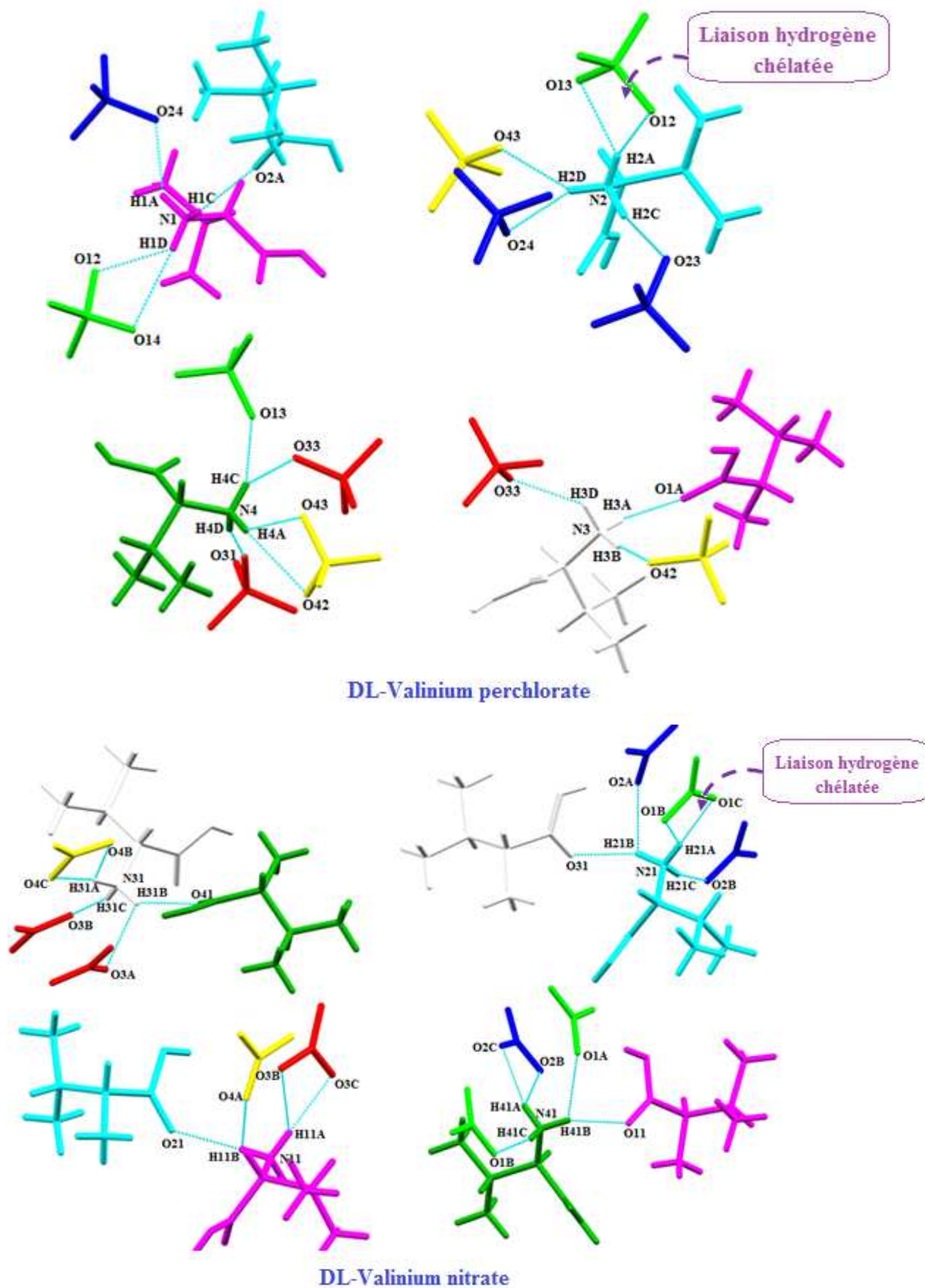


Figure [20] : Liaisons hydrogène autour du cation valinium.

Les structures des deux composés DL-valinium perchlorate et DL-valinium nitrate sont formées par une succession de double couches mixtes cation-anion, qui se déploie le long de l'axe \vec{c} à $a = 1/3$ et $2/3$ (figure 21a). La géométrie plane de l'anion nitrate fait que la jonction entre les doubles couches mixtes est assurée par des liaisons hydrogène faibles de type C-H...O (figure 21b), alors que la géométrie tétraédrique de l'anion perchlorate et l'anion monohydrogenphosphite fait que la jonction entre les doubles couches mixtes est assurée respectivement par des liaisons hydrogène de type C-H...O, N-H...O et N-H...O, O-H...O, C-H...O (figure 21c).

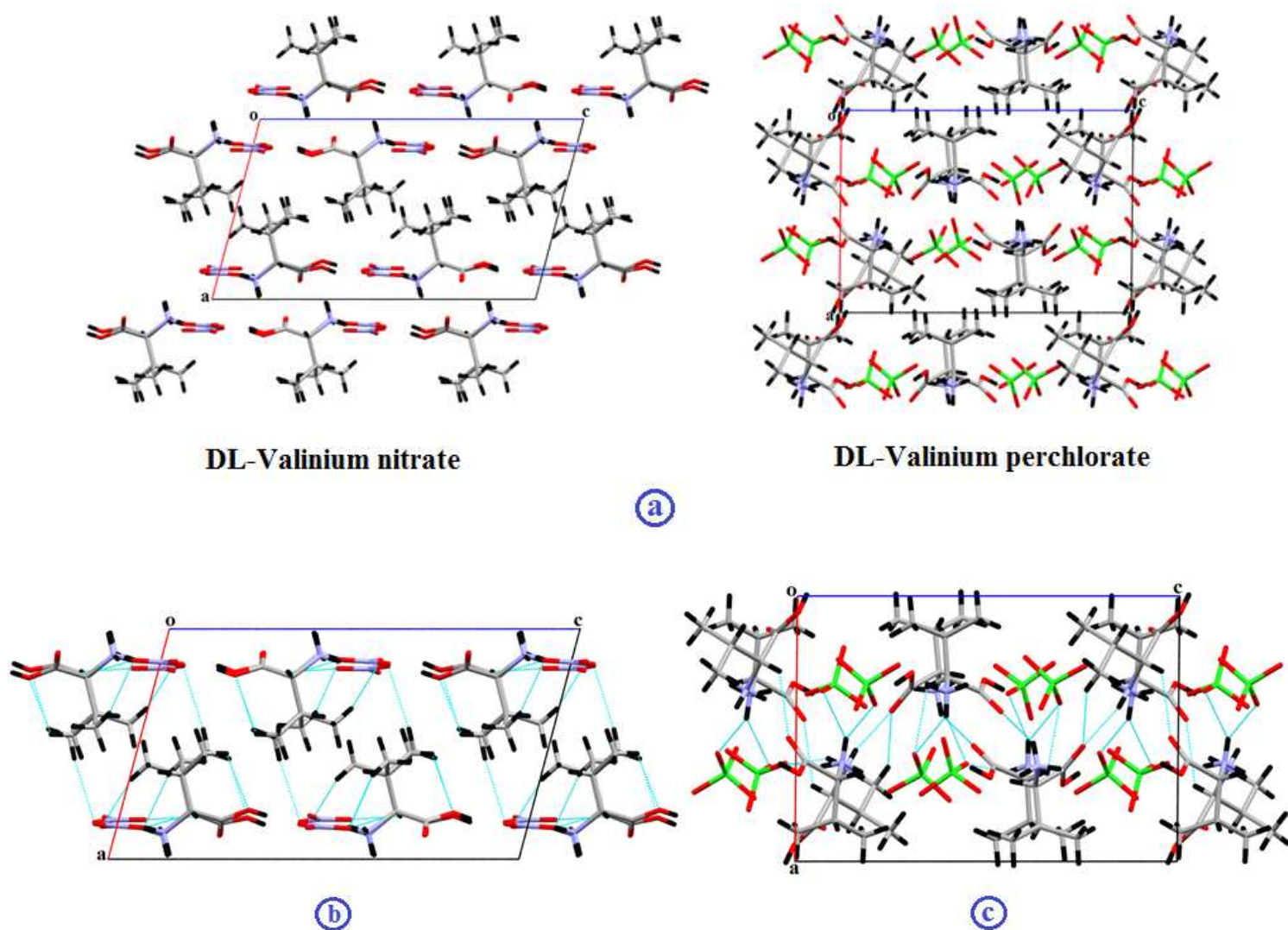


Figure [21] : Empilement de la structure parallèlement au plan (\vec{a}, \vec{c}) .

IX- Conclusion :

Au cours de ce travail, nous avons synthétisés le composé hybride Di(L-valinium monohydrogènephosphite) de formule $2C_5H_{12}NO_2^+$, $2H_2PO_3^-$.

L'étude structurale a mis en évidence la présence de couches mixtes croisées valinium **A**-monohydrogenphosphite **2** qui se déploient suivant les deux rangées [011] et [0-11] à $c = 1/4$ et $3/4$; et de double couches mixtes parallèles valinium **B** - monohydrogenphosphite **1** qui se développent suivant les mêmes rangées à $c = 0$ et $1/2$. Ces couches mixtes croisées et parallèles sont liées par des liaisons hydrogène cation-anion de type N-H...O, O-H...O et C-H...O.

La construction des graphes binaires du modèle de liaisons hydrogène dans cette structure a donné des chaînes finies, infinies et des cycles avec différents degrés.

La comparaison du composé di(L-valinium monohydrogenphosphite) avec deux composés présentant la même matrice organique a fait ressortir que la géométrie de l'anion a une influence directe sur le réseau de liaisons hydrogène.

CHAPITRE III

*Etude structurale et liaisons hydrogène du
composé :
Tétra guininium dibisulfate sulfate
dihydrate.*

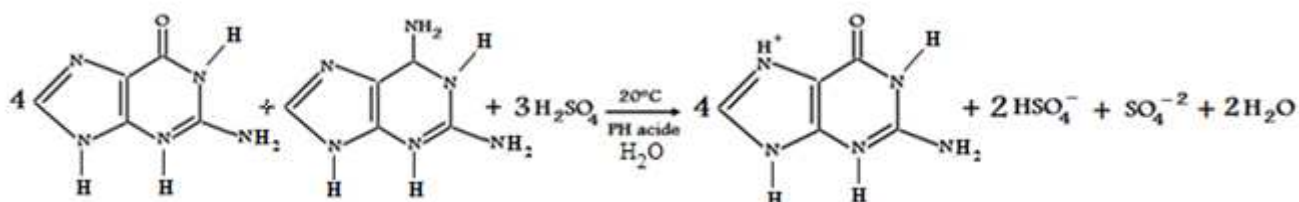


I-Introduction

La guanine est une base azotée, principal composant de la double hélice d'ADN et d'ARN. Cette base entre dans la composition de plusieurs cofacteurs enzymatiques sous forme d'esters phosphoriques ou nucléotides tel que la guanosine-5'-monophosphate (GMP). Une recherche bibliographique a mis en évidence quelques composés à base de guanine à savoir: Guaninium dinitrate dihydrate [43]; Guaninium chloride dihydrate [44]; Guaninium sulfate monohydrate [45]; Guaninium phosphite dihydrate [46].

II- Partie expérimentale:

Les monocristaux du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate sont obtenus à partir d'une évaporation lente d'une solution aqueuse contenant des quantités stœchiométriques 4/1/3 respectivement en guanine, adénine et acide sulfurique, l'ensemble du mélange est maintenu à 20°C sous agitation pendant 20 minutes. Après une semaine, des cristaux transparents se sont formés.



III- Étude cristallographique:

III-1-Enregistrement des intensités:

La collection des données a été réalisée à l'aide d'un diffractomètre à quatre cercles de type XCalibur Saphir 2 équipé d'un détecteur bidimensionnel de type CCD sur un monocristal de dimension 0.3 x 0.2 x 0.08 mm, en utilisant la radiation $K\alpha$ de Mo ($\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$). Les conditions d'enregistrement et les données cristallographiques sont consignées dans le tableau I.

III-2- Résolution et affinement de la structure :

La structure cristalline a été résolue à l'aide de l'ensemble des programmes disponibles dans le logiciel WinGX [41]. Nous avons utilisé le programme Sir92 [42] pour déterminer le modèle structural. Tous les atomes d'hydrogène ont été localisés sur des cartes de Fourier différence. Les paramètres des atomes d'hydrogène liés aux atomes d'azote et d'oxygène sont affinés avec leurs facteurs d'agitations thermiques isotropes tel que $U_{iso}(H) = 1.2U_{eq}(N, O)$. Les atomes d'hydrogène liés aux atomes de carbone sont affinés en mode rigide avec $C-H = 0.93 \text{ \AA}$ et $U_{iso}(H) = 1.2U_{eq}(C)$. L'affinement final du modèle structural effectué par la méthode des moindres carrés, à l'aide du programme SHELXL-97 [43], en considérant les facteurs d'agitation thermiques isotropes des atomes d'hydrogène, contrairement aux autres atomes qui sont définis comme anisotropes, conduit aux facteurs de reliabilité non pondéré $R = 5.85 \%$ et pondéré $R_w = 16.11\%$ avec une estimée de la variance de 1.0330 (Tableau I). Les coordonnées atomiques, facteurs d'agitation thermiques, distances inter atomiques et angles de liaisons sont données respectivement dans les tableaux 1, 2, 3,4 (Annexe 2).

Tableau I : Données cristallographiques et conditions d'enregistrement :

<p><u>Données cristallographiques :</u> $4C_5H_6N_5O^+$, $2HSO_4^-$, SO_4^{2-}, $2H_2O$ $Mr = 886.73$ triclinique P -1 $a = 6.362 (2) \text{ \AA}$ $b = 13.331 (4) \text{ \AA}$ $c = 20.914 (6) \text{ \AA}$ $\alpha = 76.91 (2)^\circ$ $\beta = 82.03 (2)^\circ$ $\gamma = 86.26 (2)^\circ$ $V = 1709.9 (8) \text{ \AA}^3$ $Z = 2$ $D_x = 1.82 \text{ Mg m}^{-3}$</p> <p><u>Condition d'enregistrement :</u> Diffractomètre XCalibur Sapphir 2 Kappa CCD $T = 100 \text{ K}$ Mode de balayage : φ 37179 réflexions mesurées. 8939 réflexions indépendantes. 6248 réflexions avec $I > 2\sigma(I)$ Plaquettes, $0.3 \times 0.2 \times 0.08$</p> <p><u>Affinement :</u> $R = 0.0585$ $R_w = 0.1611$ $S = 1.0330$ 8939 réflexions 628 paramètres</p>	<p>$F000 = 964$</p> <p>Radiation $K\alpha$ du Mo La maille à partir de 37902 réflexions $\theta = 3.3 - 29.00^\circ$</p> <p>$\mu = 0.33 \text{ mm}^{-1}$ $R_{int} = 0.0571$ $\theta_{max} = 29.00^\circ$</p> <p>$h = -8 \longrightarrow 8$ $k = -17 \longrightarrow 18$ $l = -27 \longrightarrow 28$ $(\Delta/\sigma)_{max} = 1.858$ $\Delta\rho_{max} = 0.693 \text{ e \AA}^{-3}$ $\Delta\rho_{min} = -0.677 \text{ e \AA}^{-3}$</p>
--	--

IV - Description de la structure:

La détermination structurale du tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate a permis d'établir le modèle structural, dont l'unité asymétrique est constituée de quatre cations organiques monoprotés, deux anions bisulfate, un anion sulfate et deux molécules d'eau. La jonction entre ces entités est assurée par des liaisons hydrogène moyennes de type O-H...O, N-H...O et N-H...N; et faibles de type C-H...O (figure 1).

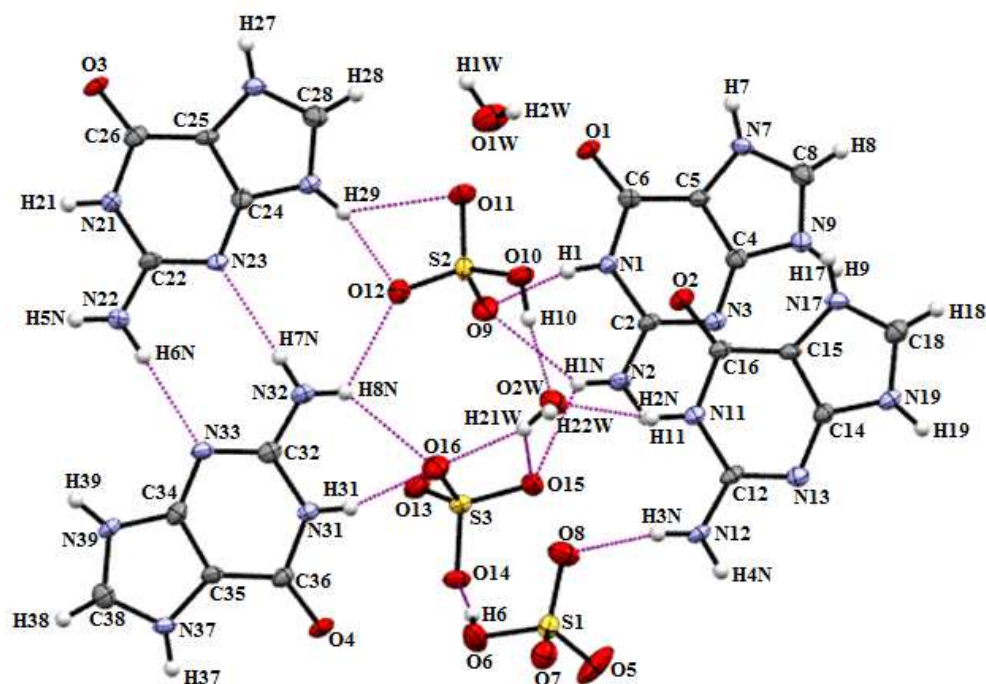


Figure [1]: ORTEP-3-L'unité asymétrique du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

L'empilement cristallin est constitué par une succession de doubles couches cationiques et des couches mixtes anions sulfate, bisulfate et molécules d'eau qui se déploient le long de l'axe \vec{b} et s'alternent le long de l'axe \vec{c} (figure 2).

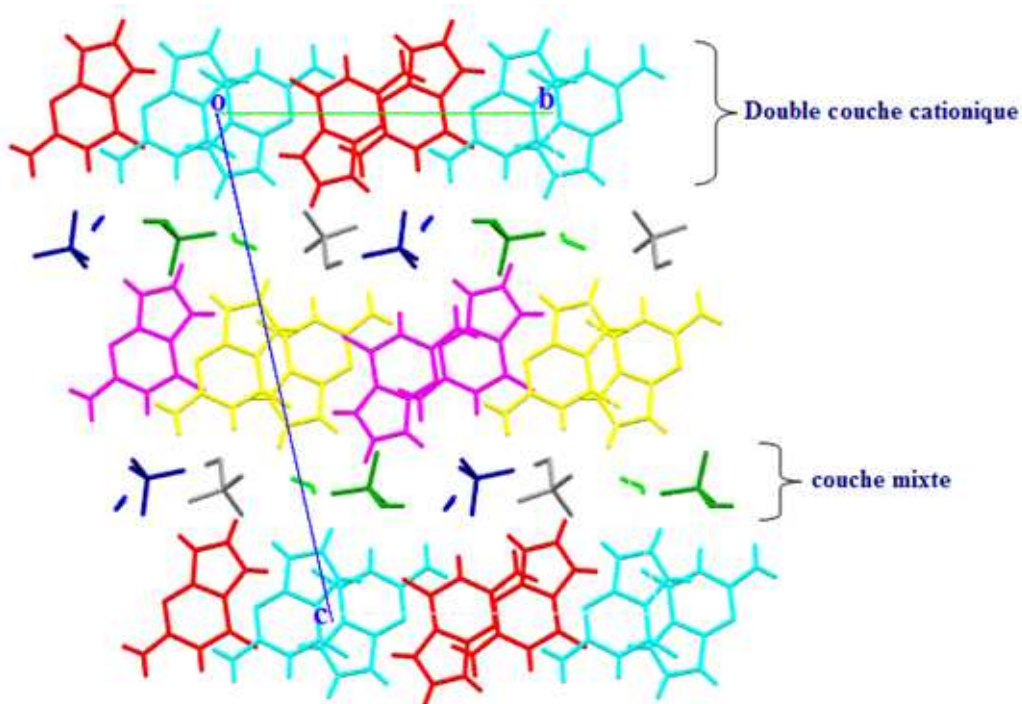


Figure [2]: Empilement de la structure parallèlement au plan (\vec{b}, \vec{c}) .

V- Les liaisons hydrogène:

L'édifice cristallin du composé étudié est assuré par un réseau tridimensionnel de liaisons hydrogène moyennes et faibles (Tableau II) de type :

- N-H...O entre cations, cation-anion et entre cations-molécules d'eau.
- N-H...N entre cations.
- O-H...O entre anions et entre anions-molécules d'eau.
- C-H...O entre cations-anions et cations-molécules d'eau.

Tableau II: Liaisons hydrogène dans le composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

D—H...A	D—H	H...A	D...A	D—H...A
N2-H2N...N13 ⁱ	0.85 (3)	2.19 (3)	3.036 (4)	175 (3)
N12-H4N...N3 ⁱ	0.83 (3)	2.28 (3)	3.106 (4)	173 (3)
N22-H6N...N33 ^v	0.86 (3)	2.19 (3)	3.045 (4)	179 (5)
N32-H7N...N23 ^v	0.85 (3)	2.21 (3)	3.061 (4)	175 (2)
N1-H1...O9 ⁱ	0.862 (18)	1.96 (2)	2.795 (3)	165 (4)
N2-H1N...O9 ⁱ	0.853 (19)	2.39 (3)	3.088 (3)	140 (3)
N2-H1N...O15 ⁱ	0.853 (19)	2.28 (3)	2.806 (3)	120 (3)
N12-H3N...O8 ⁱ	0.850 (19)	2.084 (19)	2.913 (3)	165 (4)
N22-H5N...O13 ^{iv}	0.84 (2)	2.45 (3)	2.953 (3)	119 (3)
N22-H5N...O14 ^{iv}	0.84 (2)	2.35 (3)	3.051 (3)	141 (3)
N7-H7...O2 ^{vi}	0.86 (2)	1.80 (2)	2.651 (3)	175 (4)
N32-H8N...O12	0.853 (18)	2.26 (3)	2.808 (3)	122 (3)
N32-H8N...O16	0.853 (18)	2.35 (3)	3.038 (3)	139 (3)
N9-H9...O5	0.86 (3)	1.78 (3)	2.629 (3)	170 (3)
N11-H11...O2W ⁱ	0.863 (19)	2.00 (2)	2.847 (3)	166 (3)
N17-H17...O1 ^{vi}	0.85 (2)	1.91 (2)	2.753 (3)	171 (3)
N19-H19...O15	0.85 (3)	1.81 (3)	2.638 (3)	166 (3)
N19-H19...O14	0.85(3)	2.66 (3)	3.267 (3)	130 (3)
N21-H21...O7	0.855 (19)	1.984 (19)	2.816 (3)	164 (3)
N27-H27...O4 ⁱⁱ	0.85 (2)	1.85 (2)	2.698 (3)	173 (3)
N29-H29...O11 ^v	0.85 (3)	2.55 (3)	3.131 (3)	127 (2)
N29-H29...O12 ^v	0.85 (3)	1.89 (3)	2.719 (3)	163 (3)
N31-H31...O16	0.844 (18)	2.00 (2)	2.808 (3)	159 (4)
N37-H37...O3 ⁱⁱ	0.85 (2)	1.88 (2)	2.719 (3)	172 (3)
N39-H39...O13 ⁱⁱⁱ	0.86 (3)	1.81 (3)	2.658 (3)	169 (3)
O1W-H1W...O7 ⁱⁱ	0.85 (3)	2.10 (3)	2.917 (3)	161 (3)
O6-H6...O14	0.85 (3)	1.69 (3)	2.530 (3)	170 (3)
O10-H10...O2W	0.85 (2)	1.75 (2)	2.587 (3)	172 (4)
O2W-H21W...O15	0.85 (2)	2.48 (2)	3.077 (3)	128 (2)
O2W-H21W...O16	0.85 (2)	2.03 (3)	2.851 (3)	163 (3)
O1W-H2W...O1 ⁱⁱⁱ	0.850(16)	2.128(19)	2.935(3)	158(4)
O2W-H22W...O13 ^{iv}	0.89(2)	1.86(3)	2.700(3)	156(3)
C8-H8...O1W ⁱⁱ	0.9300	2.5300	3.126 (4)	122.00
C8-H8...O10 ^{vii}	0.9300	2.3500	3.098 (3)	137.00
C8-H8...O11 ^{vii}	0.9300	2.4200	3.037 (3)	124.00
C18-H18...O7 ^{viii}	0.9300	2.5800	3.322 (3)	137.00
C28-H28...O6 ⁱⁱ	0.9300	2.5600	3.176 (4)	124.00
C38-H38...O1W	0.9300	2.3900	3.128 (4)	136.00
C38-H38...O9	0.9300	2.6280	3.257 (4)	125.46

Code de symétrie:(i):1- x,1- y,- z; (ii):1-x, -y, 1-z; (iii): -x, 1-y, 1-z; (iv): 1+x, y,z; (v):1-x, 1-y, 1-z; (vi): 1-x, -y, -z; (vii) x, -1+y, z;(viii):-1+x,y,z.

V-1- Environnement des entités cationiques:

V-1-a- Environnement de l'entité cationique A:

L'entité cationique A se trouve entourée par deux cations B, quatre anions, dont trois bisulfate et un sulfate, et une molécule d'eau H₂O(1), établissant ainsi onze liaisons hydrogène. En note la présence de deux liaisons hydrogène chélatées mise en jeu entre les atomes d'hydrogène H1 et H1N du cation guaninium et l'atome d'oxygène O(9) de l'anion bisulfate HS(2)O₄⁻; et entre l'atome d'hydrogène H8 du cation guaninium et les atomes d'oxygène O(10) et O(11) de l'anion bisulfate HS(2)O₄⁻. En note aussi la présence d'une liaison hydrogène à quatre centres pour l'atome d'hydrogène H8, et une liaison hydrogène à trois centres pour l'atome H1N (figure 3).

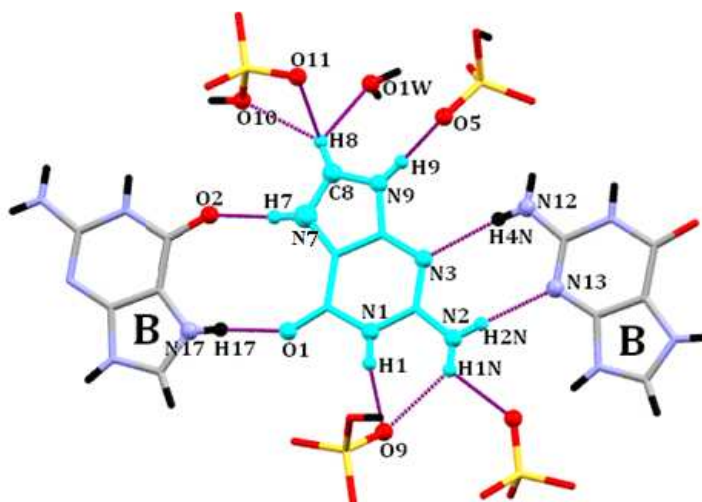


Figure [3]: Environnement du cation A.

V-1-b- Environnement de l'entité cationique B:

La partie cationique guaninium B établit neuf liaisons hydrogène avec deux cations guaninium A, deux bisulfates, un sulfate et une molécule d'eau H₂O(2). L'entité cationique présente une liaison hydrogène chélatée, mise en jeu entre l'atome d'hydrogène H19 du cation B et les atomes d'oxygène O14 et O15 de l'anion sulfate (figure 4).

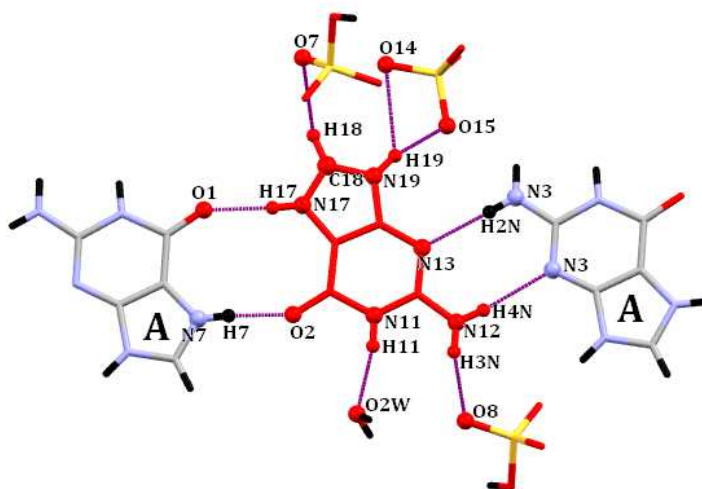


Figure [4]: Environnement du cation B.

V-1-c- Environnement de l'entité cationique C:

Le cation guaninium C établit avec son environnement des liaisons hydrogène principalement de type N-H...O entre cations et entre cations-anions, dont deux bisulfate et un sulfate (figure 5). Toute fois on note la présence de deux liaisons de type N-H...N avec un cation guaninium D, et une liaison hydrogène faible de type C-H...O entre le cation et un anion bisulfate. Les liaisons hydrogène du cation C sont à deux centres, sauf celles mettant en jeu les atomes d'hydrogène H5N et H29 qui forment respectivement des liaisons hydrogène chélatées avec un sulfate et un bisulfate.

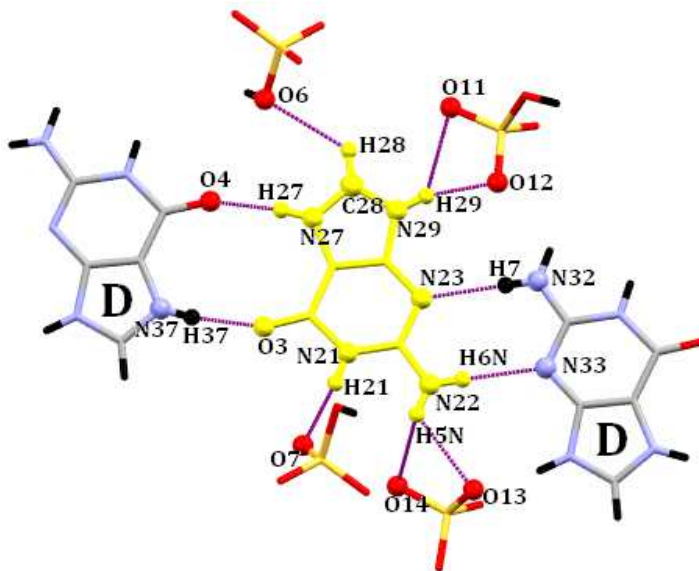


Figure [5]: Environnement du cation C.

V-1-d- Environnement de l'entité cationique D:

L'entité cationique D établit dix liaisons hydrogène avec deux cations guaninium C, une molécule d'eau H₂O(1) et quatre anions, dont deux bisulfate et deux sulfate. Le cation D présente une liaison hydrogène chélatée où les atomes d'hydrogène H8N et H31 forment respectivement des liaisons covalentes avec les atomes d'azote N32 et N31 et interagit avec l'atome d'oxygène O16 de l'anion sulfate (figure 6).

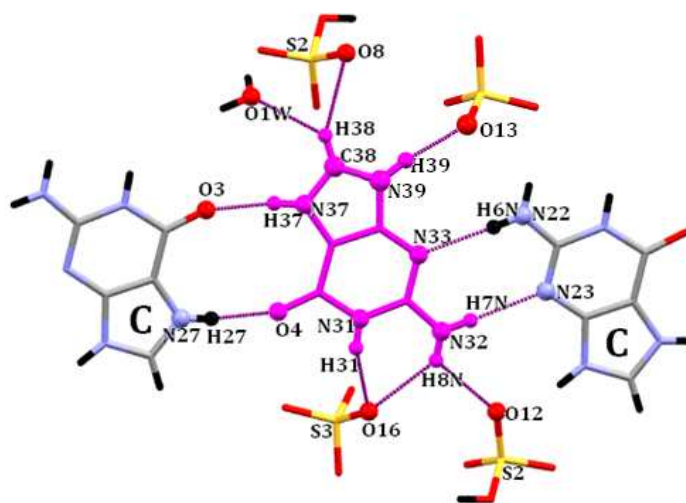


Figure [6]: Environnement du cation D.

V-2- Environnement des entités anioniques:

V-2-a- Environnement de l'anion bisulfate $\text{HS}(1)\text{O}_4^-$ et $\text{HS}(2)\text{O}_4^-$:

En plus des liaisons hydrogène décrites ci-dessus, on relève dans cette structure une liaison hydrogène anion-anion entre le bisulfate S1 et le sulfate S3, et une liaison hydrogène anion-molécule d'eau entre le bisulfate S2 et la molécule d'eau ($\text{H}_2\text{O}(2)$) (figure 7).

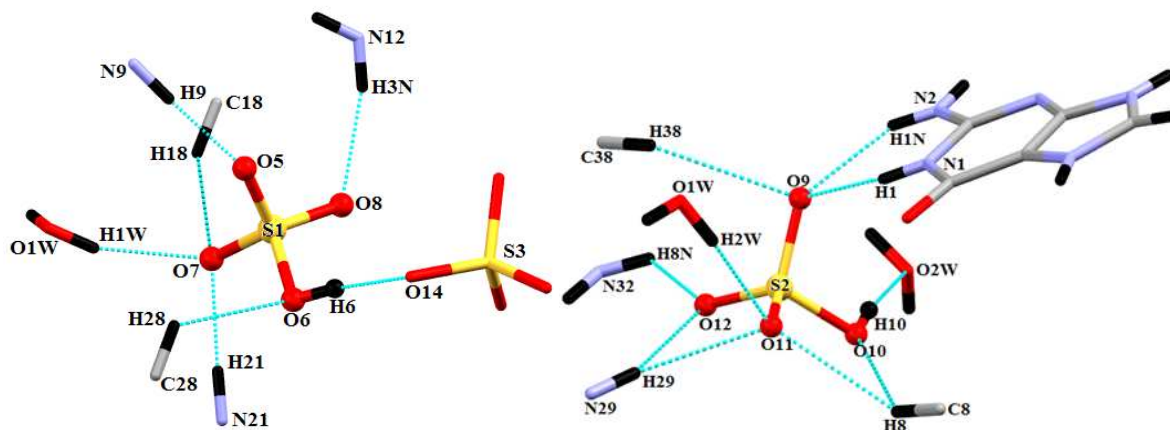


Figure [7]: Environnement des anions bisulfate $\text{HS}(1)\text{O}_4^-$ et $\text{HS}(2)\text{O}_4^-$.

(On n'a représenté que les atomes des cations environnant pour la clarté de la figure.)

VI- Graphes du modèle des liaisons hydrogène de la structure :

VI-1- Graphes qualitatifs :

Les différents graphes qualitatifs ont été établis afin de déterminer les graphes quantitatifs et pouvoir décrire la structure cristalline du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate. La figure ci-dessous est une représentation graphique des 39 liaisons hydrogène et des liaisons covalentes de la structure étudiée (figure 8).

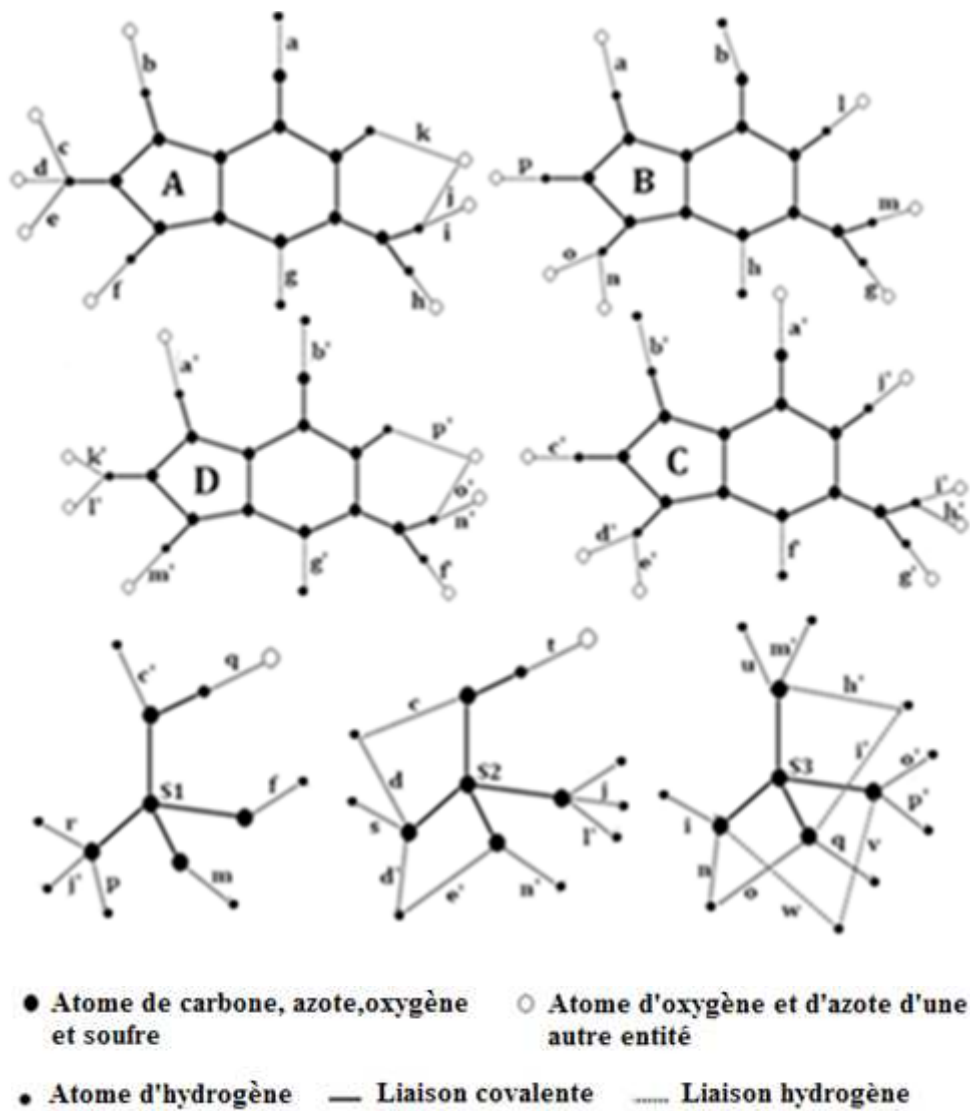


Figure [8] : Représentation graphique des liaisons hydrogène dans le composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La combinaison binaire des 39 liaisons hydrogène donnent des chaînes finies, infinies et des cycles avec différents degré. Tous les modèles et les combinaisons binaire de ces liaisons sont consignés dans les tableaux (IVa-IVa') (Annexe 2). A partir des tableaux des liaisons covalentes nous avons déterminés les différents graphes quantitatifs de cette structure.

VI-2- Graphes quantitatifs :

VI-2-1-Liaison hydrogène de type N-H...N:

Le composé étudié présente quatre liaisons hydrogène de type N-H...N, dont deux entre cations guaninium A et B et deux entre cations guaninium C et D. Les motifs de ces quatre liaisons sont notés **D** (figure 9). Le graphe unitaire quantitatif s'écrit $N_1 = DDDD$.

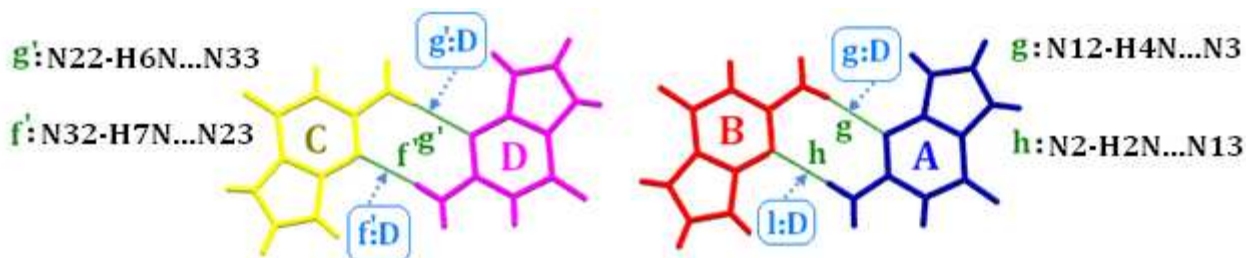


Figure [9]: Motifs des liaisons hydrogène de type N-H...N.

La combinaison binaire de ces liaisons hydrogène, donne naissance à des cycles $R_2^2(8)$ qui assurent la jonction entre les différentes entités cationiques et forment des dimères cationiques, qui se développent le long de l'axe \vec{b} à $c = 0$ et $1/2$ (figure 10).

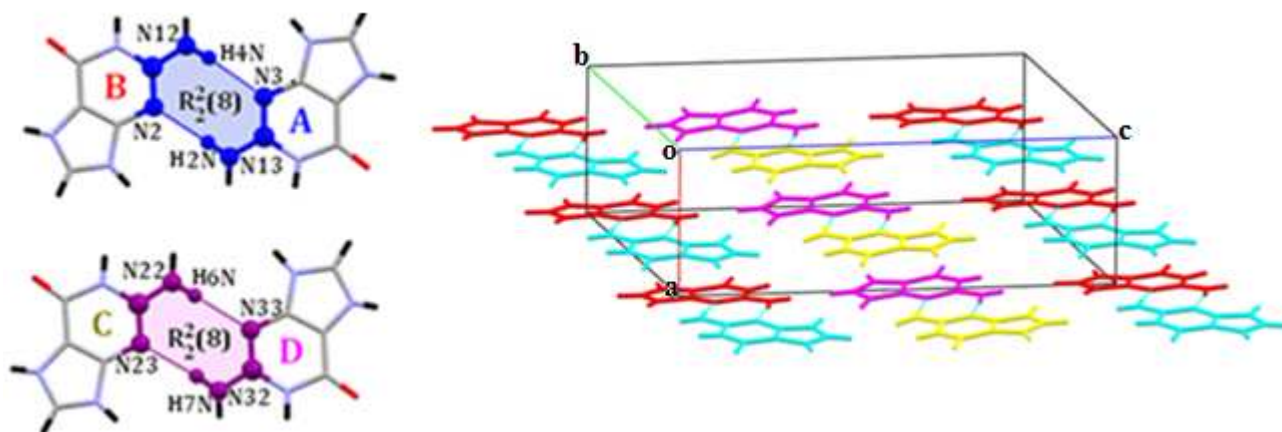


Figure [10]: Modèle de la liaison N-H...N et dimères cationiques.

VI-2-2-Liaison hydrogène de type N-H...O:

L'édifice cristallin du composé est principalement basé sur des liaisons hydrogène de type N-H...O, qui sont les plus importantes et qui sont au nombre de vingt-et-un entre cations, cations-anions et cations-molécules d'eau.

VI-2-2-a-Liaison hydrogène de type N-H...O entre cations:

La structure étudiée présente des liaisons hydrogène moyennes de type N-H...O, entre cation A - cation B, et entre le cation C - cation D. Ces liaisons hydrogène ont comme motif **D**. Le graphe unitaire entre cations s'écrit : $N_1 = DDDD$ (figure 11).

La combinaison binaire donne naissance à des dimères cationiques qui se déploient le long de l'axe \vec{b} et s'alternent le long de l'axe \vec{c} (figure 11). Le graphe binaire est noté: $N_2 = R^2_2(10)$.

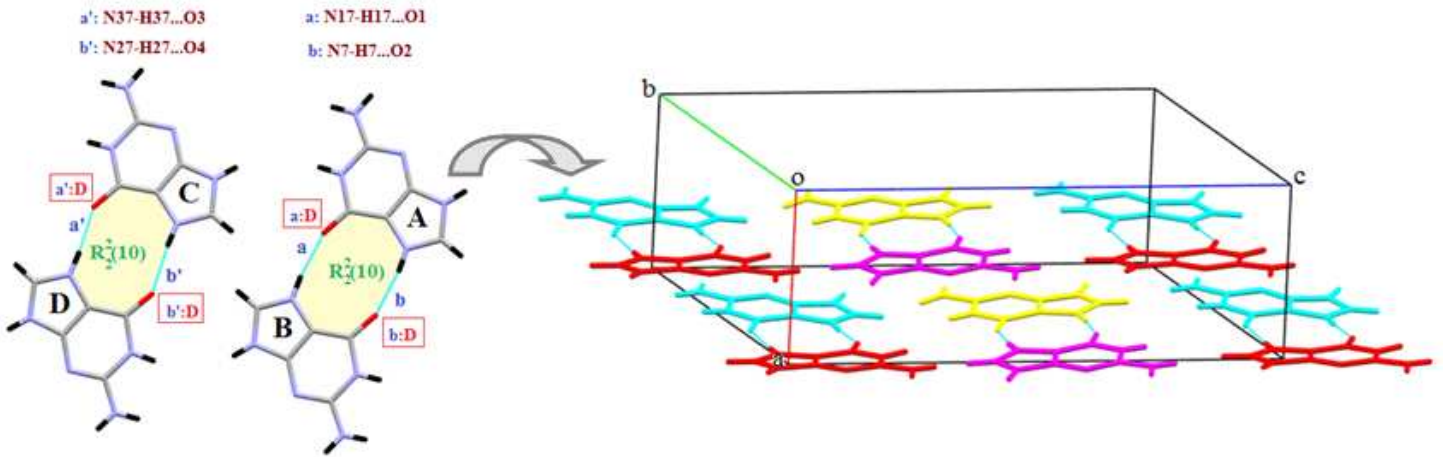


Figure [11]: Modèle de la liaison N-H...O entre cations et dimères cationiques.

La combinaison binaire des liaisons hydrogène de type N-H...N et N-H...O entre cations donne des chaînes infinies $C^2_2(11)$, $C^2_2(13)$ qui assurent la jonction entre les différentes entités cationiques appartenant à la même couche (figure 12).

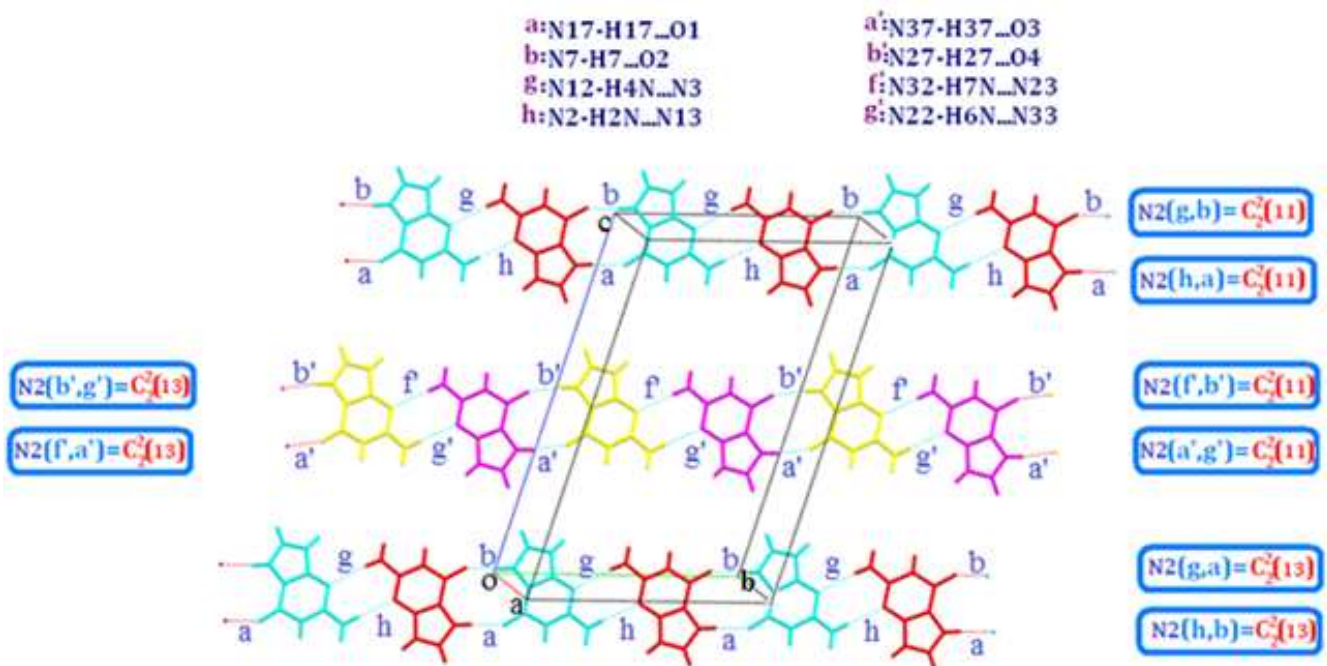


Figure [12]: Graphe des liaisons N-H...N et N-H...O entre cations.

VI-2-2-b-Liaison hydrogène de type N-H...O entre cation-anion et entre cation-molécule d'eau:

Les liaisons hydrogène de type N-H...O entre cations-anions et entre cations-molécule d'eau se présentent sous forme de chaînes finies, les motifs de ces différentes liaisons sont sous la forme **D** (figure 13). Le graphe unitaire s'écrit: $N_1 = \text{DDDDDDDDDDDDDDDDDDDD}$.

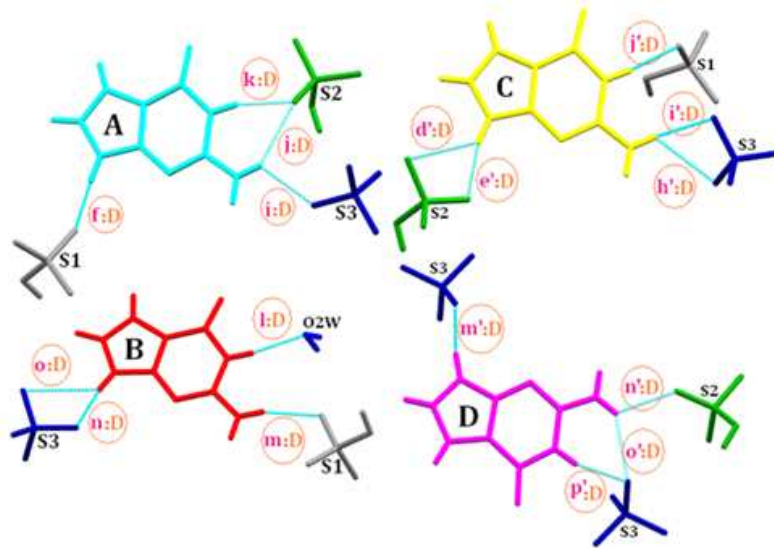


Figure [13]: Motifs des liaisons hydrogène de type N-H...O entre cations-anions, et cation-molécule d'eau.

VI-2-3- Liaisons hydrogène de type O-H...O:

La structure du composé tétra guaninium sulfate dibisulfate dihydrate est assurée par sept liaisons hydrogène modérées de type O-H...O, qui sont établies entre anions, et entre anions-molécules d'eau. Ces liaisons donnent naissance à des couches mixtes anions molécules d'eau. Toutes ces liaisons sont sous forme de chaînes finies notées **D**. Le graphe unitaire s'écrit: $N_1 = \text{DDDDDDDD}$.

La combinaison binaire via les deux molécules d'eau conduit respectivement à des chaînes finies $D_2^2(7)$, deux chaînes infinies $C_2^2(6)$ et un cycle $R_1^2(4)$ (figure 14), ce qui conduit à des couches mixtes anion bisulfate sulfate-molécules d'eau qui se déploient le long de l'axe \vec{b} .

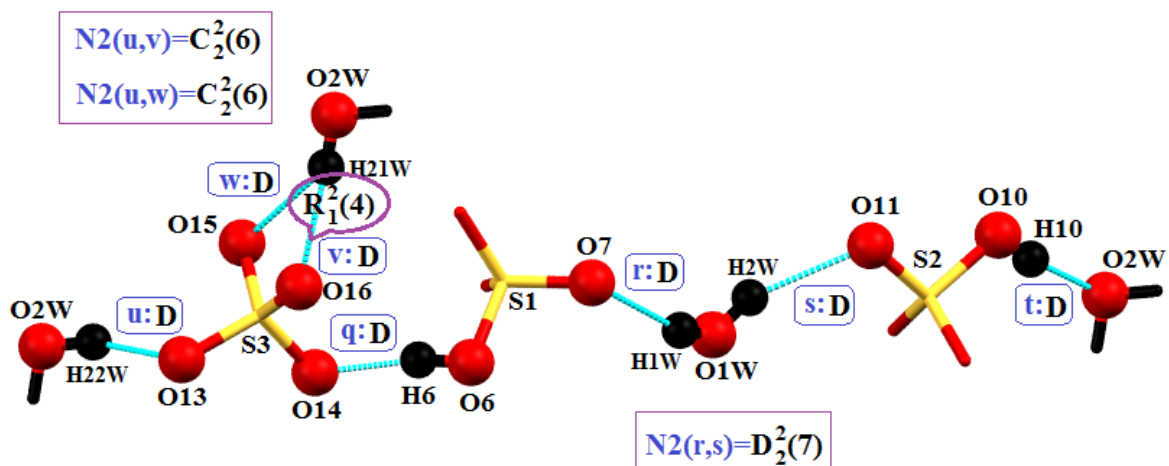


Figure [14]: Motifs et Graphe binaire des liaisons hydrogène de type O-H...O.

Ces couches mixtes assurent la jonction entre les couches parallèle (figure 15a), et entre deux double couches (figure 15b), via des chaînes finies avec différents degrés, suite à la combinaison binaire, ternaire et quaternaire des liaisons hydrogène de type N-H...O, O-H...O.

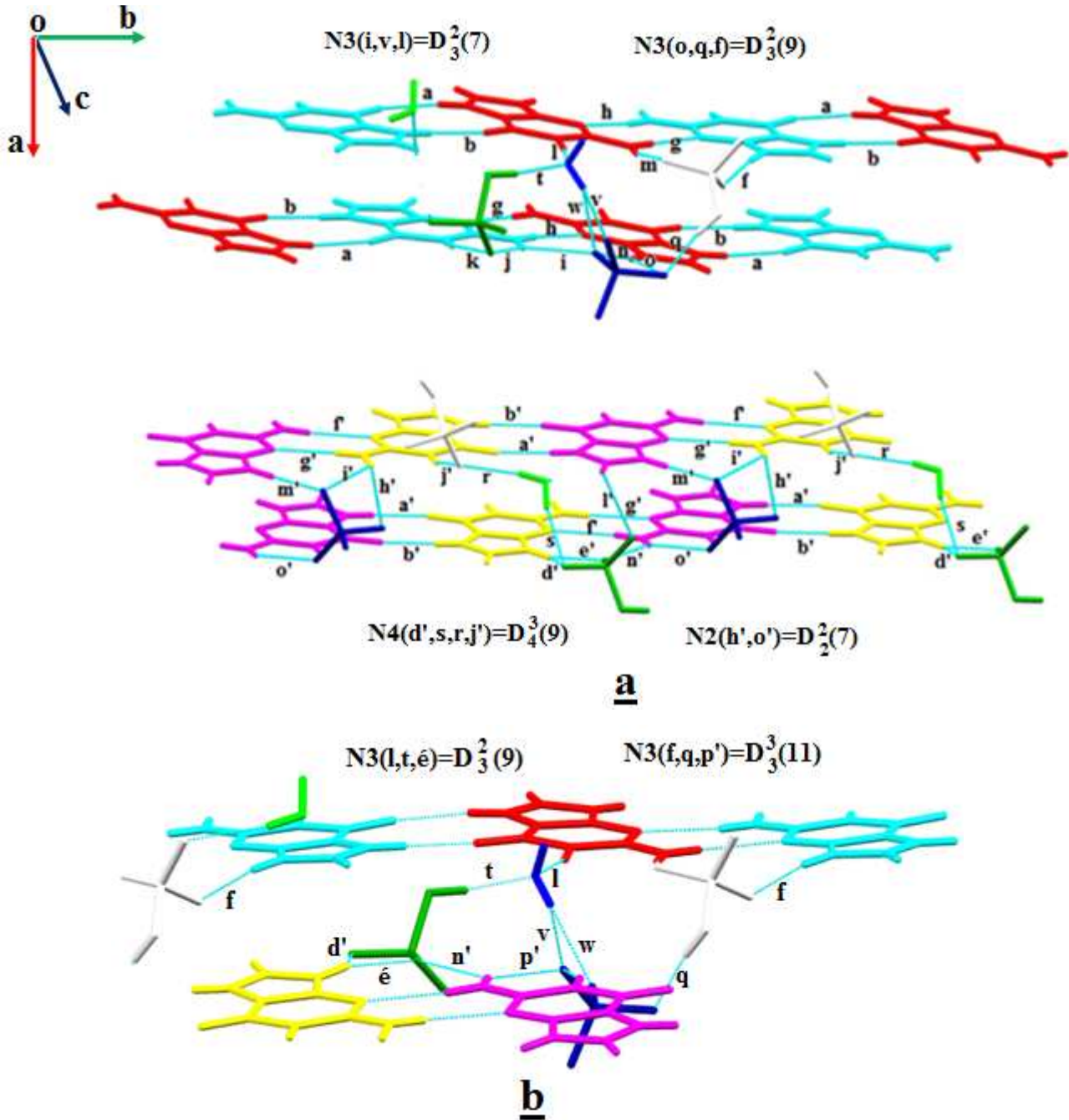


Figure [15]: Jonction entre les couches cationiques (a) et entre deux doubles couches cationiques (b).

La jonction entre ces couches mixtes et les couches cationiques est assurée principalement via des cycles avec différents degrés (figure 16).

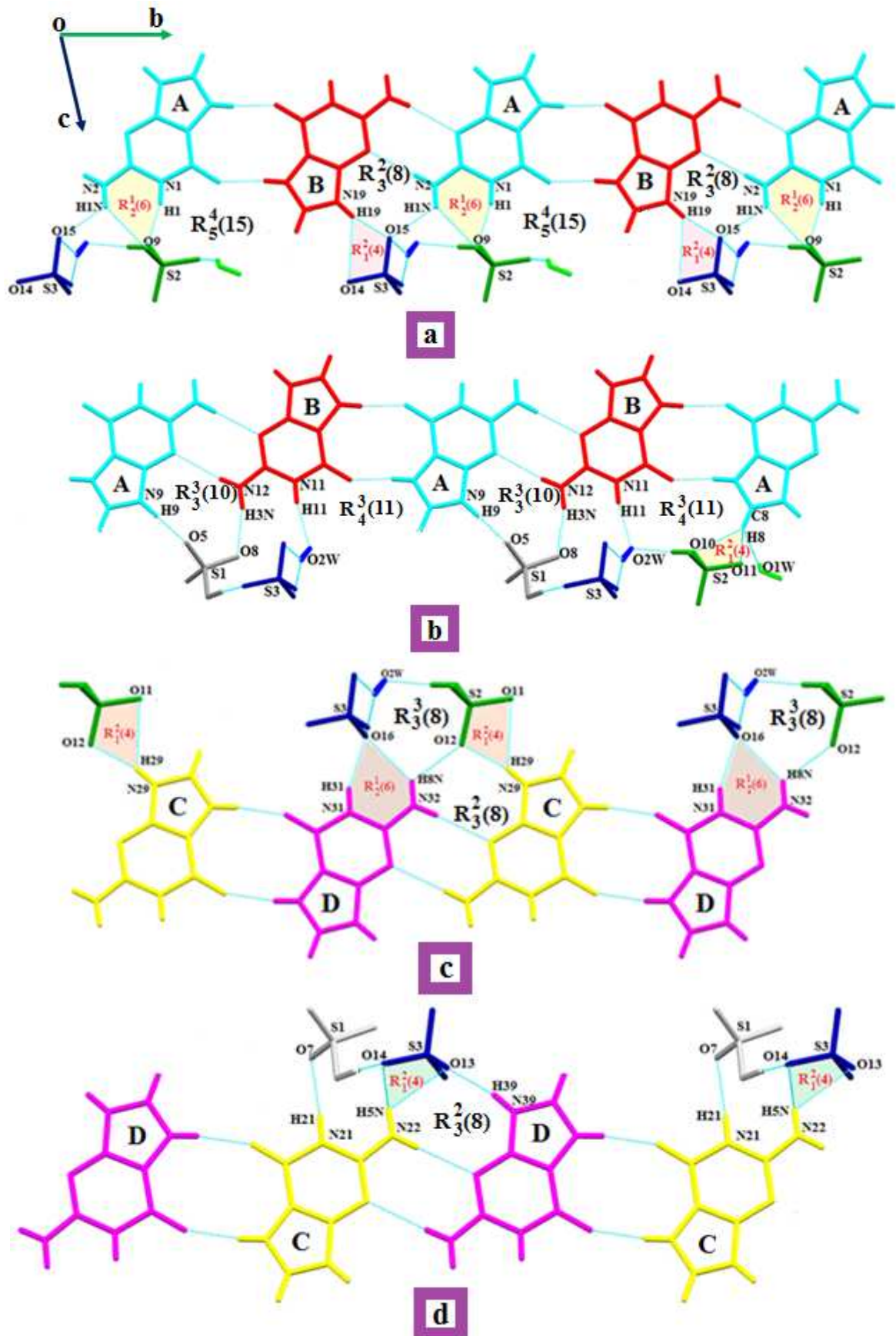


Figure [16]: Jonction entre couches mixtes et couches cationiques.

VI-2-4- Les liaisons hydrogène de type C-H...O :

Les liaisons hydrogène de type C-H...O qui sont au nombre de sept renforcent l'édifice cristallin. Ces liaisons forment des chaînes finies notées **D** (figure 17). Le graphe unitaire s'écrit : **N1= DDDDDDD**.

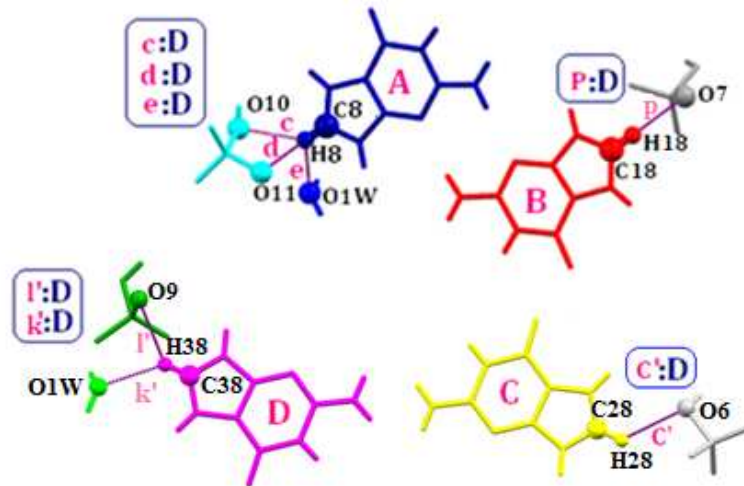


Figure [17]: Motifs des liaisons hydrogène de type C-H...O.

L'association des quatre types de liaisons hydrogène à savoir : N-H...N, O-H...O, N-H...O et C-H...O conduit à un réseau tridimensionnel qui assure la jonction entre les différentes entités et maintient la stabilité de la structure (figure 18).

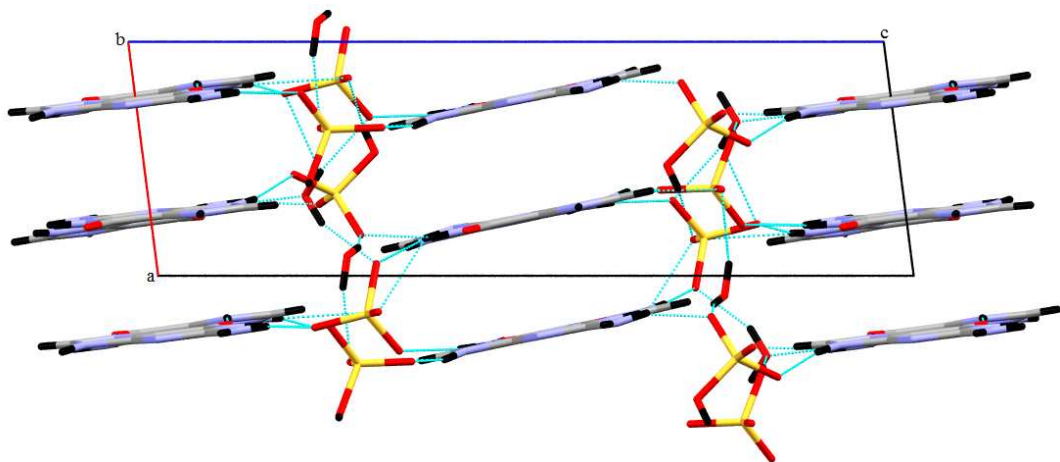


Figure [18]: Réseau de liaisons hydrogène dans le composé.

Le graphe unitaire du modèle des liaisons hydrogène du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate étant la somme des graphes unitaires des différents types de ces liaisons, il s'écrit sous la forme **N₁ = 39 D**.

L'étude détaillée des graphes binaires (IV a, b,...a') du modèle des liaisons hydrogène dans cette structure met en évidence des chaînes finies, des chaînes infinies et des cycles (figure 19).

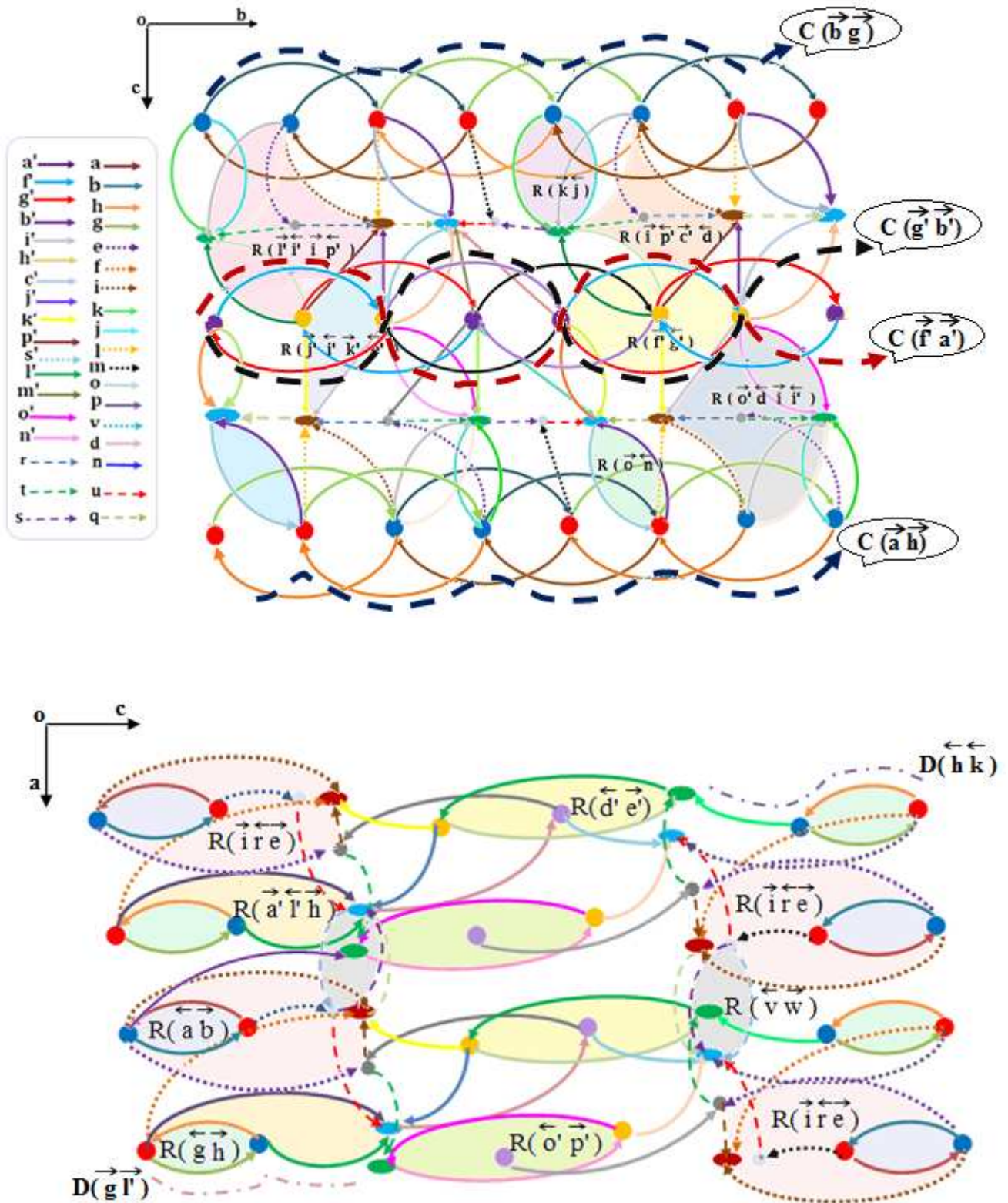


Figure [19]: Représentation des graphes qualitatifs suivant le plan (\vec{a}, \vec{c}) .

VII- Etude comparative:

L'étude comparative des liaisons hydrogène de la structure di (guaninium perchlorate dihydrate) [47] $2(C_5H_6N_5O^+, ClO_4^-, 2H_2O)$, et de la structure tétra guaninium sulfate dibisulfate dihydrate du présent travail est effectuée dans cette partie (Tableau V).

Tableau V : Données cristallographiques des deux composés.

Tétra guaninium sulfate dibisulfate dihydrate	Di(guaninium perchlorate dihydrate)
$4C_5H_6N_5O^+ \cdot 2HSO_4^- \cdot SO_4^{2-} \cdot 2H_2O$	$2C_5H_6N_5O^+ \cdot 2ClO_4^- \cdot 4H_2O$
Triclinique (P-1)	Monoclinique (Cc)
$a = 16.3590(3) \text{ \AA}$	$a = 4.8088(4) \text{ \AA}$
$b = 6.2540(3) \text{ \AA}$	$b = 46.4455(12) \text{ \AA}$
$c = 19.4560(3) \text{ \AA}$	$c = 9.6655(40) \text{ \AA}$
$\alpha = 76.91(2)^\circ$	$\beta = 97.892(5)^\circ$
$\beta = 82.03(2)^\circ$	$V = 2138.29(17) \text{ \AA}^3$
$\gamma = 86.26(2)^\circ$	$Z = 4$
$V = 1709.9(8) \text{ \AA}^3$	
$Z = 2$	

Les deux structures sont monoprotonés au niveau du site N7 (figure 20).

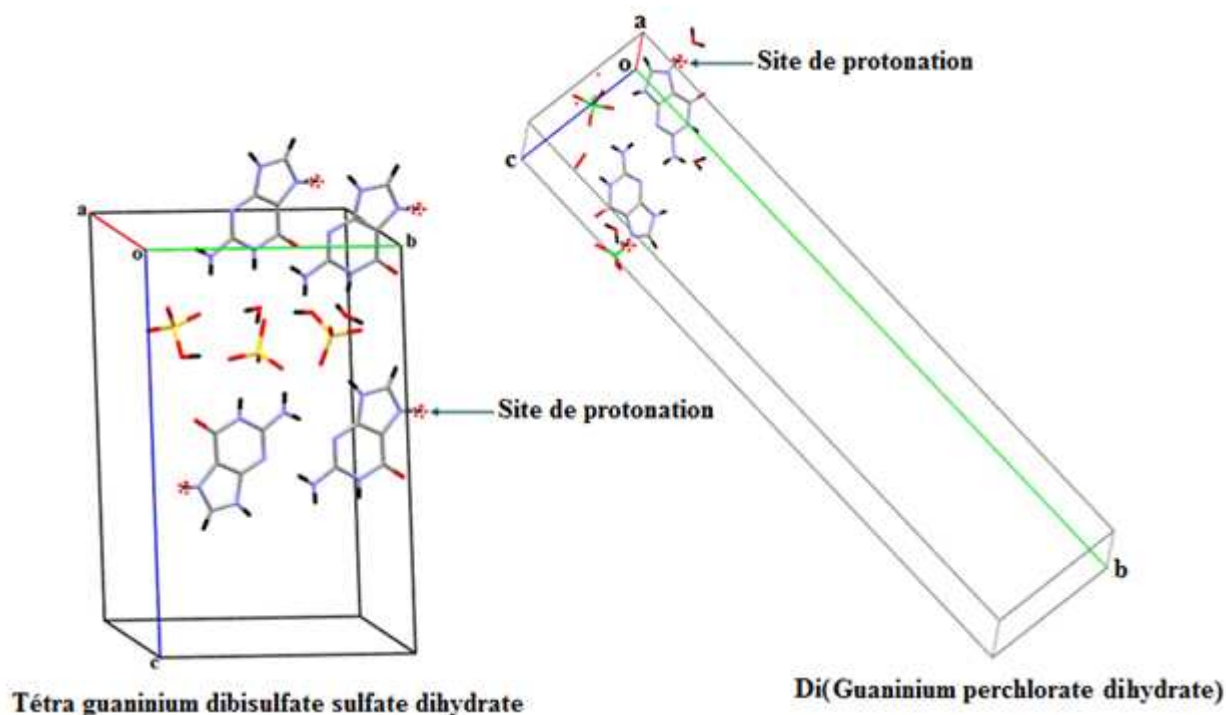


Figure [20]: mailles élémentaires des deux composés

Tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate et Di(guaninium perchlorate dihydrate).

Les mêmes dimères cationiques formés par les liaisons cation–cation de motif $R_2^2(8)$ sont observés dans les deux structures. Ces dimères cationiques se déploient le long de l'axe \vec{c} respectivement suivant des doubles couches (figure 21 a) et des couches parallèles (figure 21 b).

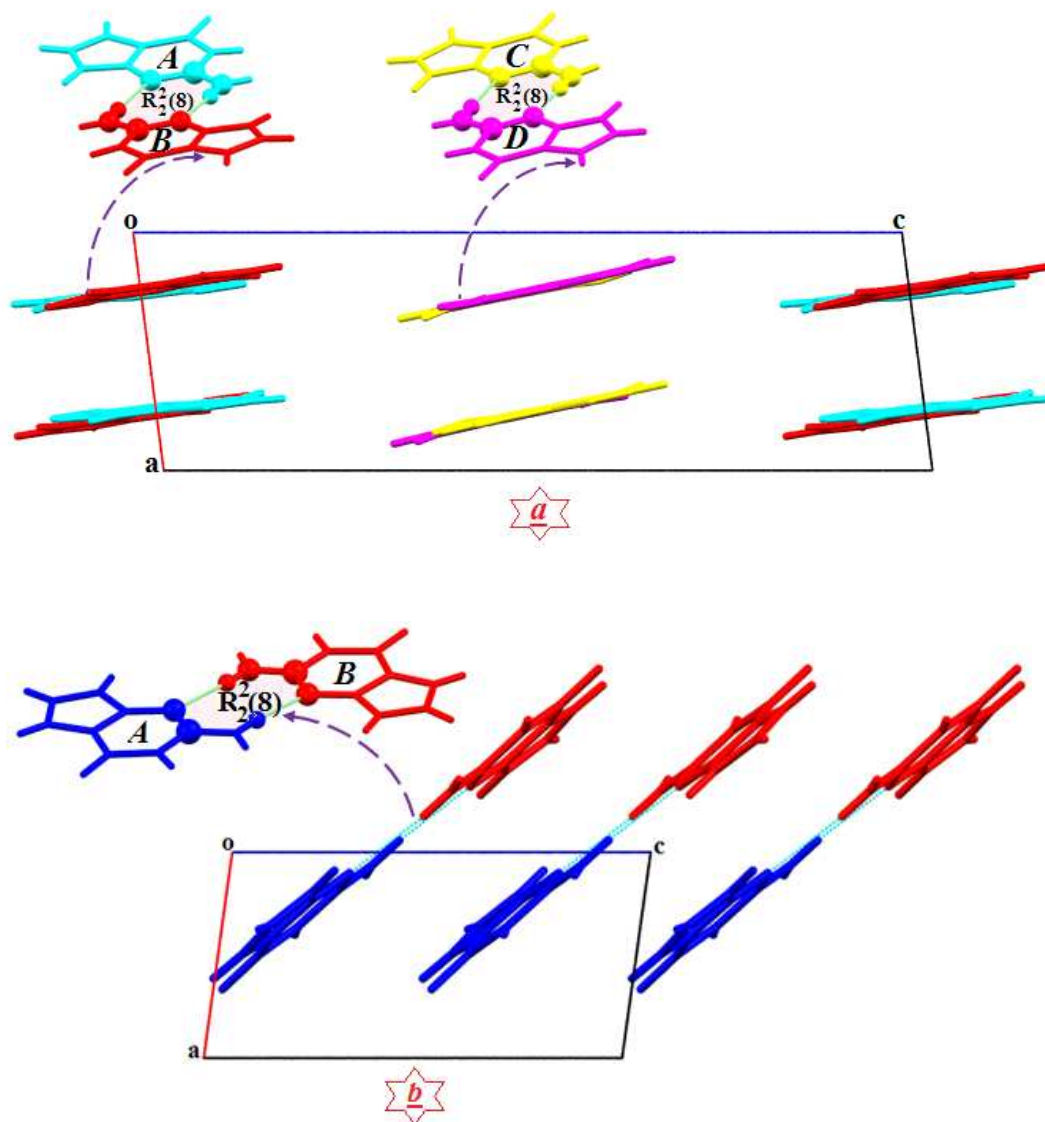


Figure [21] : Enchaînement des dimères cationiques des deux composés tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate (a) et di (guaninium perchlorate dihydrate) (b).

Cependant les deux autres molécules d'eau dans la structure di(guaninium perchlorate dihydrate) s'insèrent entre deux dimères cationiques (figure 22a) et empêche la formation des cycles $R_2^2(10)$ observés dans la structure du présent travail (figure 22b), impliquant ainsi la rupture de l'enchaînement de ces dimères et conduit à la formation des cycles $R_4^4(14)$.

On conclut donc que l'introduction de deux autres molécules d'eau dans le composé di(guaninium perchlorate dihydrate) a affecté l'empilement tridimensionnel de la structure cristalline. Son influence s'est ressentie au niveau de la rupture des dimères cationiques.

VIII--Conclusion:

La détermination de la structure du tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate nous a permis de mettre en évidence une nouvelle variété cristalline à base de guaninium et de l'acide sulfurique. La structure est formée par quatre entités organique, deux anions bisulfate, un anion sulfate, et deux molécules d'eau.

La structure cristalline du composé étudié est formée par une succession de doubles couches cationiques et des couches mixtes anions (sulfate bisulfate)-molécules d'eau qui se déploient parallèlement au plan (\vec{b}, \vec{c}) . La cohésion entre les différentes entités est assurée par un réseau tridimensionnel de liaisons hydrogène moyennes N-H...N, O-H...O et N-H...O et liaisons faibles de type C-H...O.

Nous avons appliqué la théorie des graphes de liaisons hydrogène (théorie de Bernstein), pour bien comprendre et décrire l'empilement cristallin de la structure. Le graphe unitaire de la structure est:
N1= 39 D

L'étude comparative de notre composé avec un autre similaire a fait ressortir que la présence de deux autres la molécule d'eau donne naissance à un empilement cristallin différent.

Conclusion générale

Conclusion générale

L'axe de recherche sur les composés hybrides à matrice organique, nous a permis de synthétiser par voie humide et de caractériser par diffraction des rayons X deux composés à base de valine et guanine très riches en interactions intermoléculaires via les ponts hydrogène entre les différentes entités.

Le composé Di(L-valinium monohydrogènephosphite) de formule $C_5H_{12}NO_2^+, 2H_2PO_3^-$ est formé de deux cations organiques monoprotonés et de deux anions monohydrogènephosphite, l'étude structurale a mis en évidence la présence de couches mixtes valinium A - monohydrogènephosphite 2 qui se déploient et se croisent suivant les deux rangées [011] et [0-11] ; et de double couches mixtes parallèles valinium B - monohydrogènephosphite 1 qui se déploient suivant les mêmes rangées. La jonction entre ces différentes couches est assurée par des liaisons hydrogène moyennes et faibles de type O-H...O, N-H...O et C-H...O.

L'étude comparative avec des composés ayant comme cations organique l'acide valine a révélé que la substitution d'un acide minérale par un autre modifié le réseau de liaison hydrogène, ceci est dû principalement à la géométrie des anions minéraux.

Le deuxième composé, le tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate de formule $4C_5H_6N_5O^+, 2HSO_4^-, SO_4^{2-}, 2H_2O$ cristallise dans le système triclinique. Sa structure est formé par quatre cations organiques monoprotonés, deux anions bisulfate, un anion sulfate et deux molécules d'eau. L'étude structurale a mis en évidence la présence de doubles couches bâties sur la base de chaînes de dimères cationiques de type $R^2_2(8)$ et $R^2_2(10)$; et de couches mixtes anions sulfate-bisulfate-molécules d'eau. Ces couches mixtes assurent la jonction entre les doubles couches et entre deux doubles couches cationiques via des chaînes finies avec différents degrés.

L'étude comparative a fait ressortir que la présence de deux autres molécules d'eau donne naissance à un empilement cristallin différent.

L'utilisation de la théorie des graphes, nous a permis de suivre le déploiement des différentes liaisons hydrogène dans le réseau, nous aidant ainsi à bien comprendre et décrire les structures cristallines.

Références

Références

- [1]- E. Schrödinger. (1944) .Qu'est-ce que la vie ? (trad. Française, (1986)).
- [2]- J. D. Watson, F. H. C. Crick. (1953). Nature 171, 737 – 738.
- [3]- A. Ghosh and M. Bansal. (2003). ActaCryst. D59, 620-626.
- [4]- A. Ghosh and M. Bansal. (1999). ActaCryst. D55, 2005-2012.
- [5]- M.C. Etter. (1990). Acc. Chem. Res. 23, 120-126.
- [6]- M.C. Etter, J.C. MacDonald, and J. Bernstein. (1990). ActaCryst. B46, 256-262.
- [7]- J. Bernstein, M. Etter, and J.C. MacDonald. (1990). J. Chem. Soc,Perkin Trans. 2, 695-698.
- [8]- J. Brenstein, R.E. Davis, L. Shimoni, and N.Shang. (1995). Angew. Chem., Int. Ed. Engl. 34, 1555-1573.
- [9]- A. Cherouana, L. Bendjeddou and N. Benali-Cherif. (2003). Acta Cryst. E59, o1790-o1792.
- [10]- A. Rich and F.H.C. (1955). Crick the structure of collagen, nature 176: 915-916.
- [11]- J. Sponer, J. Leszczynski and P. Hobza. (1996). Structures and energies of hydrogen-bonded DNA base pairs. A nonempirical study with inclusion of electron correlation, J. Phys. chem. 100:1965-1974.
- [12]- P. Mignon, S. Loverix, J. Steyaert, and P. Geerlings. (2005). Influence of the pi-pi interaction on the hydrogen bonding capacity of stacked DNA/RNA bases. Nucleic acids Res. 33:1779-1789.
- [13]- W. guschlbauer and W. saenger, new York. (1987). dna-ligand interaction: from drugs to protiens. Plenum.
- [14]- L. Pauling. (1939). The nature of the chemical bond. Ithaca, NY: Cornell University Press.
- [15]- D. Hadzi, New- York. (1997). Wiley and Son, Theoretical Treatments of Hydrogen Bonding.
- [16]- J. K. Myers, C.N. Pace. (1996). Hydrogén Bonding Stabilizes Globular Proteins. Biophys. J. 71, 2033-2039.
- [17]- A. Anthony, G. R .Desiraju, R. K. R. Jetti, S. S.Kuduva, N. N. L .Madhavi, A. Nangia, R.Thaimattam, et V.R.Thalladi. (1998). Cryst. Engng. 1, Mater. Res. Bull. Suppl. S, 1-18.
- [18]- G.R. Desiraju. (1997). Chem. Commun. pp. 1475-1476.
- [19]- R. Yamdagni, P. Kebarle, J. Am. (1973). Chem. Soc., 95, 3504.

- [20]- G.N. Ramachandran and G. Kartha. (1954). structure of collagen, *Nature*, 174:269-270.
- [21]- G.R. Desiraju, and T. Steiner. (1999). *The Weak Hydrogen Bond in Structural Chemistry and Biology*. Oxford University Press. P. 13.
- [22]- G.R. Desiraju. (2002). Hydrogen Bridges in crystal Engineering: Interactions without Borders. *Acc. Chem. Res.*35. 565-573.
- [23]- A.C. Legon, and D.J. Millen. (1993). Gas phase spectroscopy and the properties of hydrogen-bonded dimmers: HCN-HF as the spectroscopic prototype. *Chem. Rev.* 86: 635-57.
- [24]- G. Albrecht, and R. B. Corey. The crystal structure analysis of glycine. (1939). *J Am Chem Soc* 61:1087-103.
- [25]- E. M. Arnett, and E. J. Mitchell. Hydrogen bonding VI. (1971). *J Am Chem Soc* 93: 4052-53.
- [26]- M. Bagieu-Beucher. (1990). *Acta Cryst.* C46, 238-240.
- [27]- M.E. Balis, *Antagonists and Nucleic acids*. (1968). New York: American Elsevier.
- [28]- C.N. Pace, B. A. Shirley, M. McNutt, & K. Gajiwala, (1996). Forces Contributing to the Conformational Stability of Proteins. *FASEB J.* 10, 75-83.
- [29]- M. C. Etter. (1991). Hydrogen bonds as design elements in organic chemistry. *J. Phys. Chem.*95, 4601-4610.
- [30]- J. Bernstein. (1991). Polymorphism of L-glutamic acid. Decoding the α - β phase relationships using graph-set analysis. *Acta Cryst.* B47, 1004-1010.
- [31]- J. Bernstein, and R. E. Davis. (1999). Graphe set Analysis of Hydrogen-Bond Motifs. In: *Implications of Molecular and Materials Structure for New Technologies*. (Eds. J.A.K. Howard et al.). Kluwer Academic Publishers: Netherlands. pp.275-290.
- [32]- J. Bernstein, M. C. Etter, and L. Leiserowitz. (1994). The role of the hydrogen Bonding in Molecular Assemblies. In: *Structure Correlation*. (Eds. H.-B. Burgi and J.D. Dunitz). Volume 2. VCH: Weinheim. pp.431-507.
- [33]- R. E. Davis, and J. Bernstein. (1998). Graph Set Analysis of Hydrogen-Bond Patterns in Molecular Crystals. *American Crystallographic Association.* 33,7-19.
- [34]- D. M. Kheiker. (1994). Experimental Technique of X-Ray Structure Analysis of Single Crystals. In: *Fundamentals of Crystals*. 2 e edition.(Ed. B. K. Vainshtein). Springer-Verlaa. p.278-283.
- [35]- H. L. Monaco, and G. Artioli. (2002). Experimental methods in X-ray and neutron crystallography. In: *Fundamentals of Cristallography*. 2 e edition (Ed. C. Giacovazzo).

- Oxford University Press. pp.344-347.
- [36]- Nonius. (1998). Kappa CCD Reference Manual. Nonius BV, Delft, The Netherlands.
- [37]- L. J. Farrugia. (1999). *J. Appl. ActaCryst.* 32, 837-838.
- [38]- A. Altomare, G. Cascarano, C. Giacovazzo, A. Guagliardi. (1993). *J. Appl. ActaCryst.* 26, 343- 350.
- [39]- G. M. Sheldrick. (1997). SHELXL97 and SHELXS97. University of Gottingen, Germany.
- [40]- L. J. Farrugia. (1997). *J. Appl. Cryst.* 30, 565.
- [41]- N. Srinivasan, B. Sridhar, R. K. Rajaram. (2002). *ActaCryst. E*, 58, o95.
- [42]- B. Sridhar, N. Srinivasan, Bjoern Dalhus, R.K. Rajaram. (2003). *Acta Cryst. E*, 59, o28.
- [43]- K. Bouchouit, N.Benali-Cherif, Benguedouar, L.Bendjeddou, L.Bendheif, H.Merazig. (2002). *ActaCryst. E*58, o1397.
- [44]- C. Lewis Thomas, A. Tocher Derek. (2005). *Acta Cryst. E*61, o1023.
- [45]- A. Cherouana, N. Benali-Cherif, L. Bendjeddou. (2003). *ActaCryst. E*59, o180.
- [46]- L. Bendheif, K. Bouchouit, N. Benali-Cherif. (2003). *Acta Cryst. E*59, o1364.
- [47]- M. D. Joesten, *J. Chem.Educ.* (1982). *Act ActaCryst. E*59a *Cryst. E*59, 362 and references quoted.

ANNEXES

ANNEXE I

Tableau 1
Coordonnées atomiques et Facteurs d'agitation thermiques isotropes (Å²)
Du Di(L-valinium monohydrogènephosphite).

Atome	x	y	z	U(eq) [Ang ²]
P1	0.75539(3)	0.33506(8)	0.40459(3)	0.03344(17)
P2	0.49147(3)	0.77048(8)	0.33831(3)	0.03157(17)
O8	0.46180(10)	1.0006(2)	0.32775(8)	0.0406(4)
O9	0.48841(10)	0.6654(2)	0.40585(8)	0.0414(4)
O2A	0.61820(10)	0.0630(2)	0.25481(9)	0.0426(4)
O2B	0.62591(10)	1.0428(3)	0.50490(10)	0.0506(4)
H1B	0.748(2)	0.931(6)	0.4757(19)	0.076
O6	0.76909(10)	0.4324(2)	0.33923(8)	0.0443(4)
O7	0.77762(10)	0.1025(2)	0.41685(8)	0.0404(4)
O10	0.58441(11)	0.7541(3)	0.33314(11)	0.0540(5)
H10	0.5854	0.8126	0.2957	0.081
O1B	0.73512(10)	0.8379(3)	0.49792(9)	0.0440(4)
C2B	0.64203(12)	0.6896(3)	0.55480(10)	0.0304(4)
H2B	0.6383	0.5622	0.5246	0.036
O1A	0.50390(10)	0.2678(3)	0.24917(9)	0.0453(4)
H1A	0.498(2)	0.182(5)	0.2748(17)	0.068
N1	0.68909(10)	0.3474(3)	0.19165(9)	0.0303(3)
H1N	0.7230(15)	0.362(4)	0.2344(14)	0.036
H3N	0.7038(15)	0.434(4)	0.1637(13)	0.036
H2N	0.6945(15)	0.218(4)	0.1775(13)	0.036
N2	0.55425(11)	0.7318(3)	0.55904(10)	0.0330(4)
H4N	0.5188(15)	0.763(4)	0.5141(14)	0.040
H6N	0.5362(15)	0.617(4)	0.5716(13)	0.040
H5N	0.5530(15)	0.845(4)	0.5907(13)	0.040
O5	0.66249(13)	0.3721(4)	0.04413 40492(13)	0.0774(6)
H5	0.6568	0.3170	0.19067(10)	0.116
C2A	0.59951(12)	0.3952(3)	0.2146	0.0307(4)
H2A	0.6004	0.5334	0.63140(11)	0.037
C3B	0.70743(13)	0.6421(4)	0.6577	0.0426(5)
H3B	0.6764	0.5593	0.23550(10)	0.051
C1A	0.57406(12)	0.2244(3)	0.11188(11)	0.0316(4)
C3A	0.53670(13)	0.4127(4)	0.0845	0.0427(5)
H3A	0.5662	0.4962	0.62662(16)	0.051
C4B	0.78189(17)	0.5027(5)	0.5988	0.0636(7)
H5B	0.7590	0.3766	0.6747	0.095
H4B	0.8177	0.4625	0.6033	0.095
H6B	0.8158	0.5814	0.67529(14)	0.095
C5B	0.74022(16)	0.8429(6)	0.6778	0.0640(8)
H8B	0.6919	0.9259	0.6523	0.096
H9B	0.7734	0.9256	0.7236	0.096
H7B	0.7761	0.8045	0.51629(10)	0.096
C1B	0.66648(12)	0.8774(3)	0.10834(17)	0.0336(4)
C4A	0.45477(18)	0.5349(6)	0.1319	0.0723(9)
H5A	0.4702	0.6709	0.1325	0.108
H6A	0.4224	0.4541	0.0584	0.108
H4A	0.4201	0.5566	0.07477(15)	0.108
C5A	0.5153(2)	0.1979(5)	0.0774	0.0701(8)
H8A	0.5680	0.1252	0.0247	0.105
H7A	0.4808	0.2182	0.0987	0.105
H9A	0.4836	0.1137	0.4688(8)	0.105
H1P	0.7966(9)	0.451(2)	0.2811(10)	0.000(3)
H2P	0.4448(11)	0.659(3)		0.019(4)

Tableau 2
Facteurs d'agitation thermiques anisotropes (\AA^2)
Du Di(L-valinium monohydrogènephosphite).

Atome	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
P1	0.0413(3)	0.0297(3)	0.0331(3)	-0.00113(19)	0.0173(2)	0.0037(2)
P2	0.0362(3)	0.0297(3)	0.0319(3)	0.00233(19)	0.0154(2)	-0.00071(19)
O8	0.0473(8)	0.0356(8)	0.0490(8)	0.0100(6)	0.0297(7)	0.0094(6)
O9	0.0530(8)	0.0367(8)	0.0385(8)	0.0064(6)	0.0203(6)	-0.0057(7)
O2A	0.0467(8)	0.0370(8)	0.0532(9)	0.0150(7)	0.0286(7)	0.0070(6)
O2B	0.0517(9)	0.0359(8)	0.0726(11)	0.0150(7)	0.0319(8)	0.0047(7)
O6	0.0601(9)	0.0367(8)	0.0365(8)	0.0023(6)	0.0166(7)	-0.0056(7)
O7	0.0535(8)	0.0332(8)	0.0465(8)	0.0055(6)	0.0326(7)	0.0059(6)
O10	0.0497(9)	0.0444(9)	0.0808(12)	0.0234(8)	0.0387(9)	0.0146(7)
O1B	0.0479(9)	0.0430(9)	0.0513(9)	0.0148(7)	0.0300(7)	0.0040(7)
C2B	0.0342(9)	0.0299(9)	0.0291(9)	0.0017(7)	0.0132(7)	-0.0019(7)
O1A	0.0474(8)	0.0448(9)	0.0551(10)	0.0172(7)	0.0324(7)	0.0103(7)
N1	0.0348(8)	0.0277(8)	0.0302(8)	0.0020(7)	0.0129(7)	-0.0023(6)
N2	0.0338(8)	0.0333(9)	0.0335(9)	0.0038(7)	0.0132(7)	-0.0042(7)
O5	0.0648(12)	0.0894(16)	0.0880(15)	0.0023(13)	0.0385(11)	0.0222(12)
C2A	0.0361(9)	0.0270(9)	0.0323(9)	0.0029(7)	0.0159(7)	0.0001(7)
C3B	0.0370(10)	0.0578(14)	0.0324(10)	0.0129(9)	0.0106(8)	0.0006(9)
C1A	0.0366(10)	0.0313(9)	0.0297(9)	0.0015(7)	0.0147(7)	-0.0009(8)
C3A	0.0372(10)	0.0548(13)	0.0369(10)	0.0128(9)	0.0131(8)	0.0027(9)
C4B	0.0565(15)	0.0651(17)	0.0640(16)	0.0212(14)	0.0130(12)	0.0193(13)
C5B	0.0432(12)	0.096(2)	0.0454(13)	-0.0197(14)	0.0053(10)	0.0003(14)
C1B	0.0369(10)	0.0335(10)	0.0319(9)	0.0020(8)	0.0131(8)	-0.0043(8)
C4A	0.0541(15)	0.090(2)	0.0706(18)	0.0292(17)	0.0181(13)	0.0280(15)
C5A	0.0652(17)	0.083(2)	0.0470(14)	-0.0136(14)	-0.0022(12)	-0.0001(15)

Tableau 3

Distances [Å] inter atomiques Du Di(L-valinium monohydrogènephosphate).

Atome 1	atome 2	Distance
P1	O6	1.4920(15)
P1	O7	1.4992(15)
P1	O5	1.5393(19)
P2	O9	1.4846(14)
P2	O8	1.5109(15)
P2	O10	1.5598(16)
O2A	C1A	1.226(2)
O2B	C1B	1.209(3)
O1B	C1B	1.309(2)
C2B	N2	1.489(2)
C2B	C1B	1.516(3)
C2B	C3B	1.550(3)
O1A	C1A	1.290(2)
N1	C2A	1.489(2)
C2A	C1A	1.522(2)
C2A	C3A	1.543(3)
C3B	C5B	1.514(4)
C3B	C4B	1.525(3)
C3A	C5A	1.511(4)
C3A	C4A	1.525(3)

Tableau 4

Angles [°] de liaisons Du Di(L-valinium monohydrogènephosphate).

Atome1	Atome2	Atome3	Angle
O6	P1	O7	115.77(9)
O6	P1	O5	111.59(11)
O7	P1	O5	109.47(11)
O9	P2	O8	116.03(9)
O9	P2	O10	110.23(9)
O8	P2	O10	109.27(8)
N2	C2B	C1B	107.84(15)
N2	C2B	C3B	110.70(15)
C1B	C2B	C3B	114.36(16)
N1	C2A	C1A	107.80(15)
N1	C2A	C3A	110.94(15)
C1A	C2A	C3A	113.64(16)
C5B	C3B	C4B	111.5(2)
C5B	C3B	C2B	112.8(2)
C4B	C3B	C2B	111.28(19)
O2A	C1A	O1A	125.79(18)
O2A	C1A	C2A	120.59(16)
O1A	C1A	C2A	113.62(16)
C5A	C3A	C4A	111.3(2)
C5A	C3A	C2A	112.67(19)
C4A	C3A	C2A	111.6(2)
O2B	C1B	O1B	125.43(18)
O2B	C1B	C2B	122.34(17)
O1B	C1B	C2B	112.23(17)

Tableau 1
Coordonnées atomiques et Facteurs d'agitation thermiques isotropes (\AA^2)
Du Tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

Atome	x	y	z	U(eq) [\AA^2]
O1W	0.9151(4)	0.96692(18)	0.25364(12)	0.0248(5)
O2W	0.6577(3)	0.57899(16)	0.20800(10)	0.0162(4)
H1W	0.879(5)	1.0205(17)	0.2691(17)	0.024
H2W	1.0488(18)	0.966(3)	0.2426(17)	0.024
H22W	0.773(3)	0.550(2)	0.2251(15)	0.024
H21W	0.555(3)	0.545(2)	0.2319(14)	0.024
H4N	0.711(5)	0.352(2)	0.0664(16)	0.019
H6N	0.210(5)	0.616(2)	0.5810(16)	0.019
H7N	0.277(5)	0.6345(19)	0.4460(16)	0.019
H5N	0.159(5)	0.663(3)	0.6400(10)	0.019
H2N	0.246(5)	0.623(2)	0.0731(16)	0.019
H3N	0.686(5)	0.398(3)	0.1238(9)	0.019
H1N	0.216(5)	0.663(3)	0.1346(9)	0.019
H8N	0.313(5)	0.591(3)	0.3875(9)	0.019
H31	0.313(5)	0.417(3)	0.4007(9)	0.019
H21	0.163(5)	0.836(3)	0.6294(9)	0.019
H1	0.214(5)	0.832(3)	0.1273(9)	0.019
H39	0.122(5)	0.394(2)	0.6648(14)	0.019
H9	0.326(5)	0.877(2)	-0.1398(14)	0.019
H7	0.263(5)	1.1132(16)	-0.0654(17)	0.019
H29	0.358(5)	0.858(2)	0.3650(14)	0.019
H37	0.186(5)	0.1510(15)	0.5986(17)	0.019
H11	0.694(5)	0.571(3)	0.1127(9)	0.019
H27	0.292(5)	1.1003(15)	0.4323(17)	0.019
H19	0.819(5)	0.597(2)	-0.1541(14)	0.019
H17	0.820(5)	0.8351(16)	-0.0837(17)	0.019
H6	0.375(4)	0.273(2)	0.2973(17)	0.024
H10	0.606(6)	0.7066(15)	0.2152(18)	0.024
S3	0.16374(11)	0.46212(5)	0.27028(3)	0.01110(15)
O14	0.1544(3)	0.34857(15)	0.28520(10)	0.0143(4)
O16	0.3215(3)	0.49416(16)	0.30636(10)	0.0164(4)
O13	-0.0513(3)	0.50422(16)	0.29089(10)	0.0159(4)
O15	0.2214(3)	0.50035(16)	0.19855(10)	0.0172(4)
S2	0.37504(11)	0.79606(6)	0.25050(3)	0.01173(16)
S1	0.64847(11)	0.23880(6)	0.24791(3)	0.01241(16)
O10	0.5981(3)	0.76996(16)	0.21570(10)	0.0168(4)
O9	0.2179(3)	0.75726(16)	0.21909(10)	0.0167(4)
O6	0.4721(3)	0.22768(17)	0.30784(10)	0.0195(5)
O11	0.3690(3)	0.90816(16)	0.23976(10)	0.0168(4)
O12	0.3666(3)	0.74824(16)	0.32083(9)	0.0156(4)
O7	0.8249(3)	0.17510(16)	0.27485(10)	0.0164(4)
O8	0.6946(3)	0.34695(16)	0.22528(10)	0.0202(5)
O5	0.5669(4)	0.19949(19)	0.19716(12)	0.0273(6)
N3	0.2723(4)	0.77877(18)	-0.01196(11)	0.0106(5)

N2	0.2369(4)	0.67279(19)	0.09248(12)	0.0132(5)
N1	0.2246(4)	0.84907(18)	0.08472(11)	0.0100(5)
O1	0.2074(3)	1.02063(15)	0.08538(9)	0.0132(4)
N9	0.2978(4)	0.91457(19)	-0.11135(11)	0.0118(5)
C5	0.2574(4)	0.9638(2)	-0.01650(13)	0.0094(5)
N7	0.2673(4)	1.05009(18)	-0.06837(11)	0.0108(5)
C6	0.2303(4)	0.9523(2)	0.05306(13)	0.0099(5)
C4	0.2761(4)	0.8782(2)	-0.04398(13)	0.0099(5)
C2	0.2452(4)	0.7672(2)	0.05371(13)	0.0098(5)
C8	0.2914(4)	1.0175(2)	-0.12440(14)	0.0133(6)
H8	0.3022	1.0601	-0.1665	0.016
N32	0.2933(4)	0.58149(19)	0.42958(12)	0.0126(5)
N31	0.2884(4)	0.40495(18)	0.44238(11)	0.0111(5)
O4	0.2811(3)	0.23285(15)	0.44644(10)	0.0147(4)
N33	0.2232(4)	0.48292(18)	0.53558(11)	0.0112(5)
C32	0.2672(4)	0.4896(2)	0.47066(13)	0.0104(5)
C34	0.2020(4)	0.3853(2)	0.57009(13)	0.0115(5)
C36	0.2651(4)	0.3033(2)	0.47652(13)	0.0103(5)
C35	0.2225(4)	0.2973(2)	0.54533(13)	0.0103(5)
N39	0.1531(4)	0.35451(19)	0.63742(11)	0.0120(5)
N37	0.1851(4)	0.21443(18)	0.59900(11)	0.0116(5)
C38	0.1433(4)	0.2516(2)	0.65331(14)	0.0136(6)
H38	0.1119	0.2121	0.696	0.016
N29	0.3238(4)	0.89700(18)	0.39219(11)	0.0115(5)
N21	0.89700(18)	0.84439(18)	0.58760(11)	0.0109(5)
N22	0.2017(4)	0.66770(19)	0.59950(12)	0.0133(5)
N23	0.2585(4)	0.76778(18)	0.49371(11)	0.0103(5)
O3	0.1931(3)	1.01645(15)	0.58466(10)	0.0151(4)
C24	0.2792(4)	0.8663(2)	0.45974(13)	0.0105(5)
C28	0.3336(4)	0.9998(2)	0.37666(14)	0.0134(6)
H28	0.3626	1.0395	0.3339	0.016
N27	0.2959(4)	1.03690(19)	0.43098(11)	0.0121(5)
C25	0.2612(4)	0.9541(2)	0.48478(13)	0.0111(5)
C22	0.2181(4)	0.7602(2)	0.55904(13)	0.0106(5)
C26	0.2152(4)	0.9466(2)	0.55401(13)	0.0110(5)
N11	0.7280(4)	0.57999(18)	0.07042(11)	0.0112(5)
N12	0.7027(4)	0.40442(19)	0.08207(12)	0.0118(5)
O2	0.7464(3)	0.75118(16)	0.06710(10)	0.0154(4)
N19	0.8154(4)	0.63403(18)	-0.12587(11)	0.0108(5)
N13	0.7583(4)	0.50499(18)	-0.02364(11)	0.0112(5)
C18	0.8341(4)	0.7366(2)	-0.14151(14)	0.0128(6)
H18	0.8566	0.7764	-0.1844	0.015
C16	0.7538(4)	0.6820(2)	0.03609(13)	0.0102(5)
C14	0.7833(4)	0.6030(2)	-0.05806(13)	0.0099(5)
N17	0.8156(4)	0.77288(19)	-0.08673(12)	0.0120(5)
C12	0.7307(4)	0.4968(2)	0.04155(13)	0.0099(5)
C15	0.7835(4)	0.6898(2)	-0.03302(13)	0.0106(5)

Tableau 2
Facteurs d'agitation thermiques anisotropes (\AA^2)
Du Tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate

Atome	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
O1W	0.0225(12)	0.0195(13)	0.0348(13)	-0.0117(10)	-0.0032(10)	0.0008(10)
O2W	0.0153(10)	0.0141(11)	0.0176(10)	-0.0007(8)	-0.0003(8)	-0.0013(8)
S3	0.0144(3)	0.0084(3)	0.0108(3)	-0.0032(2)	-0.0003(2)	-0.0017(2)
O14	0.0159(10)	0.0078(10)	0.0191(10)	-0.0033(8)	-0.0014(8)	-0.0007(8)
O16	0.0184(10)	0.0161(11)	0.0162(10)	-0.0048(8)	-0.0039(8)	-0.0031(8)
O13	0.0157(10)	0.0135(11)	0.0196(10)	-0.0081(8)	0.0007(8)	0.0005(8)
O15	0.0282(11)	0.0111(11)	0.0111(9)	-0.0017(8)	0.0017(8)	-0.0032(9)
S2	0.0127(3)	0.0135(4)	0.0087(3)	-0.0031(2)	0.0004(2)	0.0003(3)
S1	0.0134(3)	0.0144(4)	0.0100(3)	-0.0046(3)	-0.0007(2)	0.0009(3)
O10	0.0167(10)	0.0096(10)	0.0235(11)	-0.0069(8)	0.0049(8)	-0.0006(8)
O9	0.0185(10)	0.0173(11)	0.0156(10)	-0.0046(8)	-0.0039(8)	-0.0044(8)
O6	0.0210(11)	0.0151(12)	0.0173(10)	0.0007(8)	0.0054(8)	0.0052(9)
O11	0.0219(11)	0.0095(10)	0.0187(10)	-0.0044(8)	0.0003(8)	0.0002(8)
O12	0.0228(11)	0.0138(11)	0.0105(9)	-0.0032(8)	-0.0024(8)	-0.0017(8)
O7	0.0143(10)	0.0184(11)	0.0168(10)	-0.0050(8)	-0.0023(8)	0.0021(8)
O8	0.0235(11)	0.0129(11)	0.0223(11)	0.0001(9)	-0.0019(9)	-0.0030(9)
O5	0.0284(12)	0.0325(15)	0.0307(13)	-0.0246(11)	-0.0147(10)	0.0121(10)
N3	0.0130(11)	0.0078(12)	0.0119(11)	-0.0036(9)	-0.0016(8)	-0.0011(9)
N2	0.0211(12)	0.0068(12)	0.0119(11)	-0.0027(9)	-0.0031(9)	0.0008(9)
N1	0.0144(11)	0.0079(12)	0.0088(10)	-0.0032(9)	-0.0024(8)	-0.0012(9)
O1	0.0195(10)	0.0090(10)	0.0130(9)	-0.0060(8)	-0.0021(8)	-0.0018(8)
N9	0.0138(11)	0.0118(12)	0.0099(11)	-0.0031(9)	0.0004(9)	-0.0028(9)
C5	0.0101(12)	0.0068(13)	0.0118(12)	-0.0027(10)	-0.0009(9)	-0.0015(10)
N7	0.0146(11)	0.0059(12)	0.0118(11)	-0.0009(9)	-0.0024(8)	-0.0013(9)
C6	0.0095(12)	0.0082(13)	0.0121(13)	-0.0023(10)	-0.0016(10)	-0.0002(10)
C4	0.0094(12)	0.0101(14)	0.0108(12)	-0.0027(10)	-0.0016(9)	-0.0012(10)
C2	0.0104(12)	0.0075(13)	0.0127(13)	-0.0046(10)	-0.0016(10)	-0.0011(10)
C8	0.0147(13)	0.0131(15)	0.0122(13)	-0.0019(11)	-0.0015(10)	-0.0040(11)
N32	0.0176(12)	0.0083(12)	0.0124(11)	-0.0039(9)	-0.0012(9)	-0.0007(9)
N31	0.0140(11)	0.0087(12)	0.0112(11)	-0.0044(9)	0.0005(9)	-0.0024(9)
O4	0.0205(10)	0.0093(10)	0.0160(10)	-0.0075(8)	0.0004(8)	-0.0012(8)
N33	0.0120(11)	0.0069(12)	0.0150(11)	-0.0041(9)	0.0000(9)	-0.0012(9)
C32	0.0068(12)	0.0107(14)	0.0146(13)	-0.0049(10)	-0.0012(9)	0.0000(10)
C34	0.0117(13)	0.0133(14)	0.0111(13)	-0.0053(10)	-0.0026(10)	-0.0001(10)
C36	0.0081(12)	0.0105(14)	0.0133(13)	-0.0054(10)	-0.0003(9)	-0.0001(10)
C35	0.0102(12)	0.0075(13)	0.0138(13)	-0.0041(10)	-0.0001(10)	-0.0006(10)
N39	0.0169(12)	0.0091(12)	0.0117(11)	-0.0063(9)	-0.0006(9)	-0.0015(9)
N37	0.0129(11)	0.0067(12)	0.0155(11)	-0.0039(9)	0.0006(9)	-0.0015(9)
C38	0.0133(13)	0.0144(15)	0.0127(13)	-0.0018(11)	-0.0019(10)	-0.0005(11)
N29	0.0161(12)	0.0089(12)	0.0106(11)	-0.0043(9)	-0.0005(9)	-0.0024(9)
N21	0.0144(11)	0.0090(12)	0.0092(11)	-0.0028(9)	0.0001(9)	-0.0003(9)
N22	0.0191(12)	0.0092(12)	0.0108(11)	-0.0023(9)	0.0014(9)	-0.0017(10)
N23	0.0127(11)	0.0083(12)	0.0109(11)	-0.0037(9)	-0.0011(8)	-0.0035(9)

O3	0.0235(11)	0.0093(10)	0.0149(10)	-0.0077(8)	-0.0023(8)	-0.0014(8)
C24	0.0098(12)	0.0114(14)	0.0110(12)	-0.0035(10)	-0.0014(9)	-0.0024(10)
C28	0.0146(13)	0.0120(15)	0.0139(13)	-0.0025(11)	-0.0015(10)	-0.0032(11)
N27	0.0169(12)	0.0071(12)	0.0128(11)	-0.0023(9)	-0.0035(9)	-0.0017(9)
C25	0.0147(13)	0.0062(13)	0.0133(13)	-0.0036(10)	-0.0014(10)	-0.0029(10)
C22	0.0109(12)	0.0079(13)	0.0138(13)	-0.0045(10)	-0.0010(10)	-0.0003(10)
C26	0.0095(12)	0.0118(14)	0.0132(13)	-0.0051(10)	-0.0024(10)	-0.0008(10)
N11	0.0147(11)	0.0094(12)	0.0103(11)	-0.0037(9)	-0.0011(9)	-0.0029(9)
N12	0.0171(12)	0.0078(12)	0.0124(11)	-0.0059(9)	-0.0013(9)	-0.0011(9)
O2	0.0211(11)	0.0121(11)	0.0146(10)	-0.0070(8)	0.0003(8)	-0.0024(8)
N19	0.0116(11)	0.0094(12)	0.0132(11)	-0.0059(9)	-0.0020(9)	-0.0005(9)
N13	0.0122(11)	0.0102(12)	0.0116(11)	-0.0036(9)	-0.0010(8)	-0.0016(9)
C18	0.0119(13)	0.0136(15)	0.0140(13)	-0.0049(11)	-0.0023(10)	-0.0001(11)
C16	0.0091(12)	0.0082(13)	0.0140(13)	-0.0044(10)	0.0001(10)	-0.0011(10)
C14	0.0085(12)	0.0104(14)	0.0115(12)	-0.0041(10)	-0.0007(9)	-0.0003(10)
N17	0.0137(11)	0.0075(12)	0.0151(12)	-0.0032(9)	-0.0001(9)	-0.0026(9)
C12	0.0080(12)	0.0097(14)	0.0141(13)	-0.0065(10)	-0.0021(9)	-0.0007(10)
C15	0.0117(12)	0.0065(13)	0.0141(13)	-0.0034(10)	-0.0009(10)	-0.0025(10)

Tableau 3
Distances [Å] inter atomiques
Du Tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate

Atome 1	atome 2	Distance
S3	O15	1.473(2)
S3	O16	1.474(2)
S3	O14	1.478(2)
S3	O13	1.489(2)
S2	O9	1.450(2)
S2	O11	1.459(2)
S2	O12	1.460(2)
S2	O10	1.559(2)
S1	O8	1.448(2)
S1	O5	1.453(2)
S1	O7	1.460(2)
S1	O6	1.549(2)
N3	C2	1.335(3)
N3	C4	1.343(3)
N2	C2	1.334(4)
N1	C2	1.381(3)
N1	C6	1.386(3)
O1	C6	1.242(3)
N9	C8	1.337(4)
N9	C4	1.373(3)
C5	C4	1.381(4)
C5	N7	1.389(3)
C5	C6	1.415(4)
N7	C8	1.325(4)
N32	C32	1.332(4)
N31	C32	1.379(3)
N31	C36	1.388(4)
O4	C36	1.235(3)
N33	C32	1.332(3)
N33	C34	1.343(4)
C34	N39	1.372(3)
C34	C35	1.377(4)
C36	C35	1.412(4)
C35	N37	1.391(3)
N39	C38	1.340(4)
N37	C38	1.327(4)
N29	C28	1.339(4)
N29	C24	1.373(3)
N21	C22	1.377(3)
N21	C26	1.390(4)
N22	C22	1.330(4)
N23	C22	1.337(3)
N23	C24	1.350(3)

O3	C26	1.236(3)
C24	C25	1.378(4)
C28	N27	1.325(4)
N27	C25	1.391(3)
C25	C26	1.419(4)
N11	C12	1.375(3)
N11	C16	1.395(3)
N12	C12	1.335(4)
O2	C16	1.237(3)
N19	C18	1.341(4)
N19	C14	1.374(3)
N13	C12	1.331(3)
N13	C14	1.349(3)
C18	N17	1.329(4)
C16	C15	1.412(4)
C14	C15	1.374(4)
N17	C15	1.390(3)

Tableau 4

Angles [°] de liaisons

Du Tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

Atome1	Atome2	Atome3	Angle
O15	S3	O16	109.67(12)
O15	S3	O14	109.33(12)
O16	S3	O14	110.49(12)
O15	S3	O13	109.41(12)
O16	S3	O13	110.13(12)
O14	S3	O13	107.77(11)
O9	S2	O11	113.52(13)
O9	S2	O12	112.68(12)
O11	S2	O12	110.93(12)
O9	S2	O10	107.45(12)
O11	S2	O10	103.76(12)
O12	S2	O10	107.88(12)
O8	S1	O5	111.30(14)
O8	S1	O7	113.63(13)
O5	S1	O7	112.55(13)
O8	S1	O6	108.06(12)
O5	S1	O6	107.18(14)
O7	S1	O6	103.51(12)
C2	N3	C4	112.6(2)
C2	N1	C6	125.5(2)
C8	N9	C4	108.8(2)
C4	C5	N7	107.3(2)
C4	C5	C6	120.4(2)
N7	C5	C6	132.3(2)
C8	N7	C5	107.7(2)
O1	C6	N1	120.8(2)
O1	C6	C5	128.4(3)
N1	C6	C5	110.8(2)
N3	C4	N9	126.2(2)
N3	C4	C5	127.5(2)
N9	C4	C5	106.3(2)
N2	C2	N3	119.7(2)
N2	C2	N1	117.0(2)
N3	C2	N1	123.2(2)
N7	C8	N9	109.9(2)
C32	N31	C36	125.5(2)
C32	N33	C34	112.7(2)
N33	C32	N32	120.0(3)
N33	C32	N31	123.2(2)
N32	C32	N31	116.8(2)
N33	C34	N39	126.0(3)
N33	C34	C35	127.2(3)
N39	C34	C35	106.8(2)
O4	C36	N31	120.6(2)

O4	C36	C35	128.8(3)
N31	C36	C35	110.6(2)
C34	C35	N37	107.0(2)
C34	C35	C36	120.7(3)
N37	C35	C36	132.2(3)
C38	N39	C34	108.5(2)
C38	N37	C35	107.8(2)
N37	C38	N39	109.8(2)
C28	N29	C24	108.1(2)
C22	N21	C26	125.7(2)
C22	N23	C24	112.4(2)
N23	C24	N29	125.1(2)
N23	C24	C25	127.7(2)
N29	C24	C25	107.2(2)
N27	C28	N29	110.1(2)
C28	N27	C25	107.9(2)
C24	C25	N27	106.8(2)
C24	C25	C26	120.1(2)
N27	C25	C26	133.1(3)
N22	C22	N23	119.6(2)
N22	C22	N21	117.2(2)
N23	C22	N21	123.2(2)
O3	C26	N21	120.5(2)
O3	C26	C25	128.7(3)
N21	C26	C25	110.8(2)
C12	N11	C16	125.1(2)
C18	N19	C14	108.1(2)
C12	N13	C14	112.9(2)
N17	C18	N19	110.0(2)
O2	C16	N11	119.7(2)
O2	C16	C15	129.0(3)
N11	C16	C15	111.3(2)
N13	C14	N19	125.5(2)
N13	C14	C15	127.4(2)
N19	C14	C15	107.1(2)
C18	N17	C15	107.7(2)
N13	C12	N12	119.7(2)
N13	C12	N11	123.2(3)
N12	C12	N11	117.1(2)
C14	C15	N17	107.1(2)
C14	C15	C16	120.2(2)
N17	C15	C16	132.8(2)

Tableau IIIa: Liaisons covalentes dans le composé di (L-valinium monohydrogènephosphite).

	\vec{a}	\overleftarrow{a}	\vec{b}	\overleftarrow{b}	\vec{c}	\overleftarrow{c}	\vec{d}	\overleftarrow{d}	\vec{e}	\overleftarrow{e}	\vec{f}	\overleftarrow{f}	\vec{g}	\overleftarrow{g}	\vec{h}	\overleftarrow{h}	\vec{i}	\overleftarrow{i}	\vec{j}	\overleftarrow{j}	\vec{k}	\overleftarrow{k}	\vec{l}	\overleftarrow{l}	\vec{m}	\overleftarrow{m}	\vec{n}	\overleftarrow{n}	\vec{o}	\overleftarrow{o}
\vec{a}	0	0	2	0	2	0	4	0	5	4	5	0	0	4	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{a}	0	0	0	2	0	2	0	4	4	5	0	5	4	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\vec{b}	2	0	0	0	2	0	4	0	5	4	5	0	0	4	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{b}	0	2	0	0	0	2	0	4	4	5	0	5	4	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\vec{c}	2	0	2	0	0	0	4	0	5	4	5	0	0	4	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{c}	0	2	0	2	0	0	0	4	4	5	0	5	4	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\vec{d}	4	0	4	0	4	0	0	0	3	4	5	0	0	4	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{d}	0	4	0	4	0	4	0	0	4	3	0	5	4	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\vec{e}	5	4	5	4	5	4	3	4	0	5	0	1	2	5	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{e}	4	5	4	5	4	5	4	3	5	0	1	0	5	2	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\vec{f}	5	0	5	0	5	0	5	0	0	1	0	0	0	3	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{f}	0	5	0	5	0	5	0	5	1	0	0	0	3	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\vec{g}	0	4	0	4	0	4	0	4	2	5	0	3	0	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{g}	4	0	4	0	4	0	4	0	5	2	3	0	0	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N

N : pas de contact.

Tableau IIIb: Liaisons covalentes dans le composé di(L-valinium monohydrogènephosphate).

	\vec{a}	\vec{a}	\vec{b}	\vec{b}	\vec{c}	\vec{c}	\vec{d}	\vec{d}	\vec{e}	\vec{e}	\vec{f}	\vec{f}	\vec{g}	\vec{g}	\vec{h}	\vec{h}	\vec{i}	\vec{i}	\vec{j}	\vec{j}	\vec{k}	\vec{k}	\vec{l}	\vec{l}	\vec{m}	\vec{m}	\vec{n}	\vec{n}	\vec{o}	\vec{o}
\vec{h}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	0	4	0	4	2	4	2	4	5	5	2	4	5	3	0	4
\vec{h}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	4	0	4	0	4	2	4	2	5	5	4	2	3	5	4	0
\vec{i}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	0	4	0	0	2	0	2	0	5	0	5	4	5	0	0	4
\vec{i}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	4	0	0	0	0	2	0	2	0	5	4	5	0	5	4	0
\vec{j}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	2	4	2	0	0	0	2	0	5	0	5	4	5	0	0	4
\vec{j}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	4	2	0	2	0	0	0	2	0	5	4	5	0	5	4	0
\vec{k}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	2	4	2	0	2	0	0	0	5	0	5	4	5	0	0	4
\vec{k}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	4	2	0	2	0	2	0	0	0	5	4	5	0	5	4	0
\vec{l}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	5	5	5	0	5	0	5	0	0	0	4	5	6	0	0	5
\vec{l}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	5	5	0	5	0	5	0	5	0	0	5	4	0	6	5	0
\vec{m}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	2	4	5	4	5	4	5	4	4	5	0	5	0	1	2	5
\vec{m}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	4	2	4	5	4	5	4	5	5	4	5	0	1	0	5	2
\vec{n}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	5	3	5	0	5	0	5	0	6	0	0	1	0	0	0	3
\vec{n}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	3	5	0	5	0	5	0	5	0	6	1	0	0	0	3	0
\vec{o}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	0	4	0	4	0	4	0	4	0	5	2	5	0	3	0	0
\vec{o}	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	4	0	4	0	4	0	4	0	5	0	5	2	3	0	0	0

N : pas de contact.

Tableau IVa: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé di(L-valinium monohydrogènephosphate).

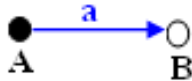
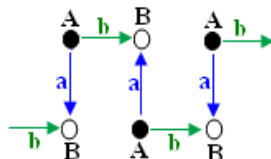
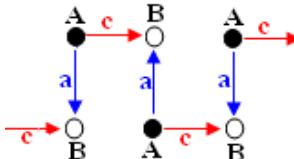
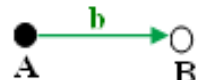
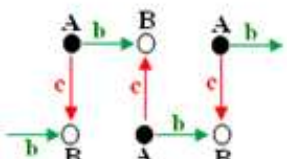
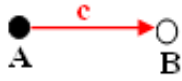
La liaison hydrogène ↘		a N1-H1N...O6	b N1-H2N...O6	c N1-H3N...O7
a N1-H1N...O6	Graphes qualitatifs	D (\vec{a})	C (\vec{a}, \vec{b})	C (\vec{a}, \vec{c})
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	D	C ² ₂ (4)	C ² ₂ (6)
b N1-H2N...O6	Graphes qualitatifs		D (\vec{b})	C (\vec{b}, \vec{c})
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs		D	C ² ₂ (6)
c N1-H3N...O7	Graphes qualitatifs			D (\vec{c})
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs			D

Tableau IVb: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé di(L-valinium monohydrogènephosphate).

La liaison hydrogène ↘		a N1-H1N...O6	b N1-H2N...O6	c N1-H3N...O7
d C3A-H3A...O7	Graphes qualitatifs	$C(\vec{a}, \vec{d})$	$C(\vec{b}, \vec{d})$	$R(\vec{c}, \vec{d})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$C^2_2(8)$	$C^2_2(8)$	$R^2_2(6)$
e C4A-H6A...O1A	Graphes qualitatifs	$D(\vec{e}, \vec{a})$	$D(\vec{e}, \vec{b})$	$D(\vec{e}, \vec{c})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(8)$	$D^2_2(9)$	$D^2_2(9)$
f O1A-H1A...O8	Graphes qualitatifs	$D(\vec{f}, \vec{a})$	$D(\vec{f}, \vec{b})$	$D(\vec{f}, \vec{c})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(8)$	$D^2_2(9)$	$D^2_2(9)$
g O10-H10...O2A	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}, \vec{g})$	$D(\vec{g}, \vec{b})$	$D(\vec{f}, \vec{c})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(8)$	$D^2_2(8)$	$D^2_2(8)$

Tableau IVc: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé di(L-valinium monohydrogèphosphate).


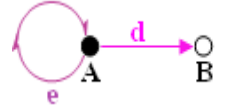

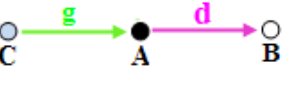

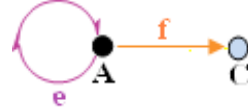
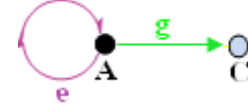



La liaison hydrogène ↘		d C3A-H3A...O7	e C4A-H6A...O1A	f O1A-H1A...O8	g O10-H10...O2A
d C3A-H3A...O7	Graphes qualitatifs	$D(\vec{d})$	$D(\vec{e}\vec{d})$	$D(\vec{f}\vec{d})$	$D(\vec{g}\vec{d})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes quantitatifs	D	$D^2_2(6)$	$D^2_2(6)$	$D^2_2(5)$
e C4A-H6A...O1A	Graphes qualitatifs		$S(\vec{e})$	$D(\vec{e}\vec{f})$	$D(\vec{e}\vec{g})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes qualitatifs		$S(6)$	$D^2_2(6)$	$D^2_2(5)$
f O1A-H1A...O8	Graphes qualitatifs			$D(\vec{f})$	$R(\vec{f}\vec{g})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes quantitatifs			D	$R^2_1(8)$
g O10-H10...O2A	Graphes qualitatifs				$D(\vec{g})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes qualitatifs				D

Tableau IVd: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé di(L-valinium monohydrogènephosphate).

La liaison hydrogène ↗		h N2-H4N...O2B	i N2-H4N...O9	j N2-H6N...O9	k N2-H5N...O8
h N2-H4N...O2B	Graphes qualitatifs	$R(\overrightarrow{hh})$	$D(\overrightarrow{ih\bar{i}})$	$D(\overrightarrow{jh\bar{j}})$	$D(\overrightarrow{kh\bar{k}})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes quantitatifs	$R^2_2(10)$	$D^3_2(7)$	$D^3_3(9)$	$D^3_3(9)$
i N2-H4N...O9	Graphes qualitatifs		$D(\bar{i})$	$R(\overrightarrow{j\bar{i}\bar{j}})$	$R(\overrightarrow{k\bar{i}\bar{k}})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes quantitatifs		D	$R^4_4(8)$	$R^4_4(12)$
j N2-H6N...O9	Graphes qualitatifs			$D(\bar{j})$	$C(\overrightarrow{j\bar{k}})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes quantitatifs			D	$C^2_2(6)$
k N2-H5N...O8	Graphes qualitatifs				$D(\bar{k})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes qualitatifs				D

Tableau IVe: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé di(L-valinium monohydrogènephosphate).

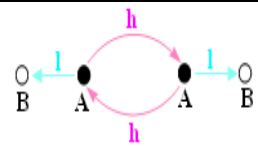
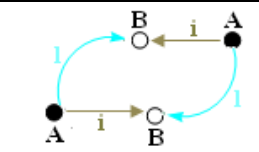
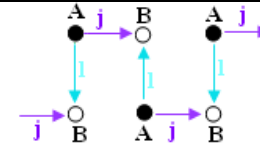
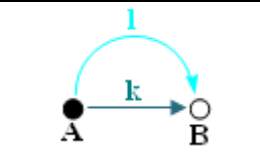
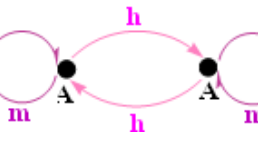
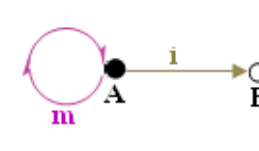
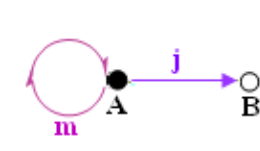
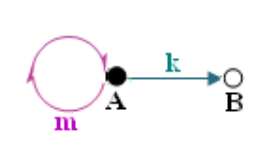
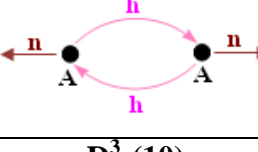

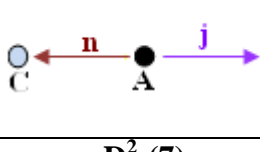
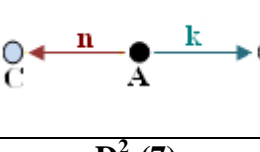
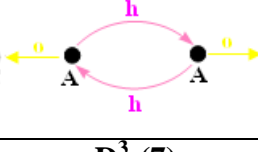

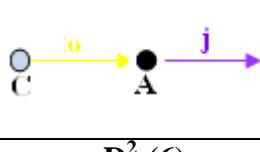
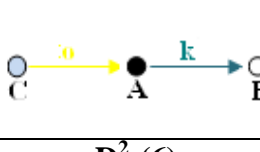
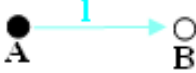
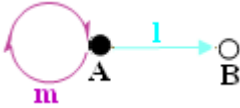



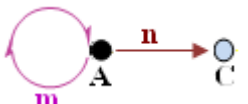

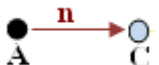


La liaison hydrogène ↘		h N2-H4N...O2B	i N2-H4N...O9	j N2-H6N...O9	k N2-H5N...O8
l C5B-H8B...O8	Graphes qualitatifs	$D(\vec{hl})$	$R(\vec{li})$	$C(\vec{jl})$	$R(\vec{kl})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes quantitatifs	$D^3_3(13)$	$R^4_4(18)$	$C^2_2(9)$	$R^2_2(7)$
m C4B-H6B...O1B	Graphes qualitatifs	$D(\vec{mh\vec{m}})$	$D(\vec{mi})$	$D(\vec{mj})$	$D(\vec{mk})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes qualitatifs	$D^3_3(9)$	$D^2_2(7)$	$D^2_2(7)$	$D^2_2(7)$
n O1B-H1B...O7	Graphes qualitatifs	$D(\vec{nh\vec{n}})$	$D(\vec{ni})$	$D(\vec{nj})$	$D(\vec{nk})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes quantitatifs	$D^3_3(10)$	$D^2_2(7)$	$D^2_2(7)$	$D^2_2(7)$
o O5-H5...O2B	Graphes qualitatifs	$D(\vec{oh\vec{o}})$	$D(\vec{oi})$	$D(\vec{oj})$	$D(\vec{ok})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes quantitatifs	$D^3_2(7)$	$D^2_2(6)$	$D^2_2(6)$	$D^2_2(6)$

Tableau IVf: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé di(L-valinium monohydrogènephosphite).

La liaison hydrogène ↘		l C5B-H8B...O8	m C4B-H6B...O1B	n O1B-H1B...O7	o O5-H5...O2B
l C5B-H8B...O8	Graphes qualitatifs	$D(\vec{l})$	$D(\vec{ml})$	$D(\vec{nl})$	$D(\vec{ol})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes quantitatifs	D	$D^2_2(6)$	$D^2_2(8)$	$D^2_2(7)$
m C4B-H6B...O1B	Graphes qualitatifs		$S(\vec{m})$	$D(\vec{mn})$	$D(\vec{mo})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes qualitatifs		S(6)	$D^2_1(3)$	$D^2_2(7)$
n O1B-H1B...O7	Graphes qualitatifs			$D(\vec{n})$	$D(\vec{on})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes quantitatifs			D	$D^2_2(5)$
o O5-H5...O2B	Graphes qualitatifs				$D(\vec{o})$
	Représentations Graphiques				
	Graphes qualitatifs				D

ANNEXE II

Tableau IIIa: Liaisons covalentes dans le composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

LC	\vec{a}	\overleftarrow{a}	\vec{b}	\overleftarrow{b}	\vec{c}	\overleftarrow{c}	\vec{d}	\overleftarrow{d}	\vec{e}	\overleftarrow{e}	\vec{f}	\overleftarrow{f}	\vec{g}	\overleftarrow{g}	\vec{h}	\overleftarrow{h}	\vec{i}	\overleftarrow{i}	\vec{j}	\overleftarrow{j}	\vec{k}	\overleftarrow{k}	\vec{l}	\overleftarrow{l}	\vec{m}	\overleftarrow{m}	\vec{n}	\overleftarrow{n}	\vec{o}	\overleftarrow{o}	\vec{p}	\overleftarrow{p}
\overleftarrow{a}	0	0	0	4	0	5	0	5	0	5	0	5	4	0	0	5	0	5	0	5	0	3	5	0	7	0	4	0	4	0	3	0
\vec{a}	0	0	4	0	5	0	5	0	5	0	5	0	0	4	5	0	5	0	5	0	3	0	0	5	0	7	0	4	0	4	0	3
\overleftarrow{b}	0	4	0	0	3	0	3	0	3	0	4	0	0	5	7	0	7	0	7	0	5	0	0	3	0	5	0	6	0	6	0	6
\vec{b}	4	0	0	0	0	3	0	3	0	3	0	4	5	0	0	7	0	7	0	7	0	5	3	0	5	0	6	0	6	0	6	0
\overleftarrow{c}	0	5	3	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	4	7	0	7	0	7	0	6	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\vec{c}	5	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	3	4	0	0	7	0	7	0	7	0	6	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{d}	0	5	3	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	4	7	0	7	0	7	0	6	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\vec{d}	5	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	3	4	0	0	7	0	7	0	7	0	6	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{e}	0	5	3	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	4	7	0	7	0	7	0	6	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\vec{e}	5	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	3	4	0	0	7	0	7	0	7	0	6	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{f}	0	5	4	0	3	0	3	0	3	0	0	0	0	3	6	0	6	0	6	0	6	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\vec{f}	5	0	0	4	0	3	0	3	0	3	0	0	3	0	0	6	0	6	0	6	0	6	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
\overleftarrow{g}	4	0	0	5	0	4	0	4	0	4	0	3	0	0	0	3	0	3	0	3	0	3	4	0	2	0	6	0	6	0	7	0
\vec{g}	0	4	5	0	4	0	4	0	4	0	3	0	0	0	3	0	3	0	3	0	3	0	0	4	0	2	0	6	0	6	0	7
\overleftarrow{h}	0	5	7	0	7	0	7	0	7	0	6	0	0	3	0	0	2	0	2	0	4	0	0	3	0	3	0	3	0	3	0	4
\vec{h}	5	0	0	7	0	7	0	7	0	7	0	6	3	0	0	0	2	0	2	0	4	3	0	3	0	3	0	3	0	4	0	

N : pas de contact.

Tableau IIIb: Liaisons covalentes dans le composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

LC	\vec{a}	\vec{a}	\vec{b}	\vec{b}	\vec{c}	\vec{c}	\vec{d}	\vec{d}	\vec{e}	\vec{e}	\vec{f}	\vec{f}	\vec{g}	\vec{g}	\vec{h}	\vec{h}	\vec{i}	\vec{i}	\vec{j}	\vec{j}	\vec{k}	\vec{k}	\vec{l}	\vec{l}	\vec{m}	\vec{m}	\vec{n}	\vec{n}	\vec{o}	\vec{o}	\vec{p}	\vec{p}						
\vec{i}	0	5	7	0	7	0	7	0	7	0	6	0	0	3	2	0	0	0	0	0	4	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N					
\vec{i}	5	0	0	7	0	7	0	7	0	7	0	6	3	0	0	2	0	0	0	0	0	4	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N				
\vec{j}	0	5	7	0	7	0	7	0	7	0	6	0	0	3	2	0	0	0	0	0	4	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N				
\vec{j}	5	0	0	7	0	7	0	7	0	7	0	6	3	0	0	2	0	0	0	0	0	4	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N			
\vec{k}	0	3	5	0	6	0	6	0	6	0	6	0	0	3	4	0	4	0	4	0	0	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N				
\vec{k}	3	0	0	5	0	6	0	6	0	6	0	6	3	0	0	4	0	4	0	4	0	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N			
\vec{l}	0	4	0	0	N	N	N	N	N	N	N	N	0	5	4	0	N	N	N	N	N	N	0	3	0	5	0	6	0	6	0	5	0	5				
\vec{l}	4	0	0	0	N	N	N	N	N	N	N	N	5	0	0	4	N	N	N	N	N	N	3	0	5	0	6	0	6	0	5	0	0	0				
\vec{m}	5	0	0	3	N	N	N	N	N	N	N	N	4	0	0	3	N	N	N	N	N	N	0	0	4	0	6	0	6	0	6	0	6	0	0			
\vec{m}	0	5	3	0	N	N	N	N	N	N	N	N	0	4	3	0	N	N	N	N	N	N	0	0	0	4	0	6	0	6	0	6	0	6	0	6		
\vec{n}	7	0	0	5	N	N	N	N	N	N	N	N	2	0	0	3	N	N	N	N	N	N	4	0	0	0	6	0	6	0	7	0	0	0	0			
\vec{n}	0	7	5	0	N	N	N	N	N	N	N	N	0	2	3	0	N	N	N	N	N	N	0	4	0	0	0	6	0	6	0	7	0	0	0	7		
\vec{o}	4	0	0	6	N	N	N	N	N	N	N	N	6	0	0	3	N	N	N	N	N	N	6	0	6	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0		
\vec{o}	0	4	6	0	N	N	N	N	N	N	N	N	0	6	3	0	N	N	N	N	N	N	0	6	0	6	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	3	
\vec{p}	4	0	0	6	N	N	N	N	N	N	N	N	6	0	0	3	N	N	N	N	N	N	6	0	6	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	
\vec{p}	0	4	6	0	N	N	N	N	N	N	N	N	0	6	3	0	N	N	N	N	N	N	0	6	0	6	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	3
\vec{q}	3	0	0	5	N	N	N	N	N	N	N	N	7	0	0	4	N	N	N	N	N	N	6	0	7	0	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	
\vec{q}	0	3	5	0	N	N	N	N	N	N	N	N	0	7	4	0	N	N	N	N	N	N	0	6	0	7	0	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0	

N : pas de contact.

Tableau IIIc: Liaisons covalentes dans le composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

LC	$\overrightarrow{a'}$	$\overleftarrow{a'}$	$\overrightarrow{b'}$	$\overleftarrow{b'}$	$\overrightarrow{c'}$	$\overleftarrow{c'}$	$\overrightarrow{d'}$	$\overleftarrow{d'}$	$\overrightarrow{e'}$	$\overleftarrow{e'}$	$\overrightarrow{f'}$	$\overleftarrow{f'}$	$\overrightarrow{g'}$	$\overleftarrow{g'}$	$\overrightarrow{h'}$	$\overleftarrow{h'}$	$\overrightarrow{i'}$	$\overleftarrow{i'}$	$\overrightarrow{j'}$	$\overleftarrow{j'}$	$\overrightarrow{k'}$	$\overleftarrow{k'}$	$\overrightarrow{l'}$	$\overleftarrow{l'}$	$\overrightarrow{m'}$	$\overleftarrow{m'}$	$\overrightarrow{n'}$	$\overleftarrow{n'}$	$\overrightarrow{o'}$	$\overleftarrow{o'}$	$\overrightarrow{p'}$	$\overleftarrow{p'}$
$\overleftarrow{a'}$	0	0	0	4	0	5	0	5	0	6	4	0	0	5	0	5	0	5	0	3	5	0	7	0	7	0	4	0	4	0	3	0
$\overrightarrow{a'}$	0	0	4	0	5	0	5	0	6	0	0	4	5	0	5	0	5	0	3	0	0	5	0	7	0	7	0	4	0	4	0	3
$\overleftarrow{b'}$	0	4	0	0	3	0	3	0	4	0	0	5	7	0	7	0	7	0	5	0	0	3	0	5	0	5	0	6	0	6	0	5
$\overrightarrow{b'}$	4	0	0	0	0	3	0	3	0	4	5	0	0	7	0	7	0	7	0	5	3	0	5	0	5	0	6	0	6	0	5	0
$\overleftarrow{c'}$	0	5	3	0	0	0	0	0	3	0	0	4	7	0	7	0	7	0	6	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
$\overrightarrow{c'}$	5	0	0	3	0	0	0	0	0	3	4	0	0	7	0	7	0	7	0	6	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
$\overleftarrow{d'}$	0	5	3	0	0	0	0	0	3	0	0	4	7	0	7	0	7	0	6	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
$\overrightarrow{d'}$	5	0	0	3	0	0	0	0	0	3	4	0	0	7	0	7	0	7	0	6	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
$\overleftarrow{e'}$	0	6	4	0	3	0	3	0	0	0	0	3	6	0	6	0	6	0	6	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
$\overrightarrow{e'}$	6	0	0	4	0	3	0	3	0	0	3	0	0	6	0	6	0	6	0	6	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
$\overleftarrow{f'}$	4	0	0	5	0	4	0	4	0	3	0	0	0	3	0	3	0	3	0	3	4	0	2	0	0	0	0	6	0	6	7	0
$\overrightarrow{f'}$	0	4	5	0	4	0	4	0	3	0	0	0	3	0	3	0	3	0	3	0	0	4	0	2	0	0	6	0	6	0	0	7
$\overleftarrow{g'}$	0	5	7	0	7	0	7	0	6	0	0	3	0	0	2	0	2	0	4	0	0	3	0	3	0	3	0	3	0	3	0	4
$\overrightarrow{g'}$	5	0	0	7	0	7	0	7	0	6	3	0	0	0	0	2	0	2	0	2	3	0	3	0	3	0	3	0	3	0	4	0
$\overleftarrow{h'}$	0	5	7	0	7	0	7	0	6	2	0	3	2	0	0	0	0	0	4	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
$\overrightarrow{h'}$	5	0	0	7	0	7	0	7	2	6	3	0	0	2	0	0	0	0	4	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N

N : pas de contact.

Tableau IIIId: Liaisons covalentes dans le composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

LC	$\overrightarrow{a'}$	$\overleftarrow{a'}$	$\overrightarrow{b'}$	$\overleftarrow{b'}$	$\overrightarrow{c'}$	$\overleftarrow{c'}$	$\overrightarrow{d'}$	$\overleftarrow{d'}$	$\overrightarrow{e'}$	$\overleftarrow{e'}$	$\overrightarrow{f'}$	$\overleftarrow{f'}$	$\overrightarrow{g'}$	$\overleftarrow{g'}$	$\overrightarrow{h'}$	$\overleftarrow{h'}$	$\overrightarrow{i'}$	$\overleftarrow{i'}$	$\overrightarrow{j'}$	$\overleftarrow{j'}$	$\overrightarrow{k'}$	$\overleftarrow{k'}$	$\overrightarrow{l'}$	$\overleftarrow{l'}$	$\overrightarrow{m'}$	$\overleftarrow{m'}$	$\overrightarrow{n'}$	$\overleftarrow{n'}$	$\overrightarrow{o'}$	$\overleftarrow{o'}$	$\overrightarrow{p'}$	$\overleftarrow{p'}$	
$\overleftarrow{i'}$	0	5	7	0	7	0	7	0	6	0	0	3	2	0	0	0	0	0	4	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
$\overrightarrow{i'}$	5	0	0	7	0	7	0	7	0	6	3	0	0	2	0	0	0	0	0	4	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
$\overleftarrow{j'}$	0	3	5	0	6	0	6	0	6	0	0	3	4	0	4	0	4	0	0	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
$\overrightarrow{j'}$	3	0	0	5	0	6	0	6	0	6	3	0	0	4	0	4	0	4	0	0	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
$\overleftarrow{k'}$	5	0	0	3	N	N	N	N	N	N	4	0	0	3	N	N	N	N	N	N	0	0	4	0	4	0	6	0	6	0	6	0	
$\overrightarrow{k'}$	0	5	3	0	N	N	N	N	N	N	0	4	3	0	N	N	N	N	N	N	0	0	0	4	0	4	0	6	0	6	0	6	
$\overleftarrow{l'}$	7	0	0	5	N	N	N	N	N	N	2	0	0	3	N	N	N	N	N	N	4	0	0	0	0	0	6	0	6	0	7	0	
$\overrightarrow{l'}$	0	7	5	0	N	N	N	N	N	N	0	2	3	0	N	N	N	N	N	N	0	4	0	0	0	0	0	6	0	6	0	7	
$\overleftarrow{m'}$	7	0	0	5	N	N	N	N	N	N	2	0	0	3	N	N	N	N	N	N	4	0	0	0	0	0	6	0	6	0	7	0	
$\overrightarrow{m'}$	0	7	5	0	N	N	N	N	N	N	0	2	3	0	N	N	N	N	N	N	0	4	0	0	0	0	0	6	0	6	0	7	
$\overleftarrow{n'}$	4	0	0	6	N	N	N	N	N	N	6	0	0	3	N	N	N	N	N	N	6	0	6	0	6	0	0	0	0	0	3	0	
$\overrightarrow{n'}$	0	4	6	0	N	N	N	N	N	N	0	6	3	0	N	N	N	N	N	N	0	6	0	6	0	6	0	0	0	0	0	3	
$\overleftarrow{o'}$	4	0	0	6	N	N	N	N	N	N	6	0	0	3	N	N	N	N	N	N	6	0	6	0	6	0	0	0	0	0	3	0	
$\overrightarrow{o'}$	0	4	6	0	N	N	N	N	N	N	0	6	3	0	N	N	N	N	N	N	0	6	0	6	0	0	0	0	0	0	0	3	
$\overleftarrow{p'}$	3	0	0	5	N	N	N	N	N	N	7	0	0	4	N	N	N	N	N	N	6	0	7	0	7	0	3	0	3	0	0	0	
$\overrightarrow{p'}$	0	3	5	0	N	N	N	N	N	N	0	7	4	0	N	N	N	N	N	N	0	6	0	7	0	7	0	3	0	3	0	0	

N : pas de contact.

Tableau IVa: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

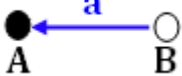
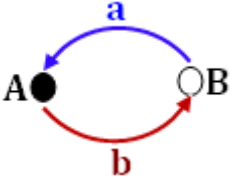

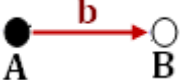


La liaison hydrogène ↘		a N17-H17...O1	b N7-H7...O2	c C8-H8...O10
a N17-H17...O1	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a})$	$R(\vec{a}, \vec{b})$	$D(\vec{a}, \vec{c})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	D	$R^2_2(10)$	$D^2_2(10)$
b N7-H7...O2	Graphes qualitatifs		$D(\vec{b})$	$D(\vec{b}, \vec{c})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs		D	$D^2_2(7)$
c C8-H8...O10	Graphes qualitatifs			$D(\vec{c})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs			D

Tableau IVb: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La liaison hydrogène ↙ ↘		a N17-H17...O1	b N7-H7...O2	c C8-H8...O10
d C8-H8...O11	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}, \vec{d})$	$D(\vec{b}, \vec{d})$	$R(\vec{c}, \vec{d})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(9)$	$D^2_2(7)$	$R^2_1(4)$
e C8-H8...O1W	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}, \vec{e})$	$D(\vec{b}, \vec{e})$	$D(\vec{c}, \vec{e})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(7)$	$D^2_1(5)$
f N9-H9...O5	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}, \vec{f})$	$D(\vec{b}, \vec{f})$	$D(\vec{c}, \vec{f})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(8)$	$D^2_2(8)$

Tableau IVc: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

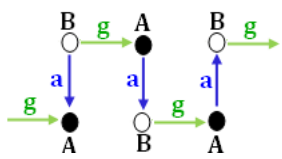
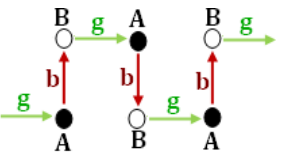

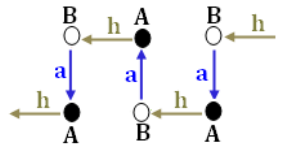
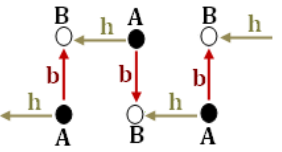

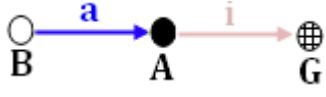
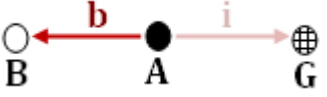

La liaison hydrogène ↘		a N17-H17...O1	b N7-H7...O2	c C8-H8...O10
g N12-H4N...N3	Graphes qualitatifs	$C(\vec{g}, \vec{a})$	$C(\vec{g}, \vec{b})$	$D(\vec{g}, \vec{c})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$C^2_2(13)$	$C^2_2(11)$	$D^2_2(9)$
h N2-H2N...N13	Graphes qualitatifs	$C(\vec{h}, \vec{a})$	$C(\vec{h}, \vec{b})$	$D(\vec{c}, \vec{h})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$C^2_2(11)$	$C^2_2(13)$	$D^2_2(11)$
i N2-H1N...O15	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}, \vec{i})$	$D(\vec{b}, \vec{i})$	$D(\vec{c}, \vec{i})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(12)$

Tableau IVd: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

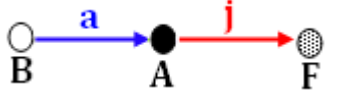
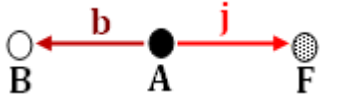
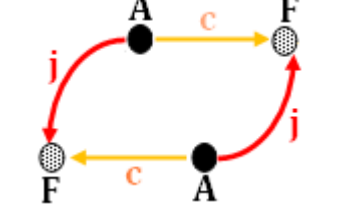

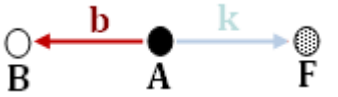
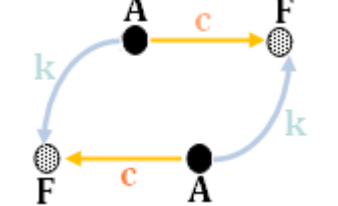
La liaison hydrogène ↙ ↘		a N17-H17...O1	b N7-H7...O2	c C8-H8...O10
j N2-H1N...O9	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}, \vec{j})$	$D(\vec{b}, \vec{j})$	$R(\vec{c}, \vec{j}, \vec{c}, \vec{j})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(11)$	$R^4_4(22)$
k N1-H1...O9	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}, \vec{k})$	$D(\vec{b}, \vec{k})$	$R(\vec{c}, \vec{k}, \vec{c}, \vec{k})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(8)$	$D^2_2(9)$	$R^4_4(20)$

Tableau IVe: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

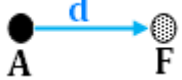





La liaison hydrogène ↙ ↘		d C8-H8...O11	e C8-H8...O1W	f N9-H9...O5
d C8-H8...O11	Graphes qualitatifs	$D(\vec{d})$	$D(\vec{d}, \vec{e})$	$D(\vec{d}, \vec{f})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	D	$D^2_1(4)$	$D^2_2(9)$
e C8-H8...O1W	Graphes qualitatifs		$D(\vec{e})$	$D(\vec{f}, \vec{e})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs		D	$D^2_2(4)$
f N9-H9...O5	Graphes qualitatifs			$D(\vec{f})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs			D

Tableau IVf: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La liaison hydrogène ↙ ↘		d C8-H8...O11	e C8-H8...O1W	f N9-H9...O5
g N12-H4N...N3	Graphes qualitatifs	$D(\vec{g}, \vec{d})$	$D(\vec{g}, \vec{e})$	$D(\vec{g}, \vec{f})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(9)$	$D^2_2(8)$	$D^2_2(8)$
h N2-H2N...N13	Graphes qualitatifs	$D(\vec{d}, \vec{h})$	$D(\vec{e}, \vec{h})$	$D(\vec{f}, \vec{h})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(11)$	$D^2_2(10)$	$D^2_2(10)$
i N2-H1N...O15	Graphes qualitatifs	$D(\vec{d}, \vec{i})$	$D(\vec{e}, \vec{i})$	$D(\vec{f}, \vec{i})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(12)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(11)$

Tableau IVg: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La liaison hydrogène ↘		d C8-H8...O11	e C8-H8...O1W	f N9-H9...O5
j N2-H1N...O9	Graphes qualitatifs	$R(\vec{d}, \vec{j}, \vec{d}, \vec{j})$	$D(\vec{e}, \vec{j})$	$D(\vec{f}, \vec{j})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^4_4(22)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(11)$
k N1-H1...O9	Graphes qualitatifs	$R(\vec{d}, \vec{k}, \vec{d}, \vec{k})$	$D(\vec{e}, \vec{k})$	$D(\vec{f}, \vec{k})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$R^2_2(20)$	$D^2_2(10)$	$D^2_2(11)$

Tableau IVh: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.


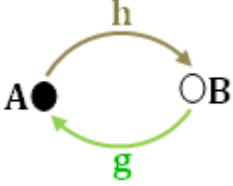




La liaison hydrogène ↘		g N12-H4N...N3	h N2-H2N...N13	i N2-H1N...O15
g N12-H4N...N3	Graphes qualitatifs	$D(\vec{g})$	$R(\vec{h}, \vec{g})$	$D(\vec{g}, \vec{i})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	D	$R^2_2(8)$	$D^2_2(8)$
h N2-H2N...N13	Graphes qualitatifs		$D(\vec{h})$	$D(\vec{h}, \vec{i})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs		D	$D^2_2(6)$
i N2-H1N...O15	Graphes qualitatifs			$D(\vec{i})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs			D

Tableau IVi: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.


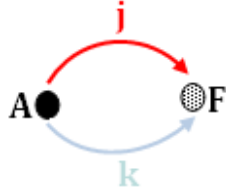
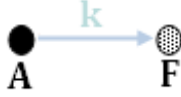
La liaison hydrogène ↘		\vec{j} N2-H1N...O9	\vec{k} N1-H1...O9
\vec{j} N2-H1N...O9	Graphes qualitatifs	$D(\vec{j})$	$R(\vec{j}, \vec{k})$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs	D	$R^1_2(6)$
\vec{k} N1-H1...O9	Graphes qualitatifs		$D(\vec{k})$
	Représentations Graphiques		
	Graphes qualitatifs		D

Tableau IVj: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La liaison hydrogène ↘		l N11-H11...O2W	m N12-H3N...O8	n N19-H19...O15
a N17-H17...O1	Graphes qualitatifs	$D(\vec{l}, \vec{a})$	$D(\vec{m}, \vec{a})$	$D(\vec{n}, \vec{a})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(8)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(8)$
b N7-H7...O2	Graphes qualitatifs	$D(\vec{l}, \vec{b})$	$D(\vec{m}, \vec{b})$	$D(\vec{n}, \vec{b})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^1_2(7)$	$D^2_2(10)$	$D^2_2(10)$
h N2-H2N...N13	Graphes qualitatifs	$D(\vec{l}, \vec{h})$	$D(\vec{m}, \vec{h})$	$D(\vec{n}, \vec{h})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(7)$	$D^2_2(8)$	$D^2_2(8)$
g N12-H4N...N3	Graphes qualitatifs	$D(\vec{l}, \vec{g})$	$D(\vec{m}, \vec{g})$	$D(\vec{n}, \vec{g})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(7)$	$D^2_2(6)$	$D^2_2(10)$

Tableau IVk: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La liaison hydrogène ↘		^o N19-H19...O14	^p C18-H18...O7
a N17-H17...O1	Graphes qualitatifs	$D(\vec{o}, \vec{a})$	$D(\vec{p}, \vec{a})$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(8)$	$D^2_2(7)$
b N7-H7...O2	Graphes qualitatifs	$D(\vec{o}, \vec{b})$	$D(\vec{p}, \vec{b})$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(10)$
h N2-H2N...N13	Graphes qualitatifs	$D(\vec{o}, \vec{h})$	$D(\vec{p}, \vec{h})$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(8)$	$D^2_2(9)$
g N12-H4N...N3	Graphes qualitatifs	$D(\vec{o}, \vec{g})$	$D(\vec{p}, \vec{g})$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(11)$

Tableau IVI: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La liaison hydrogène ↘		l N11-H11...O2W	m N12-H3N...O8	n N19-H19...O15
l N11-H11-O2W	Graphes qualitatifs	$D(\vec{l})$	$D(\vec{l}, \vec{m})$	$D(\vec{l}, \vec{n})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	D	$D^2_2(8)$	$D^2_2(10)$
m N12-H3N...O8	Graphes qualitatifs		$D(\vec{m})$	$D(\vec{m}, \vec{n})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs		D	$D^2_2(11)$
n N19-H19...O15	Graphes qualitatifs			$D(\vec{n})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs			D

Tableau IVm: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

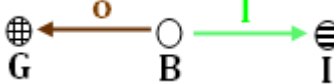
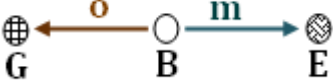
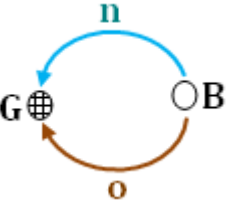
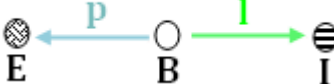
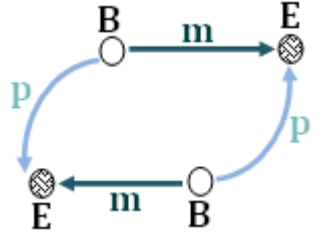
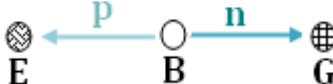
La liaison hydrogène ↘		l N11-H11...O2W	m N12-H3N...O8	n N19-H19...O15
<p style="text-align: center;">o N19-H19...O14</p>	Graphes qualitatifs	$D(\vec{o}, \vec{l})$	$D(\vec{o}, \vec{m})$	$R(\vec{o}, \vec{n})$
	Représentations Graphiques			
<p style="text-align: center;">p C18-H18...O7</p>	Graphes qualitatifs	$D(\vec{p}, \vec{l})$	$R(\vec{p}, \vec{m}, \vec{p}, \vec{m})$	$D(\vec{p}, \vec{n})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$R^4_4(22)$	$D^2_2(8)$

Tableau IVn: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.


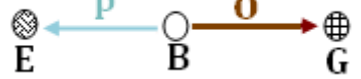

La liaison hydrogène ↘		$\overset{o}{\text{N19-H19...O14}}$	$\overset{p}{\text{C18-H18...O7}}$
$\overset{o}{\text{N19-H19...O14}}$	Graphes qualitatifs	$D(\vec{o})$	$D(\vec{p}, \vec{o})$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs	D	$D^2_2(8)$
$\overset{p}{\text{C18-H18...O7}}$	Graphes qualitatifs		$D(\vec{p})$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs		D

Tableau IVo: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

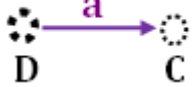
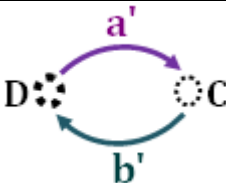
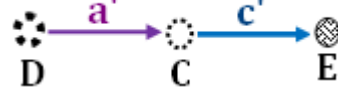
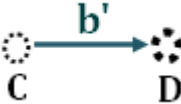


La liaison hydrogène ↘		a' N37-H37...O3	b' N27-H27...O4	C' C28-H28...O6
a' N37-H37...O3	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}')$	$R(\vec{a}', \vec{b}')$	$D(\vec{a}', \vec{c}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	D	$R^2_2(10)$	$D^2_2(10)$
b' N27-H27...O4	Graphes qualitatifs		$D(\vec{b}')$	$D(\vec{c}', \vec{b}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs		D	$D^2_2(7)$
C' C28-H28...O6	Graphes qualitatifs			$D(\vec{c}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs			D

Tableau IVp: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La liaison hydrogène ↘		a' N37-H37...O3	b' N27-H27...O4	C' C28-H28...O6
d' N29-H29...O11	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}', \vec{d}')$	$D(\vec{d}', \vec{b}')$	$D(\vec{d}', \vec{c}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(8)$	$D^2_1(8)$
e' N29-H29...O12	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}', \vec{e}')$	$D(\vec{e}', \vec{b}')$	$D(\vec{e}', \vec{c}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(8)$	$D^2_2(8)$
f' N32-H7N...N23	Graphes qualitatifs	$C(\vec{a}', \vec{f}')$	$C(\vec{b}', \vec{f}')$	$D(\vec{f}', \vec{c}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$C^2_2(13)$	$C^2_2(11)$	$D^2_2(9)$

Tableau IVq: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

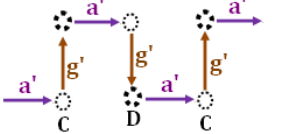
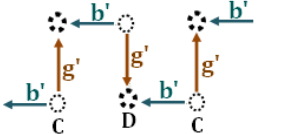

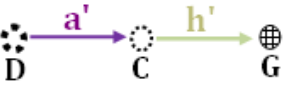

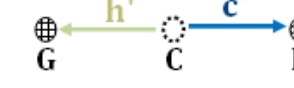
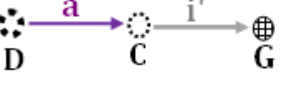
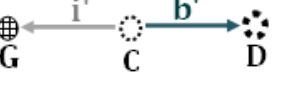
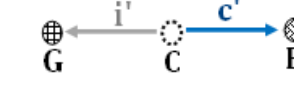

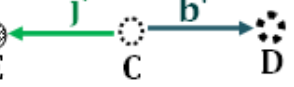
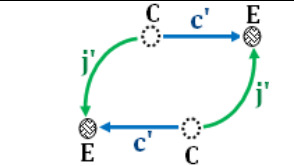
La liaison hydrogène ↘		a' N37-H37...O3	b' N27-H27...O4	C' C28-H28...O6
g' N22-H6N...N33	Graphes qualitatifs	$C(\vec{a}', \vec{g}')$	$C(\vec{b}', \vec{g}')$	$D(\vec{g}', \vec{c}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$C^2_2(11)$	$C^2_2(13)$	$D^2_2(11)$
h' N22-H5N...O13	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}', \vec{h}')$	$D(\vec{h}', \vec{b}')$	$D(\vec{h}', \vec{c}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(12)$
i' N22-H5N...O14	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}', \vec{i}')$	$D(\vec{i}', \vec{b}')$	$D(\vec{i}', \vec{c}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(12)$
j' N21-H21...O7	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}', \vec{j}')$	$D(\vec{j}', \vec{b}')$	$R(\vec{j}', \vec{c}', \vec{j}', \vec{c}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(7)$	$D^2_2(9)$	$R^4_4(22)$

Tableau IVr: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.


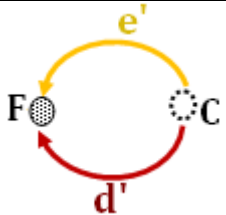


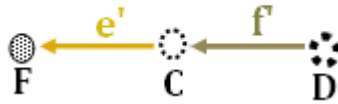

La liaison hydrogène ↘		d' N29-H29...O11	e' N29-H29...O12	f' N32-H7N...N23
d' N29-H29...O11	Graphes qualitatifs	$D(\vec{d}')$	$R(\vec{d}', \vec{e}')$	$D(\vec{d}', \vec{f}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	D	$R^2_1(4)$	$D^2_2(8)$
e' N29-H29...O12	Graphes qualitatifs		$D(\vec{e}')$	$D(\vec{e}', \vec{f}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs		D	$D^2_2(8)$
f' N32-H7N...N23	Graphes qualitatifs			$D(\vec{f}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs			D

Tableau IVs: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La liaison hydrogène ↘		d' N29-H29...O11	e' N29-H29...O12	f' N32-H7N...N23
g' N22-H6N...N33	Graphes qualitatifs	$D(\overrightarrow{d'}, \overrightarrow{g'})$	$D(\overrightarrow{e'}, \overrightarrow{g'})$	$R(\overrightarrow{f'}, \overrightarrow{g'})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(10)$	$R^2_2(8)$
h' N22-H5N...O13	Graphes qualitatifs	$D(\overrightarrow{h'}, \overrightarrow{d'})$	$D(\overrightarrow{e'}, \overrightarrow{h'})$	$D(\overrightarrow{h'}, \overrightarrow{f'})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(11)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(8)$
i' N22-H5N...O14	Graphes qualitatifs	$D(\overrightarrow{i'}, \overrightarrow{d'})$	$D(\overrightarrow{i'}, \overrightarrow{e'})$	$D(\overrightarrow{i'}, \overrightarrow{f'})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(11)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(8)$
j' N21-H21...O7	Graphes qualitatifs	$D(\overrightarrow{j'}, \overrightarrow{d'})$	$R(\overrightarrow{j'}, \overrightarrow{e'})$	$D(\overrightarrow{j'}, \overrightarrow{f'})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(11)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(8)$

Tableau IVt: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.




La liaison hydrogène ↘		g' N22-H6N...N33	h' N22-H5N...O13
g' N22-H6N...N33	Graphes qualitatifs	$D(\vec{g}')$	$D(\vec{h}', \vec{g}')$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs	D	$D^2_2(6)$
h' N22-H5N...O13	Graphes qualitatifs		$D(\vec{h}')$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs		D

Tableau IVu: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.


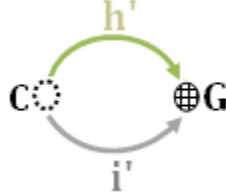
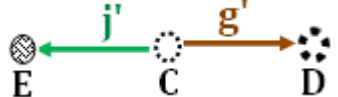
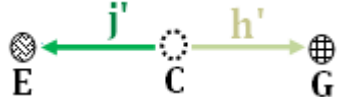
La liaison hydrogène ↘		g' N22-H6N...N33	h' N22-H5N...O13
i' N22-H5N...O14	Graphes qualitatifs	$D(\vec{i}', \vec{g}')$	$R(\vec{i}', \vec{h}')$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(6)$	$R^2_1(4)$
j' N21-H21...O7	Graphes qualitatifs	$D(\vec{j}', \vec{g}')$	$D(\vec{j}', \vec{h}')$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(8)$	$D^2_2(8)$

Tableau IVv: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

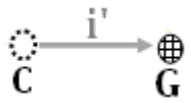
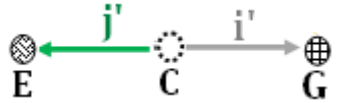

La liaison hydrogène ↘		i' N22-H5N...O14	j' N21-H21...O7
i' N22-H5N...O14	Graphes qualitatifs	$D(\vec{i}')$	$D(\vec{i}', \vec{j}')$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs	D	$D^2_2(9)$
j' N21-H21...O7	Graphes qualitatifs		$D(\vec{j}')$
	Représentations Graphiques		
	Graphes quantitatifs		D

Tableau IVw: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.












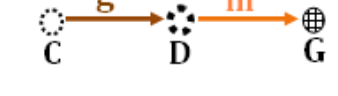
La liaison hydrogène ↘		k' C38-H38...O1W	l' C38-H38...O9	m' N39-H39...O13
a' N37-H37...O3	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}', \vec{k}')$	$D(\vec{a}', \vec{l}')$	$D(\vec{a}', \vec{m}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(6)$	$D^2_2(7)$	$D^2_2(8)$
b' N27-H27...O4	Graphes qualitatifs	$D(\vec{b}', \vec{k}')$	$D(\vec{b}', \vec{l}')$	$D(\vec{b}', \vec{m}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(9)$	$D^2_2(10)$	$D^2_2(10)$
f' N32-H7N...N23	Graphes qualitatifs	$D(\vec{f}', \vec{k}')$	$D(\vec{f}', \vec{l}')$	$D(\vec{f}', \vec{m}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(10)$
g' N22-H6N...N33	Graphes qualitatifs	$D(\vec{g}', \vec{k}')$	$D(\vec{g}', \vec{l}')$	$D(\vec{g}', \vec{m}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(8)$	$D^2_2(9)$	$D^2_2(8)$

Tableau IVx: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La liaison hydrogène ↘		n' N32-H8N...O12	o' N32-H8N...O16	p' N31-H31...O16
a' N37-H37...O3	Graphes qualitatifs	$D(\vec{a}', \vec{n}')$	$D(\vec{a}', \vec{o}')$	$D(\vec{a}', \vec{p}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(11)$	$D^2_2(11)$	$D^2_2(9)$
b' N27-H27...O4	Graphes qualitatifs	$D(\vec{b}', \vec{n}')$	$D(\vec{b}', \vec{o}')$	$D(\vec{b}', \vec{p}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(10)$	$D^2_2(8)$
f' N32-H7N...N23	Graphes qualitatifs	$D(\vec{f}', \vec{n}')$	$D(\vec{f}', \vec{o}')$	$D(\vec{f}', \vec{p}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(6)$	$D^2_2(6)$	$D^2_2(8)$
g' N22-H6N...N33	Graphes qualitatifs	$D(\vec{g}', \vec{n}')$	$D(\vec{g}', \vec{o}')$	$D(\vec{g}', \vec{p}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(8)$	$D^2_2(8)$	$D^2_2(8)$

Tableau IVy: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.




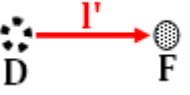


La liaison hydrogène ↘		k' C38-H38...O1W	l' C38-H38...O9	m' N39-H39...O13
k' C38-H38...O1W	Graphes qualitatifs	$D(\vec{k}')$	$D(\vec{k}', \vec{l}')$	$D(\vec{k}', \vec{m}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	D	$D^2_1(4)$	$D^2_2(7)$
l' C38-H38...O9	Graphes qualitatifs		$D(\vec{l}')$	$D(\vec{l}', \vec{m}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs		D	$D^2_2(8)$
m' N39-H39...O13	Graphes qualitatifs			$D(\vec{m}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs			D

Tableau IVz: Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.


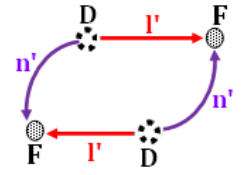

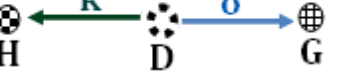

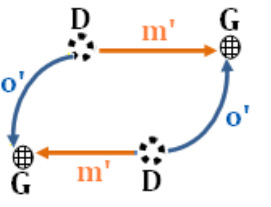


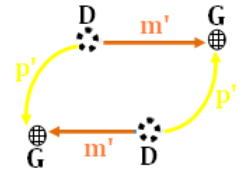
La liaison hydrogène ↘		k' C38-H38...O1W	l' C38-H38...O9	m' N39-H39...O13
n' N32—H8N...O12	Graphes qualitatifs	$D(\overline{k'}, \overline{n'})$	$R(\overline{n'}, \overline{l'}, \overline{n'}, \overline{l'})$	$D(\overline{n'}, \overline{m'})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(11)$	$R^4_4(22)$	$D^2_2(11)$
o' N32-H8N...O16	Graphes qualitatifs	$D(\overline{k'}, \overline{o'})$	$D(\overline{o'}, \overline{l'})$	$R(\overline{o'}, \overline{m'}, \overline{o'}, \overline{m'})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(11)$	$D^2_2(12)$	$R^4_4(20)$
p' N31-H31...O16	Graphes qualitatifs	$D(\overline{k'}, \overline{p'})$	$D(\overline{p'}, \overline{l'})$	$R(\overline{p'}, \overline{m'}, \overline{p'}, \overline{m'})$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	$D^2_2(10)$	$D^2_2(11)$	$R^4_4(20)$

Tableau IVa': Motifs unitaires et graphes binaires qualitatifs et quantitatifs du composé tétra guaninium dibisulfate sulfate dihydrate.

La liaison hydrogène ↘		n' N32-H8N...O12	o' N32-H8N...O16	p' N31-H31...O16
n' N32—H8N...O12	Graphes qualitatifs	$D(\vec{n}')$	$D(\vec{n}', \vec{o}')$	$D(\vec{n}', \vec{p}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs	D	$D^2_2(5)$	$D^2_2(9)$
o' N32-H8N...O16	Graphes qualitatifs		$D(\vec{o}')$	$D(\vec{o}', \vec{p}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs		D	$R^2_1(6)$
p' N31-H31...O16	Graphes qualitatifs			$D(\vec{p}')$
	Représentations Graphiques			
	Graphes quantitatifs			D

Abstract

The present work has been realized in the unit of research for chemistry of the environment and molecular structural (CHEMS) belong to chemistry Department in the Mentouri-Constantine university, within the framework of the study of the hybrid compounds based on amino acids as organic moieties and mineral acids.

During this work, we have synthesis and crystallize two hybrids compounds based on monohydrogenphosphite and sulfate acid.

The structure of the first compound which is di(L-valinium monohydrogenphosphite), is formed by two cationic entities and two anionic entities. The detailed study of intermolecular interactions of these compounds showed the presence of three types of hydrogen bonds: N-H...O, O-H...O and weak of type C-H...O established between cations, cations and anions.

The second compound is constituted of four cationic entities, three anionic entities and two water molecule. The cohesion of the structure is assured by a three-dimensional network of hydrogen bonds moderate of type N-H...O, O-H...O N-H...N, and C-H...O.

The theory of Bernstein and Grell permitted us to construct qualitative and quantitative graphs of the hydrogen bonds of these two composed to understand their crystalline network better.

ملخص

العمل المقدم والمنجز على مستوى وحدة بحوث الكيمياء البيئية و الجزيئية الإنشائية بجامعة منتوري- قسنطينة و يدخل في إطار دراسة المركبات الهجينة القائمة على أساس الأحماض الأمينية كمصفوفة عضوية و مختلف الأملاح المعدنية.

في هذا العمل قمنا بتخليق و بلورة مركبين يتكونان أساسا من الكبريتات و الفوسفور بنية المركب الأول (ل- فالينيوم مونوهيدروجين فوسفيت) تتكون من اثنان جزيئات كاتيونية و اثنان أنيونية. الدراسة المفصلة للتفاعلات الواقعة بين الجزيئات بينت وجود ثلاثة أنواع من الروابط الهيدروجينية المتوسطة من نوع $O-H...O$, $N-H...O$ و الضعيفة من نوع $C-H...O$. الشبكة ثلاثية الأبعاد المكونة من هذه الروابط الهيدروجينية المختلفة تحقق الترابط بين مختلف جزيئات هذه البنية.

المركب الثاني يتألف من أربع جزيئات كاتيونية و ثلاث أنيونية و اثنان جزيئات من الماء تماسك البنية مؤمن بواسطة شبكة ثلاثية الأبعاد من الروابط الهيدروجينية المتوسطة من نوع $N-H...N$, $O-H...O$, $N-H...O$ و $C-H...O$.

. ! " # # \$

Résumé

Le présent travail réalisé à l'unité de recherche de chimie de l'environnement et moléculaire structurale (CHEMS) du Département de Chimie à l'université Mentouri-Constantine, dans le cadre de l'étude sur les composés hybrides à base d'acides aminés comme matrices organiques et différents acides minéraux.

Au cours de ce travail nous avons synthétisé et cristallisé deux composés hybrides à base de monohydrogènephosphite et de sulfate, bisulfate.

La structure du premier composé le di(L-valinium monohydrogenphosphite) est formée par deux entités cationiques et deux entités anioniques. L'étude détaillée des interactions intermoléculaires de ces composés a mis en évidence la présence de trois type de liaisons hydrogène: N-H...O, O-H...O, et faibles de type C-H...O établies entre cations, cation-anion.

Le deuxième composé est formé de quatre cations guaninium, de deux anions bisulfate d'un anion sulfate et de deux molécules d'eau.

La cohésion de la structure est assurée par un réseau tridimensionnel de liaisons hydrogène de type N-H...O, O-H...O, N-H...N, et C-H...O.

Les théories de Bernstein et Grell nous ont permis de construire les graphes qualitatifs et quantitatifs du modèle des liaisons hydrogène de ces deux composés pour mieux comprendre leurs empilements cristallin.