

En résumé, l'écart de planéité dans ces composés peut être attribué à deux phénomènes différents :

- Soit aux contraintes du cristal (cas du **BImEI**).
- Soit à la localisation des deux doubles liaisons C=N et C=O (cas des **imidates N-acylés**).

La méthode semi-empirique PM3 apparaît comme un outil théorique valable pour décrire les structures géométriques des grands systèmes. En effet, avec un coût réduit nos résultats théoriques se comparent bien avec ceux obtenus au moyen des rayons X. Ainsi, les méthodes de la chimie quantique peuvent bien compléter et compenser les déficits des techniques expérimentales.

Au cours de cette étude nous avons pu constater que le monomère du **CCIM**, contrairement au dimère proposé par les expérimentateurs, peut être un bon modèle pour décrire la structure cristalline. Ainsi le nombre de molécules Z par maille est égale à 1 au lieu de 2 proposé par Harizi et Coll. Il en est de même pour le **BImEI** où nous avons remarqué que c'est le dimère qui décrit le mieux la structure cristalline et nous proposons dans ce cas Z égale à 2 (un dimère par maille) au lieu de Z=4 (un quadrimère par maille) proposé par les expérimentateurs.

Ce présent travail nous a permis de comprendre les principales différences structurales et conformationnelles qui existe dans les cristaux du **CCIM** (imide N-acylé) et du **BImEI** (imide non acylé).

Ce travail nous a permis également d'ouvrir des perspectives sur la réactivité de ces composés vis à vis des attaques nucléophiles qui ont une importance capitale dans la synthèse des hétérocycles à intérêt pharmacologique et agrochimique. Ainsi on pourra envisager par la suite d'expliquer les différents mécanismes réactionnels qui conduisent à ces hétérocycles.