

## Résumé

Les complexes de coordination sont un des sujets d'études de la chimie inorganique contemporaine, également, un intérêt considérable a apparu pour le développement et la synthèse de nouveaux composés de coordination possédant diverses activités biologiques, tels que les antimicrobiens, les anti-inflammatoires, les antifongiques, les antioxydants et les anticancéreux ;

À cet effet, nous avons synthétisé au cours de ce travail, six nouveaux composés originaux à base de ligand sulfaméthoxazole : quatre complexes mononucléaire à base de zinc, de cuivre et de cobalt, ainsi, deux polymères à base de cobalt et d'argent ;

Les structures cristallines de ces derniers ont été déterminées à partir des données de diffraction des rayons X à basse température, ils sont caractérisés par des analyses préliminaires et en utilisant IR et UV-Vis, accomplis par l'étude des réseaux des liaisons hydrogène et l'analyse des surfaces d'Hirshfeld.

Le pouvoir inhibiteur des composés à base de zinc et de cuivre, comparant avec celui d'un antibiotique approuvé tels que : *le Cotrimoxale*, a été examiné avec la méthode de diffusion en milieu gélosé.

De sorte à bien améliorer la compréhension de la structure des complexes de coordination, une étude théorique a été exécuté sur ces complexes moyennant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), cette méthode a été effectuée avec la base mPW1PW91 au niveau TZVP de la théorie en utilisant le programme Gaussian03W et l'interface graphique GaussView 5.0.8.

**Mots clés** : Monocristal, Diffraction des rayons X, Sulfaméthoxazole, Métaux de transitions, Analyse de surface d'Hirshfeld, Activités antibactériennes/antifongiques, Méthode DFT/mPW1PW91/TZVP.