

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne Démocratique et Populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

المديرية العامة للبحث العلمي والتطوير التكنولوجي

**Direction Générale de la Recherche Scientifique et du Développement
Technologique**



مديرية برمجة البحث والتقييم والاستشراف

Direction de la Programmation de la Recherche, de l'Evaluation et de la Prospective

BILAN TRIENNAL 2012-2013-2014

**DES ACTIVITES DE RECHERCHE SCIENTIFIQUE ET DU DEVELOPPEMENT
TECHNOLOGIQUE - DES LABORATOIRES DE RECHERCHE**

SESSION 2015

Introduction

La chimie computationnelle est devenue un outil incontournable dans l'élaboration de nouvelles molécules médicamenteuses et le sera encore plus dans les prochaines années avec le développement sans cesse des moyens de calculs. C'est dans cette vocation que le laboratoire de chimie computationnelle de l'université 8 Mai 1945 de Guelma qu'il a été créé en 2012. Durant ces dernières trois années nous avons traversé la première étape qui consistait à maîtriser les programmes de calculs, et à travers de modèle simples, comprendre les interactions, étudier la dynamique de ces modèles, Voir les effets de l'environnement, étudier l'influence des méthodes, mécanique quantique ou mécanique moléculaire et mesurer par calcul l'activité biologique. Cela nous a permis d'évoluer positivement dans ce domaine et qui de bon augure pour la suite. Nous avons pu soutenir 07 doctorats, 01 habilitation, 20 publications internationales et plusieurs communications dans des conférences internationales et nationales. Egalement, nous avons organisé deux mini workshops sur la chimie computationnelle.

Structure du document

Rubrique	Page
1. Identification du laboratoire	3
2. Informations sur le directeur du laboratoire	3
3. Présentation du laboratoire	4
4. Présentation des équipes	6
4.1 Expérience et compétences des équipes du laboratoire	7
4.2 Formation liée aux thèmes de recherche du laboratoire	9
4.3 Autres valorisations des activités de recherche	10
5. Equipements Scientifiques acquis	10
6. Procès verbal du Conseil de laboratoire	11
7. Extrait du procès verbal du CS de l'établissement	12



BILAN TRIENNAL DES ACTIVITES DE RECHERCHE DG-RSDT

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne Démocratique et Populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

المديرية العامة للبحث العلمي والتطوير التكنولوجي

**Direction Générale de la Recherche Scientifique et du Développement
Technologique**

مديرية برمجة البحث والتقييم والاستشراف

Direction de la Programmation de la Recherche, de l'Evaluation et de la Prospective

BILAN TRIENNAL 2012-2013-2014

**DES ACTIVITES DE RECHERCHE SCIENTIFIQUE ET DU DEVELOPPEMENT TECHNOLOGIQUE – DES
LABORATOIRES DE RECHERCHE**

SESSION 2015

(Prière de transmettre 2 copies sur support papier + 2 CD à la S/D Evaluation et Analyse)

1. Identification du Laboratoire

مخبر الكيمياء الرقمي والبنىات النانوية			إسم المخبر
Intitulé du Laboratoire	Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructures		
Acronyme du labo	LCCN		
Faculté ou Institut	Faculté de Mathématiques et de l’informatique et des Sciences de la Matière		
Etablissement	Université 8 Mai 1945 Guelma		
Adresse électronique	Lccn@univ-guelma.dz		
Site web ou URL	http://www.univ-guelma.dz/recherche/labs/lccn/index.html		
Année d’Agrément :	14 Avril 2012	Tel : 05 55 21 52 91	Fax :
Localisation physique :	Ancien campus, BLOC L5 2 ^{ème} étage.		
Superficie Totale	40 m ²	Bureaux : 10 m ²	Ateliers : 00 m ²

2. Directeur du Laboratoire

Nom & Prénom	KHATMI Djameleddine		Grade: Prof
Fonction administrative	Université 8 Mai 1945 Guelma		
Adresse Electronique	Khatmi.djameleddine@gmail.com		
Home page	/		
Nomination : N° Arrêté	176	Date : 22 Mai 2012	
Nombre Equipes :	04	Nbre Chercheurs : 27	Nbre Personnel soutien : 01
Localisation physique :	Ancien campus, BLOC L5 2 ^{ème} étage.		

3. Présentation du Laboratoire

Description succincte :

Le laboratoire de chimie computationnelle est situé dans l'ancien campus de l'université 8 Mai 1945 de Guelma, au bloc L5 deuxième étage. Il est composé de deux salles et un bureau pour le secrétariat. Dans la première salle, de superficie 50 m², se trouvent les bureaux, du directeur du laboratoire et les chefs d'équipes, et également les stations de calculs ou sont réalisées toutes les expériences numériques. Ont été installés également les bureaux de quelques chercheurs. La deuxième salle est pour l'instant utilisée comme dépôt de fournitures et de matériel informatique en attendant l'installation des équipements électriques nécessaires. Enfin, une salle a été réservée au secrétariat, gérée par une secrétaire, et ont lieu dans cette salle toute la paperasse administrative du laboratoire.

Objectifs de recherche scientifique et de développement technologique :

Le laboratoire de chimie computationnelle et nanostructures est à vocation fondamentale et théorique. Parmi les objectifs les plus importants du laboratoire est la réalisation des expériences numériques de chimie au moyen de l'ordinateur et également visualiser les phénomènes chimiques quantiques. Plus précisément, nous visons en premier lieu, à maîtriser ces expériences numériques et comprendre les interactions qui ont lieu entre deux molécules organiques à l'échelle quantique et déterminer les forces motrices qui assurent leur stabilité. Puis l'extrapolation à un système plus complexe, formé d'une protéine et une molécule médicamenteuse, nous permettra vraisemblablement de proposer de nouvelles molécules médicamenteuses.

Thèmes mis en œuvre :

- Les complexes d'inclusion
- Le docking moléculaire et Le criblage virtuelle
- La dynamique moléculaire
- Les méthodes QSAR -2D et 3D

Mots-Clés :

Complexe inclusion, Mécanique quantique, DFT, cyclodextrine, docking, criblage virtuelle, dynamique moléculaire.

Objectifs atteints (recherche, formation, autres):

Beaucoup d'objectifs ont été atteints durant les trois dernières années. Nous avons pu faire soutenir plusieurs doctorats, publier de nombreuses publications et participé dans plusieurs conférences internationales et nationales. Nous avons dans sa globalité traité le système « complexe d'inclusion » et nous sommes en mesure de prédire toutes les interactions assurant leur stabilité, cette maîtrise sera exploitée prochainement dans l'étude des complexes formés par une protéine et une molécule médicamenteuse.

Objectifs restant à réaliser :

Parmi les objectifs non atteints dans cette période, c'est la non ouverture d'une formation master ou formation doctorale, dans la chimie computationnelle et cela pour des raisons purement administratives, à chaque fois le CSD nous donne des avis défavorables.

Difficultés rencontrées :

On a deux difficultés, la première, c'est le CSD qui nous refuse d'ouvrir une formation dans ce domaine et la deuxième, c'est l'équipement scientifique que nous n'avons pas encore reçu.

4. Présentation des Equipes¹

Equipe N° : 01

Titre de l'Equipe1	Modélisation des systèmes biologiques					
Acronyme éventuel :	M. S. B					
Home page Equipe	/					
Localisation physique :	Ancien campus, BLOC L5 2 ^{ème} étage.					
Nom - Chef d'équipe ¹	KHATMI Djameleddine					Grade : Prof
Liste exhaustive des membres de l'équipe par grade en commençant par les séniors						
Nom & Prénom	Sexe	Age	Dernier diplôme	Grade	Spécialité	Structure de rattachement
KHATMI Djameleddine	M	52	Doctorat d'état	Pro	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
LAFIFI Ismahan	F	27	Doctorat	M.C.B	Chimie	Université d'Annaba
BOUCHAMA Fateh	M	33	Magister	Doctorant	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
BOUZITOUNA Amel	F		Magister	Doctorante	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
MEZGHICHE Karima	F	31	Magister	Doctorante	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
ATTOUI Imène	F		Magister	Doctorante	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
BEZZINA Belgacem	M	30	Magister	Doctorant	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma

4. Présentation des Equipes²

Equipe N° : 02

Titre de l'Equipe2		Etude des Interactions Moléculaires				
Acronyme éventuel :		E. I. M				
Home page Equipe		/				
Localisation physique :		Ancien campus, BLOC L5 2 ^{ème} étage.				
Nom - Chef d'équipe ²		NOUAR Leila			Grade : Prof	
Liste exhaustive des membres de l'équipe par grade en commençant par les séniors						
Nom & Prénom	Sexe	Age	Dernier diplôme	Grade	Spécialité	Structure de rattachement
NOUAR Leila	F		Doctorat d'état	Pro	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
BOUHADIBA Abdelaziz	M	33	Doctorat	M.C.B	Chimie	Université de Skikda
HAIEHEM Sakina	F	30	Doctorat	M.C.B	Chimie	Université de Souk-Ahras
KELAIA Abdelatif	M	36	Doctorat	M.C.B	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
MERABET Noura	F	46	Magister	MAA	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
DJILANI Imen	F	27	Doctorat	M.C.B	Chimie	ENS Skikda
MEDDOUR Faiza	F	45	Magister	Doctorante	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
RAHIM Mouhamed	M	32	Magister	Doctorant	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
MOKHTARI AbdelAli	M		Magister	Doctorant	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
ELHASSASNA Souhir	F		Magister	Doctorante	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
MESSADIA Sabar	M		Magister	Doctorant	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
LAHCEN Abdelmalek	M		Magister	Doctorant	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma

¹ Dossier à remplir pour chaque équipe du laboratoire

² Dossier à remplir pour chaque équipe du laboratoire

4. Présentation des Equipes¹

Equipe N° : 03

Titre de l'Equipe3		Les complexes d'inclusions				
Acronyme éventuel :		C. I				
Home page Equipe		/				
Localisation physique :		Ancien campus, BLOC L5 2 ^{ème} étage.				
Nom - Chef d'équipe ³		MADI Fatiha			Grade : M.C.A	
Liste exhaustive des membres de l'équipe par grade en commençant par les séniors						
Nom & Prénom	Sexe	Age	Dernier diplôme	Grade	Spécialité	Structure de rattachement
MADI Fatiha	F	36	Habilitation Universitaire	M.C.A	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
LARGATE Leila	F	36	Magister	M.A.A	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
MALAM Nassima	F	41	Doctorat	M.CB	Chimie	Université d'Annaba
ATHMANI Ali	M		Magister	M.A.A	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma

4. Présentation des Equipes²

Equipe N° : 04

Titre de l'Equipe 4	Les Neurotransmetteurs					
Acronyme éventuel :	N.T					
Home page Equipe						
Localisation physique :	Ancien campus, BLOC L5 2 ^{ème} étage.					
Nom - Chef d'équipe ⁴	DJEMIL Rayenne				Grade : M.C.B	
Liste exhaustive des membres de l'équipe par grade en commençant par les séniors						
Nom & Prénom	Sexe	Age	Dernier diplôme	Grade	Spécialité	Structure de rattachement
DJEMIL Rayenne	F	39	Doctorat	M.C.B	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
ALAMA Fouzia	F	40	Magister	M.A.A	Chimie	Université Oum El Bouaghi
LACHI Nadia	F	42	Magister	M.A.A	Chimie	Université 8 mai 1945 Guelma
HADJER Sameh	F	34	Magister	M.A.B	Chimie	Université Tébessa

4.1. Expérience et compétences des Equipes du laboratoire

VISIBILITE³

a) Publications Internationales (1 par ligne en donnant obligatoirement le lien vers la revue l'URL)	
1	MADI Fatiha, LARGATE Leila, NOUAR Leila and KHATMI Djameleddine. "Theoretical study of the inclusion processes of ethyl p-hydroxybenzoate with β -cyclodextrin: PM3MM and ONIOM2 calculations". <i>Journal of the Taiwan institute of chemical engineers</i> 43 (2012) 868-872. URL: http://www.elsevier.com/locate/jtice
2	MAX Ratier, Djameleddine KHATMI, J.Georges Duboudin, DAO The Mina. "Thermal Decompositions of Organotin Sulfamates: A One Pot Synthesis of Vinyltributyltin Compounds". <i>Journal for Rapide Communication of Synthetic Organic Chemistry</i> . 19 (2012) 285-291. URL: http://dx.doi.org/10.1080/00397918908050980

¹ Dossier à remplir pour chaque équipe du laboratoire

² Dossier à remplir pour chaque équipe du laboratoire

³ Bien respecter les normes en mentionnant la webographie associée pour les publications, communications, chapitres d'ouvrage et brevet. Sinon se référer à l'exemple suivant :
Auteur1, Auteur2, "Titre de la publications ", In donner l'intitulé exacte de la revue , Numéro de volume Vol 41, Numéro de la revue, pages 11,18, Editor, ISSN:1870-4069, 2009

Donner le lien internet pour la revue ou l'abstract : [A. Gelbukh \(Ed.\) Advances in Computational Linguistics. Research ... Multi-category Support Vector Machines ... www.cicling.org/2009/RCS-41/217-226.pdf](http://www.cicling.org/2009/RCS-41/217-226.pdf)

3	HAIHAEM Sakina, BOUHDIBA Abdelaziz, NOUAR Leila, DJILANI Imen, MADI Fatiha and KHATMI Djameleddine. "Molecular docking study on β -cyclodextrin interactions of metobromuron and [3-(p-bromophenyl)-1-methoxy-1-methylurea]". <i>Journal of inclusion phenomenon and macrocyclic chemistry</i> , 74 (2012) 191-200. URL : http://www.springer.com/chemistry/organic+chemistry/journal/10847
4	Soraya BENGHODBANE and Djameleddine KHATMI. "A theoretical study on the inclusion complexation of doxycycline with Crysmeb ". <i>Comptes Rendus Chimie</i> ,15 (2012) 371-377. URL : http://www.sciencedirect.com
5	Samah HADJAR and Djameleddine KHATMI. "Electronic structure and H-bond interactions in β - cyclodextrin / piroxicam complex ". <i>Journal of computational and theoretical Nanoscience</i> , 9(2012) 2101-2106. URL : http://www.aspbs.com/ctn/
6	Rayenne DJEMIL and Djameleddine KHATMI. "Quantum Mechanical Study of Complexation of Dopamine and Epinephrine with β -Cyclodextrin Using PM6, ONIOM and NBO Analysis". <i>Journal of computational and theoretical Nanoscience</i> , 9(2012) 1571-1576. URL: http://www.aspbs.com/ctn/
7	Nassima MALLEM, Djameleddine KHATMI, Salaheddine AZZOUZ, Soraya BENGHODBANE and Ouassila ATTOUI YAHIA. "Computational Studies of 1:2 Complex Between Retinol Propionate and β Cyclodextrin". <i>Journal of inclusion phenomenon and macrocyclic chemistry</i> , 73(2012) 305-312. URL: http://www.springer.com/chemistry/organic+chemistry/journal/10847
8	Sakina HIAHEM, Leila NOUAR, Imen DJILANI, Abdelaziz BOUHDIBA, Fatiha MADI and Djameleddine KHATMI. "Host-Guest complex between β -cyclodextrin and paeonol: a theoretical approach". <i>Comptes Rendus Chimie</i> , 16 (2013) 372-379. URL: http://www.sciencedirect.com
9	BOUHDIBA Abdelaziz, NOUAR Leila, HAIHAEM Sakina, DJILANI Imen, MADI Fatiha and KHATMI Djameleddine. "Theoretical Investigation Study Based on PM3MM and ONIOM2 Calculations of β - Cyclodextrin Complexes with Diphenylamine". <i>Journal of inclusion phenomenon and macrocyclic chemistry</i> , 77 (2013) 455-462. URL : http://www.springer.com/chemistry/organic+chemistry/journal/10847
10	DJILANI Imen, NOUAR Leila, MADI fatiha, HAIHAEM Sakina, BOUHDIBA Abdelaziz and KHATMI Djameleddine. "Inclusion complexes of ortho-anisidine and β -cyclodextrin: a quantum mechanical calculation". <i>Comptes Rendus Chimie</i> , 16(2013) 696-703. URL: http://www.sciencedirect.com
11	MADI Fatiha, LARGATE Leila, NOUAR Leila and KHATMI Djameleddine . "Computational study on the encapsulation of ethylparaben into β -cyclodextrin". <i>Journal of inclusion phenomenon and macrocyclic chemistry</i> , 76 (2013) 379-384. URL: http://www.springer.com/chemistry/organic+chemistry/journal/10847
12	Soraya BENGHODBANE and Djameleddine KHATMI. "Quantum Chemical Calculations Based on ONIOM and the DFT Methods in the Inclusion Complex: Doxycycline/2-O-Me- β -cyclodextrin". <i>Journal of inclusion phenomenon and macrocyclic chemistry</i> , 77(2013) 231-240. URL: http://www.springer.com/chemistry/organic+chemistry/journal/10847
13	MADI Fatiha, LARGATE Leila, KHATMI Djameleddine and NOUAR Leila. "Computational Investigation of enol/ketol chloramphenicol with β -cyclodextrin ". <i>Journal of inclusion phenomenon and macrocyclic chemistry</i> , 77(2013) 421-427. URL: http://www.springer.com/chemistry/organic+chemistry/journal/10847
14	I. LAFIFI and D. KHATMI. "Chapter 13-Theoretical Investigation of the Intramolecular H-Bonding on Tautomerism" <i>Quantum Chemistry</i> , 68 (2014), no. 257-268, URL: http://www.elsevier.com/locate/permissionusematerial
15	I. DJILANI, L. NOUAR, F. MADI, S. HAIHAEM, A. BOUHADIBA, and D. KHATMI. "Chapter 15- Molecular Modeling Study of Neutral and Cationic Species of Ortho-Anisidine by β - Cyclodextrin". <i>Quantum Chemistry</i> , 68 (2014) 279-291. URL: http://www.elsevier.com/locate/permissionusematerial
16	M. RAHIM, F. MADI, L. NOUAR, S. HAIHAEM, D. FATEH and D. KHATMI. "Chapter 14- β - Cyclodextrin Interaction with Edaravone Molecular Modeling Study". <i>Quantum Chemistry</i> , 68 (2014) 269-278. URL : http://www.elsevier.com/locate/permissionusematerial

17	Mouhamed RAHIM, Fatiha MADI, Leila NOUA R, Abdelazize BOUHDIBA, Sakina HAIHAEM, Djemeleddine KHATMI, Youghourta BELHOCINE. "Driving Forces and Electronic Structure in β-Cyclodextrin/3,3'-Diaminodiphenylsulphone Complex". <i>Journal of Molecular Liquids</i>, 199 (2014) 501-510. URL : http://www.elsevier.com/locate/molliq
18	LACHI Nadia, KHATMI Djameleddine and DJÉMIL Rayenne. "Theoretical Study of Inclusion Processes of Octopamine with β- Cyclodextrin : PM6, ONIOM, and NBO analysis ". <i>Comptes Rendus Chimie</i>, 17(2014) 1169 - 1175. URL : http://www.sciencedirect.com
19	LARGATE Leila, MADI Fatiha, KHATMI Djameleddine and NOUAR Leila. "Investigation of the Inclusion Processes of N-Acetyl-4-Aminophenol with Me- β- Cyclodextrin; A Computational Study". <i>Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers</i>, 45 (2014), Pages. 387-392. URL : http://www.elsevier.com/locate/jtice
20	A. Antony Muthu Prabhu, G.S. Suresh Kumar, Madi Fatiha, S. Sorimuthu, M. Sundar Roj. "Encapsulation of Phenylalanine and 3,4- Dihydroxyphenylalanine into β- Cyclodextrin: Spectral and Molecular Modeling Studies ". <i>Journal of Molecular Structure</i>. xxx (2014) xxx-xxx. URL : http:// www. elsevier.com/locate/molstruc

c) Communications Internationales des équipes (1 par ligne en donnant le lien vers l'URL de la conf.)	
1	<u>KHATMI Djameleddine</u> , "Molecular Electronic Structure at TROY, MEST- 2012 ", September 9-13, 2012 , Çanakkale, Turkey .
2	<u>KHATMI Djameleddine</u> , "Molecular Electronic Structure, MES- 2014 ", September 01-05, 2014 , Amasya, Turkey .
3	<u>NOUAR Leila</u> , "Molecular Electronic Structure at TROY, MEST- 2012 ", September 9-13, 2012 , Çanakkale, Turkey .
4	<u>NOUAR Leila</u> , "Molecular Electronic Structure, MES- 2014 ", September 01-05, 2014 , Amasya, Turkey .
5	<u>MADI Fatiha</u> , "5th Congress of European Association for Chemical and Molecular Sciences", 31th August- 4th September 2014 , Istanbul, Turkey .
6	<u>MADI Fatiha</u> , "Molecular Electronic Structure, MES- 2014 ", September 01-05, 2014 , Amasya, Turkey .
7	<u>DJEMIL Rayenne</u> , "Molecular Electronic Structure at TROY, MEST- 2012 ", September 9-13, 2012 , Çanakkale, Turkey .
8	<u>DJEMIL Rayenne</u> , "Molecular Electronic Structure, MES- 2014 ", September 01-05, 2014 , Amasya, Turkey .
9	<u>LAFIFI Ismahan</u> , "Molecular Electronic Structure at TROY, MEST- 2012 ", September 9-13, 2012 , Çanakkale, Turkey .
10	<u>LAFIFI Ismahan</u> , "Theoretical Investigation of Intramolecular H-Bonding on Tautomerism ", 3rd International Symposium of Theoretical Chemistry ISTC -2012 , October 14-17, 2012 , USTHB, Algeria .
11	<u>LAFIFI Ismahan</u> , "Theoretical Studies on Histamine Tautomerism", Humboldt-Kolleg/International Conference Theory and Computation in Sciences and Bio-Sciences TCSBS'14 , November 16-18, 2014 , Tlemcen, Algeria .
12	<u>DJILANI Imene</u> , "Molecular Electronic Structure at TROY, MEST- 2012 ", September 9-13, 2012 , Çanakkale, Turkey .
13	<u>DJILANI Imene</u> , "Computational Study on the Encapsulation of Neutral and Cationic Ortho-Anisidine Into β -Cyclodextrin ", 3rd International Symposium of Theoretical Chemistry ISTC -2012 , October 14-17, 2012 , USTHB, Algeria .
14	<u>DJILANI Imene</u> , "Theoretical Study of Complex Ortho-Anisidine with β - Cyclodextrin ", Humboldt -Kolleg 'Nanoscale Science and Technology NS &T' -2012 , March 17-19, 2012 , Tunisia .
15	<u>DJILANI Imene</u> , "Quantum Mechanical Study of Complexation of -Lipoicacid with β - Cyclodextrin ", Conférence Franco-maghrébine sur les Nanomatériaux, 2 au 5 Mai 2013 , Sousse- Tunisie .
16	<u>A.BOUHADIBA</u> , "Theoretical Study of β - Cyclodextrin with dimethylamino-4- benzal para-nitroaniline ", Humboldt -Kolleg 'Nanoscale Science and Technology NS &T' -2012 , March 17-19, 2012 , Tunisia .

d) Communications nationales (1 par ligne en donnant le lien vers l'URL.)	
1	<u>KHATMI Djameleddine</u> , "Mécanique Moléculaire ou Mécanique Quantique pour les Complexes D'inclusion", Deuxièmes Journées Nationales de Chimie, 9,10 et 11 Avril 2013 , Annaba, Algérie .
2	<u>KHATMI Djameleddine</u> , "1 ^{er} Séminaire National sur la Chimie Verte et L'environnement Industriel", 06 et 07 Mai 2014 , Souk-Ahras, Algérie .
3	<u>KHATMI Djameleddine</u> , "1 ^{er} Séminaire National des Sciences d'interface Chimie -Biologie 1^{er} SNSIC-B' , 22 et 23 Octobre 2014 , Souk-Ahras, Algérie .
4	<u>MADI Fatiha</u> , "Theoretical Study of the inclusion processes of p-hydroxybenzoate with β - Cyclodextrin: PM3MM and ONIOM2 Calculations", Dix-Septièmes Journées Nationales de Chimie, 17 au 19 Décembre 2012 , Tunisie .
5	<u>LAFIFI Ismahan</u> , "Etude Théorique de la Tautomérie de L'histamine", Mini Workshop National de Chimie

	Computationnelle, 08 et 09 Décembre 2014 , Université 8 Mai 1945 - Guelma- Algérie .
6	DJILANI Imene , " A Theoretical Investigation to Characterize Inclusion Complex of α Lipoic acid and β -Cyclodextrin", 1 ^{er} Séminaire National sur la Chimie Verte et L'environnement Industriel, (1 ^{er} SNCVEI), 06 et 07 Mai 2014 , Souk-Ahras, Algérie .
7	DJILANI Imene , " Etude Théorique du Complexe D'inclusion du Naproxene avec la β - Cyclodextrine", Deuxième Journées Scientifiques Nationales, (JSN 02), 01 et 02 Décembre 2014 , Skikda, Algérie .
8	DJILANI Imene , "Etude Théorique des Complexes d'inclusion de 3-Amino-5-Metyl pyrazole avec β -Cyclodextrine ", Mini Workshop National de Chimie Computationnelle, 08 et 09 Décembre 2014 , Université 8 Mai 1945 - Guelma- Algérie .
9	DJILANI Imene , " Etude Théorique du Complexe D'inclusion du Naproxene avec la β - Cyclodextrine", 1 ^{er} Journée National Simulation et Nanomatériaux, (1 ^{er} JNSN) , 17 Décembre 2014 , Université 8 Mai 1945 - Guelma- Algérie .
10	BOUHADIBA Abdelaziz , "Etude par Modélisation Moléculaire du Complexe D'inclusion Acriflavine dans alpha et beta Cyclodextrines ", Mini Workshop National de Chimie Computationnelle, 08 et 09 Décembre 2014 , Université 8 Mai 1945 - Guelma- Algérie .
11	BOUCHAMA Fateh , "Utilisation des descripteurs Moléculaire et GA-MLR pour L'estimation de la Température D'ébullition des Alcools", Mini Workshop National de Chimie Computationnelle, 08 et 09 Décembre 2014 , Université 8 Mai 1945 - Guelma- Algérie .
12	BEZZINZ Belgacem , "Stabilité de L'ibuprofen avec la β - Cyclodextrine (β -CD) dans vide", Mini Workshop National de Chimie Computationnelle, 08 et 09 Décembre 2014 , Université 8 Mai 1945 - Guelma- Algérie .
13	MEDDOUR Faiza , "Quelque méthodes de désinfections prometteuses pour l'élimination des biomasses adhérees ", Journée Scientifique sur l'environnement, 26 Novembre 2013 , Université 8 Mai 1945 - Guelma- Algérie .
14	MEDDOUR Faiza , "Influence de certains paramètres sur l'adhésion d'e.coli K12 ", Journée Scientifique sur l'environnement, 26 Novembre 2013 , Université 8 Mai 1945 - Guelma- Algérie .

e) Ouvrages¹ ou participation à la rédaction d'un ouvrage

f) Brevets²

g) Expérience dans les projets et programmes de recherche

Intitulé du Programme (CNEPRU, AUF, CRDI, UE..)	Année	Organisme
Modèle moléculaire de complexes d'inclusion de molécules neurotransmetteurs et la b β ta cyclodextrine. Projet CNEPRU , Code N° E01520080026	2012	/
Etude de l'inclusion des molécules biologiquement actives dans la cyclodextrine. Projet CNEPRU , Code N° 01520100004	2014	/

¹ Auteur(s), Titre de l'Ouvrage, Editeur, ISSN, Nombre de pages, Année - S'il s'agit d'un chapitre dans un ouvrage, donner Numéro chapitre + nombre de page

² Auteur(s), Intitulé du brevet, Institution d'enregistrement, Année, Mot-clé, URL

h) Dissémination : Avez-vous organisé pour le grand public (enfants et adultes) :	Oui	Non
a. Séminaires	X	
b. Visites scientifiques		X
c. Vulgarisations scientifiques		X
d. Caravanes scientifiques		X

4.2. Formation liée aux thèmes de recherche du laboratoire

a) Mémoires de master soutenus

Num : 1	Nom & Prénom de l'étudiant	ABADLIA Nadia
	Date et lieu de soutenance	Juin 2012
	Rapporteur	Etude Théorique du Complexe D'inclusion Kétoprofène/ β - Cyclodextrine au moyen de la méthode PM3 et PM6
	Intitulé du titre du master	LACHI Nadia
	URL résumé ou version pdf	www.univ-guelma.dz
Num : 2	Nom & Prénom de l'étudiant	BERREDAI Souad, AIDA Sara
	Date et lieu de soutenance	Juin 2013
	Rapporteur	DJEMIL Rayenne et LACHI Nadia
	Intitulé du titre du master	Etude Théorique de quelques Réactions Chimiques
	URL résumé ou version pdf	www.univ-guelma.dz

b) Thèse de Doctorat

Num : 1	Nom & Prénom du doctorant	DJEMIL Rayenne
	Date et lieu de soutenance	26 Septembre 2012, Université Badji Mokhtar Annaba
	Rapporteur	KHATMI Djameleddine
	Intitulé du titre du doctorat	<i>Etude par modélisation moléculaire des complexes d'inclusion des neurotransmetteurs par cyclodéxtrine</i>
	URL résumé ou version pdf	
Num : 2	Nom & Prénom du doctorant	MALLEM Nassima
	Date et lieu de soutenance	11 Octobre 2012, Université 8 Mai 1945 Guelma
	Rapporteur	KHATMI Djameleddine
	Intitulé du titre du doctorat	<i>Simulations de dynamique moléculaire de complexes récepteurs substrat : complexe d'inclusion dans la bétacyclodéxtrine</i>
	URL résumé ou version pdf	
Num : 3	Nom & Prénom du doctorant	HAIAHEM Sakina
	Date et lieu de soutenance	12/05/2013, Université 8 Mai 1945 Guelma
	Rapporteur	NOUAR Leila
	Intitulé du titre du doctorat	<i>Etude Computationnelle des Complexes d'inclusion de Métobromuron, Paeonol avec la β-Cyclodextrine</i>
	URL résumé ou version pdf	

Num : 4	Nom & Prénom du doctorant	HADJAR Samah
	Date et lieu de soutenance	2013, Université 8 Mai 1945 Guelma
	Rapporteur	KHATMI Djameleddine
	Intitulé du titre du doctorat	<i>Etude par Modélisation Moléculaire des Complexes d'inclusion d'une Molécule Bioactive (Piroxicam) par Cyclodextrine.</i>
	URL résumé ou version pdf	

Num : 5	Nom & Prénom du doctorant	BOUHADIBA Abdelaziz
	Date et lieu de soutenance	2014, Université 8 Mai 1945 Guelma
	Rapporteur	NOUAR Leila
	Intitulé du titre du doctorat	<i>Etude par Investigation Théorique Basée sur les Calculs PM3MM et ONIOM2 des Complexes de la β-Cyclodextrine avec la Diphénylamine</i>
	URL résumé ou version pdf	

Num : 6	Nom & Prénom du doctorant	DJILANI Imen
	Date et lieu de soutenance	2014, Université 8 Mai 1945 Guelma
	Rapporteur	NOUAR Leila
	Intitulé du titre du doctorat	<i>Etude Théorique du Complexe d'inclusion «Ortho-Anisidine/beta Cyclodextrine» par les Méthodes Quantiques.</i>
	URL résumé ou version pdf	

Num : 7	Nom & Prénom du doctorant	LAFIFI Ismahan
	Date et lieu de soutenance	22/06/2014, Université 8 Mai 1945 Guelma
	Rapporteur	KHATMI Djameleddine
	Intitulé du titre du doctorat	<i>La Réaction de Tautomérisation : Aspect Théorique</i>
	URL résumé ou version pdf	

d) Thèse d'Habilitation		
Num : 1	Nom & Prénom du candidat	MADI Fatiha
	Date et lieu de soutenance	30 Avril 2013, Université 8 Mai 1945 Guelma
	Titre de l'habilitation	-
	URL résumé ou version pdf	

4.3. Autres valorisations des activités de recherche

Prestations de services	
a. Nature de l'activité	-
b. Bénéficiaire	-
c. Montants en 10³ DA	-
Autres activités	
d.	-
e.	-
Manifestations Scientifiques	
f. Séminaires	-
g. Colloques	
h. Conférences Nationales	Mini Workshop National de chimie computationnelle, du 15et 16 Décembre 2013, Université 8 Mai 1945 Guelma .
	Workshop National de chimie computationnelle, du 8 et 9 Décembre 2014, Université 8 Mai 1945 Guelma .
i. Conférences Internat.	

Logiciels	
j. Scientifiques	-
k. de Gestion	-

5. Equipements Scientifiques acquis

5.1) Description des gros équipements scientifiques disponibles en état de marche

—

5.2) Description des équipements scientifiques nouvellement acquis et sous garantie

N°	Désignation	Coût
01	-	-

5.3) Etat de consommation du budget de fonctionnement par chapitre

Chapitre et intitulé	Consommé	Solde
34.01 Remboursement de frais	769 832,83	724 607,64
34.02 Matériels et mobilier	3 547 633,05	455 452,35
34.03 Fournitures	340 598,30	59 406,48
34.04 Charges annexes	0,00	0,00
34.91 Parc automobile	0,00	0,00
Total :	4 658 064,18	1 239 466,47
% de consommation =79%		

Commentaire libre sur le formulaire / Remarques & Suggestions

