

COMPUTATIONAL STUDY OF LANTHANIDE (III) COMPLEXES BASED ON CUR/SCUR

BAIRA Kaouther¹, HANNACHI Douniazed²

¹ : *Laboratoire Chimie des Matériaux et des Vivants: Activité, Réactivité, Université El-Hadj Lakhdar, Batna, Algérie.*

baira_kaouther@yahoo.fr

² : *Département de Chimie, Faculté des Science, Université de Setif-1, El Bez, Setif 19000, Algerie*

h_douniazed@yahoo.fr

Curcumin (cur) forms the majority of the naturally occurring yellow pigments in the Indian spice turmeric.[1] It has been shown that curcumin exhibits anticancer,[2] anti-Alzheimer's,[3] anti-cystic fibrosis,[4] and other medicinal effects,[5–7] and consequently there is an intense research focus on curcumin due to its apparent targeted medicinal effects. The (scur) is the monoanionic diglucosyl curcumin.

In 2013 Hussain et al. synthesized [Ln(R-tpy)(cur)(NO₃)₂] and [Ln(R-tpy)(scur)-(NO₃)₂] complexes (where Ln= La and Gd),[8]. This compounds in aqueous-DMF showed an absorption band near 430 nm and an emission band near 515 nm and the complexes are remarkably photocytotoxic in HeLa cells in visible light ($\lambda = 400\text{--}700$ nm) and are non-toxic in the dark.

In this communication we present theoretical results obtained using the Gaussian09D and functional/ base: B3LYP, CAM-B3LYP, GD3-B3LYP, GD3BJ-B3LYP, TPSSH,GD3-PBE1, GD3BJ-PBE1, LCWPBE/ LanL2DZ. In particular we have studied the structure, stability, reactivity indices, electronic and optic properties of [Ln(tpy)(cur)(NO₃)₂] and [Ln(tpy)(scur)(NO₃)₂] where Ln = La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Er, Tm, Yb and Lu.

Références

- [1] P. Anand, S. G. Thomas, A. B. Kunnumakkara, C. Sundaram, K. B. Harikumar, B. Sung, S. T. Tharakan, K. Misra, I. K. Priyadarsini, K. N. Rajasekharan and B. B. Aggarwal, *Biochem. Pharmacol.*, 2008, 76, 1590.
- [2] B. B. Aggarwal, A. Kumar and A. C. Bharti, *Anticancer Res.*, 2003, 23, 363.
- [3] F. Yang, G. P. Lim, A. N. Begum, O. J. Ubeda, M. R. Simmons, S. S. Ambegaokar, P. P. Chen, R. Kayed, C. G. Glabe, S. A. Frautschy and G. M. Cole, *J. Biol. Chem.*, 2005, 280, 5892.
- [4] M. E. Egan, M. Pearson, S. A. Weiner, V. Rajendran, D. Rubin, J. Glockner-Pagel, S. Canny, K. Du, G. L. Lukacs and M. J. Caplan, *Science*, 2004, 304, 600.
- [5] R. C. Lantz, G. J. Chen, A. M. Solyom, S. D. Jolad and B. N. Timmermann, *Phytomedicine*, 2005, 12, 445.
- [6] A. J. Ruby, G. Kuttan, K. D. Babu, K. N. Rajasekharan and R. Kuttan, *Cancer Lett. (Shannon, Ire.)*, 1995, 94, 79.
- [7] D. Gopinath, M. R. Ahmed, K. Gomathi, K. Chitra, P. K. Sehgal and R. Jayakumar, *Biomaterials*, 2004, 25, 1911.
- [8] Akhtar Hussain, Kumar Somyajit, Bhabatosh Banik, Samya Banerjee, Ganesh Nagaraju and Akhil R. Chakravarty, 2013, 42, 182

Effect of inter-ring haptotropic rearrangements on reactivity and biological activity in fluorenyl complexes: A DFT study

Laib Souhila, Ouddai Nadia

Laboratoire de chimie des matériaux et des vivants : Activité, Réactivité, Université Hadj

Lakhdar, BATNA 05000, ALGERIA

laibsouhilals@yahoo.fr

ouddai_nadia@yahoo.fr

Abstract :

Inter-ring $[1]\eta^6 \rightleftharpoons \eta^5$ haptotropic rearrangements π - π in fluorenyl complexes are carried out using density functional theory DFT [2-4] at PBE/TZP level. The calculated activation barriers in $\eta^6 \rightleftharpoons \eta^5$ of $(C_{13}H_9)ML$, (M=Mn, Cr and Fe), (L=(CO)₃ and (η^5 -C₅H₅)) are (27.731, 63.922 and 63.708 Kcal.mol⁻¹ respectively). Thermodynamic parameters of these compounds have been analyzed. For all fluorenyl complexes of Mn, Cr and Fe, the calculated of the redox potentials predict that the iron complex has strong biological activity.

Key words: 'Density functional theory DFT'; 'Fluorenyl complexes'; 'Redox potentials'; 'Biological activity'.

References:

1. Yu. F. Oprunenko, Russ. Chem. Rev., 69, 683, **2000**; T. A. Albright, P. Hofmann, R. Hoffmann, C. P. Lillya, P. A. Dobosh, J. Am. Chem. Soc., 105, 3396, **1983**.
2. L. H. Thomas, Proc. Cambridge Phil. Soc.; 23, 713, **1927**.
3. E. Fermi, AttidellaAccademia Nazionale dei Lincei, Classe di ScienzeFisiche, Matematiche e Naturali, Rendiconti; 6, 602, **1927**.
4. P. A. M. Dirac, Proc. Cambridge Philos. Soc., 26, 376, **1930**.

RAFT Reaction of Thionoesters Compounds: Theoretical Interpretation

Douniazed Hannachi^{a,b}, Nadia Ouddai^b, Michel Arotçaréna^c, Henry Chermette^d

^a Département de Chimie, Faculté des Science, Université de Setif-1, El Bez, Setif 19000, Algerie,
h_douniazed@yahoo.fr

^b Laboratoire Chimie des Matériaux et des Vivants: Activité, Réactivité, Université El-Hadj Lakhdar, Batna, Algerie

^c Université de Lyon, Université Lyon 1(UCBL) et UMR CNRS 5223, Ingénierie des Matériaux Polymères, F-69622 Villeurbanne Cedex, France

^d Université de Lyon, Université Lyon 1 et CNRS UMR 5280, Institut des Sciences Analytiques, 43 bd du 11 novembre 1918, 69622 Villeurbanne Cedex, France

Résumé:

Reversible addition–fragmentation chain transfer polymerization (RAFT) has been carried out using both experimental results and theoretical calculations. We have performed density functional theory calculations at the PBE/TZP level to analyze the RAFT mechanisms corresponding to these compounds. Global and local reactivity indices have been calculated to investigate the effect of the addition of methyl, cyanomethyl and styryl radicals on the double bond C=S of thionoester compounds producing an adduct radical. This mechanism is shown to be difficult when the cyanomethyl is used contrarily to the methyl and styryl radicals, in agreement with experimental results. The activation barrier of fragmentation of adduct radicals does not correlate well with the length of fragmented bond (O-C α). The bond topological analysis of radical adduct predicts that the distance between the oxygen and a critical point (O-CP) in the fragment bond is a good parameter to estimate the activation energy of the fragmentation mechanism. It is shown that the nature of the free radicals is more selective than that of the thionoester compounds. With an overall large agreement with experiments, these theoretical results afford an explanation of the efficiency for RAFT mechanism.

Références:

1. N. Latelli, N. Ouddai, M. Arotçaréna, P. Chaumont, P. Mignon, H. Chermette, *Comp. Theor. Chem.* **2014**, 1027, 39- 45.

COMPUTATIONAL STUDY OF LANTHANIDE (Ln) AND ACTINIDE (An) TRIFLATE COMPLEXES

Lemmouchi Meriem¹; Ouddai Nadia¹

¹ Laboratoire Chimie des matériaux et des vivants: Activité, Réactivité ; Université Hadj Lakhdar Batna- Algérie.

Lem_meriem1@yahoo.fr .

ouddai_nadia@yahoo.fr

Abstract:

The importance of lanthanide and actinide triflates complexes lays in the fact that the trivalent lanthanide (Ln) and actinide (An) ions exhibit strong analogies in their chemical properties and their differentiation, is highly desirable and potentially useful in various areas ^{1, 2} as Lewis acid catalysts in a variety of organic reactions, as well as precursors in inorganic and organometallic synthesis³. Generally, the actinide-based compounds are of great current interest not only for their relevance in the nuclear industry and the associated environmental concerns but also for their rich structural chemistry and attractive magnetic and electrochemical properties, which could lead to the development of new functional materials⁴. According to the recent available data; several triflate actinide compounds have been reported ⁵⁻⁸.

Theoretical studies on the lanthanide and actinide triflate complexes $M(OTf)_n$ where (M= La, Ce, Gd, Yb, Lu, Th, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk and No); $n=(3 \text{ and } 4)$, are carried out using functional density theory (DFT). The Study of $An(OTf)_3$ complexes showed that the three OTf groups are bidentate, forming a sphere of coordination equals to six and generates a trigonal prism (TP). Two limiting structures TP are observed; the most distorted is the thorium triflate $Th(OTf)_3$ and the ideal one is $U(OTf)_3$. The highest population contribution of 5d orbital compared to 5f orbital in Th-O bond of $Th(OTf)_3$ explains the distortion of this latter.

References:

1. C. Piguet, J. C. G. Bünzli, Chem. Soc. Rev. 28 (1999) 347.
2. K. A. Gschneidner, Jr. L. Eyring, G. R. Choppin, G. H. Lander, Elsevier Science. Amsterdam. 18 (1994).
3. G. A. Lawrance, Chem. Rev. 17 (1986) 86.
4. Angew. Chem. Int. Ed. 46 (2007) 7574–7578.
5. E. N. Rizkalla, G. R. K. A. Gschneidner, Jr. L. Eyring, G. R. Choppin, G. H. Lander. Elsevier Science. Amsterdam. (1994) 529–558.
6. S.A. Cotton, lanthanide and actinide chemistry- inorganic chemistry. (2006) 193.
7. K. Lyczko, al. Inorganic Chemistry Communications. 24 (2012) 234–236.
8. Eur. J. Inorg. Chem. (1999) 2005-2007.

MODELE QSPR DU COEFFICIENT DE PARTAGE Koc D'UN ENSEMBLE HETEROGENE DE POLLUANTS ORGANIQUES: APPROCHE HYBRIDE ALGORITHMES GENETIQUES/REGRESSION LINEAIRE MULTIPLE

Mabrouka.DIDI, HADDAG Hamza , D.MESSADI*

**Laboratoire de Sécurité Environnementale et Alimentaire*

Faculté des sciences -Université Badji Mokhtar –Annaba-B.P12, Annaba Algérie.

didi_sorayam@yahoo.fr

haddaghamza@yahoo.fr

Résumé:

Un sol pollué est un site présentant un risque ou des nuisances pérennes pour la santé de l'homme, les ressources biologiques, et les écosystèmes présents sur ce site. Les dépôts de substances polluantes, les pratiques sommaires d'élimination des déchets, les infiltrations, l'utilisation de pesticides, d'engrais chimiques pour la culture du sol, l'épandage de produits chimiques, les retombées dues à des rejets atmosphériques sont à l'origine de ces pollutions. L'impact des sols pollués concerne principalement les eaux souterraines et nappes phréatiques. La contamination des eaux souterraines est très difficile car l'eau ne peut plus être traitée ou netoyée et devient inutilisable [1].

Le coefficient de partage n-octanol / eau d'un composé organique Koc est le rapport entre la concentration à l'équilibre d'une substance chimique dans l'octanol et la concentration en cette même substance dans l'eau. Ce coefficient est utilisé pour estimer, de façon indirecte, la sorption d'une substance organique dans un sol ou le facteur de bioconcentration [2].

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la prédiction d'une caractéristique environnementale importante d'un ensemble hétérogène de différentes familles chimiques (HAPs, pesticides, composés aromatiques et aliphatiques)[3] en utilisant les relations quantitatives structure / propriété (QSPR).

Nous avons utilisé des descripteurs moléculaires calculés à l'aide des logiciels de commerce afin d'établir des équations mathématiques pour la prédiction du Koc.

Les 133 composés traités ont été séparés en deux sous-ensembles disjoints de 106 éléments pour le calcul du modèle, et 27 éléments pour sa validation statistique externe.

Mots clés : Koc – Pesticides -pollution - Régression linéaire multiple - Approche hybride Algorithme génétique (AG)/Régression linéaire multiple.

Références:

[1]: <http://www.vedura.fr/environnement/sol/pollutions-sols>

[2]: www.dictionnaire-environnement.com

[3]: Subhash C . BASAK *and Denise Mills.Arkivoc.2005(ii)60-70

Les complexes d'inclusion

BENDIF Besma, Khatmi Djameleddine

Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructures

Université 8 mai 1945 GUELMA

Besma.bendif@gmail.com

Résumé:

De nos jours, les techniques de modélisation moléculaire ont connu un essor remarquable grâce aux progrès de l'informatique; permettent maintenant d'aborder de façon quantitative tout les domaines de la chimie (molécules isolées , protéines ,complexes, pharmacologie.....).ce progrès entraîne un développement continu des modèles et des méthodes de calcul permettant de traiter des phénomènes chimiques (complexes ou simples) de plus en plus réalistes par le biais de la simulation numérique qui permet la reproduction et la compréhension, la prédiction des différents phénomènes physiques et chimiques complexes.

Nous nous sommes intéressés à la chimie supramoléculaire avec des associations de deux ou plusieurs espèces chimiques, complexes et des liaisons intermoléculaires, dont les molécules sont capables de former des complexes moléculaires . Dans notre cas, on traite les complexes d'inclusion.

On étudiera tout les phénomènes du processus d'inclusion et toutes ces interactions impliquées par les différentes méthodes de la mécanique moléculaire et de la mécanique quantique .

Références:

1-*Steed J. W., Atwood J. L., Supramolecular chemistry, 2000, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, England*

2-*Schneider H. J., Yatsimirsky A., Principles and Methods in Supramolecular Chemistry, 2000, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, England.*

Mots clés: Modélisation moléculaire – complexes d'inclusion - cyclodextrines

Etude théorique des complexes d'inclusion dopamine : β -cyclodextrine

Cheriet mouna, Djemil Rayenne et Khatmi Djameleddine

Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructures

Université 8 mai 1945 GUELMA

mouna.cheriet@gmail.com

Résumé:

Le processus d'inclusion de la dopamine à l'intérieur de la β -cyclodextrine a été étudié par les méthodes PM6, Hartree-Fock et ONIOM. La structure la plus stable a été obtenue à la position et l'angle optimal. L'orientation dans laquelle le noyau catéchol de la dopamine pénètre dans la cavité a proximité des hydroxyles primaires correspond à un minimum d'énergie. Les structures montrent la présence de liaisons hydrogènes intermoléculaires qui ont été étudiées sur la base de l'analyse NBO pour quantifier les interactions donneur-accepteur entre la molécule invitée et la β -CD.

Dans le but d'examiner l'influence de la solvatation sur la stabilité du complexe, une étude en solution a été réalisée utilisant le modèle CPCM.

Mots clés: dopamine, β -cyclodextrine, complexes d'inclusion, mécanique quantique.

References:

- 1- Djemil, R. and Khatmi, D.E. Can. J. Chem. 2011, 89: 1519.
- 2- Li, J.; Lin, X. Sens. Actuators B Chem. 2007, 124 (2), 486.
- 3- Gao, Z.; Huang, H. Chem. Commun. (Cambridge), 1998, (19): 2107.
- 4- Benghodbane, S. Khatmi, D.E. J Incl. Phenom. Macrocycl. Chem. 2012.

**Quantum mechanical study of thermochemical process of solvation of cyclic ethers
(CH₂CH₂O)_n (n=2,6) in aqueous and tetrachloromethane solutions.**

ARICHE Berkane, RAHMOUNI Ali and ALALI Kuider.

*Modeling and Calculation Methods Laboratory, Taher Moulay University,
B.P. 138, En-Nasr Avenue, Mascara Road, 20002 Saida, Algeria
Tel/Fax : +21348471508. E-mail : berkane.ariche@univ-saida.dz*

Abstract

The thermochemistry of solvation of cyclic polyethers (CH₂CH₂O)_n (n=2,6) in aqueous and tetrachloromethane solutions are studied using CPCM, IEFPCM and SMD continuum solvation models at MP2/6-311G(d,p) level of theory. Computations show that solvation free energies as well as their enthalpic and entropic contributions are linearly correlated with molecular size. The electrostatic contributions of solvation enthalpies are dominant in both solvents and they are weaker in carbon tetrachloride. Moreover, non electrostatic contributions are small and positives in water solvent. The entropic components are almost similar in both solvents, their magnitudes increase with molecular sizes, indicating that solutions containing large solutes are more ordered.

Keywords: solvation, continuum model, free energy, enthalpy, entropy, cyclic polyether.

INVESTIGATIONS ON MOLECULAR STRUCTURE, ELECTRONIC PROPERTIES AND HOMO–LUMO ANALYSIS FOR 1,2,4-OXADIAZOLE-5-AMINE DERIVATIVES

KERASSA aicha, ROUAHNA Yasmina and BELAIDI Salah

Faculty of Sciences, LMCE Laboratory, Department of Chemistry, Group of Computational and Pharmaceutical Chemistry, University of Biskra, 07000, Biskra, Algeria.

aichachimie1@gmail.com

Abstract

Quantum chemistry methods play an important role in obtaining molecular geometries and predicting various properties ¹. To obtain highly accurate geometries and physical properties for molecules that are built from electronegative elements, expensive ab initio/HF electron correlation methods are required. Density functional theory methods offer an alternative use of inexpensive computational methods which could handle relatively large molecules ²⁻⁴

Compounds containing the 1, 2, 4-oxadiazole scaffold has drawn interest due to the unique chemical structure and large variety of biological properties like as antiviral agents, antitumor, anticonvulsant activity and Anti-proliferative.

The present work studied the molecular proprieties of 1,2,4- oxadiazol-5-amine. The RM1, DFT and ab initio method can be used quite satisfactorily in predicting the chemical reactivity of the molecules and the effect of substitution of either donor or acceptor electron.

The 5-amino-1,2,4-oxadiazole-3-carbonitrile (compound B1) is predicted to be the most reactive with least HOMO-LUMO energy gap (5.689 ev) of all 1,2,4- oxadiazol-5-amine systems, This is further supported by maximum charge on 3th position carbon (0.78) which leads to nucleophilic substitution , and this compound is predicted to be the most soluble in the in polar solvents because it has maximum dipole moment value μ (6.77 D).

Références

- 1.M. Ciobanu, L. Preda, D. Savastru, R. Savastru, and E. M. Carstea, *Quantum Matter*. 2, 60, (2013)
2. Chia M. Chang, Hsiao L. Tseng, Abraham F. Jalbout, and Aned de Leon, *J. Comput. Theor. Nanosci.*, 10, 527, (2013)
3. T. L. Jensen, J. Moxnes, and E. Unneberg, *J. Comput. Theor. Nanosci*, 10, 464 (2013)
4. M. Narayanan and A. John Peter, *Quantum Matter*, 1, 53, (2012)

PREDICTION OF THE CHEMO- AND REGIOSELECTIVITY OF THIOPHENE-1,1-DIOXIDES IN DIELS-ALDER REACTIONS.

A CONCEPTUAL DFT APPROACH

MESSAOUDI Boulanour^{1,2} and MEKELLECHE Sidi Mohamed¹

¹*Laboratoire de Thermodynamique Appliquée et Modélisation Moléculaire, Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université de Tlemcen, BP 119, Tlemcen, 13000, Algérie*

²*Unité d'Analyse et Développement Technologique en Environnement, Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyses Physico-chimiques, BP 384, Bou-Ismaïl, 42004 Tipaza, Algérie*

messaoudiboulanour@yahoo.ca

sidi_mekelleche@yahoo.fr

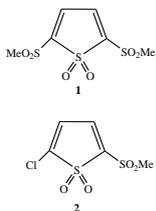
Abstract:

Diels–Alder (DA) reactions have a special importance in organic synthesis since these cycloadditions offer an efficient way to synthesize cycles from small fragments.

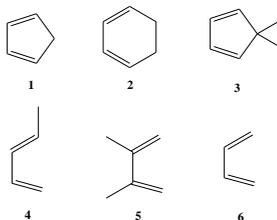
The analysis of the global electrophilicity indexes of some substituted thiophene-1,1-dioxides (scheme 1) shows that these species act as potential electrophiles in polar Diels–Alder reactions with various dienes (scheme 2). The chemo- and regioselectivity and the favored cyclization modes of these cycloaddition reactions are rationalized using local electrophilicity and nucleophilicity indexes recently proposed by Domingo's group. The quantum chemistry calculations were performed at the B3LYP level of theory using the 6-31G* basis set and the obtained results are in good agreement with experimental findings.

Keywords: Diels-Alder reactions, thiophene-1,1-dioxides, chemoselectivity, regioselectivity, DFT-based reactivity indexes.

Scheme 1



Scheme 2



Références:

1. Santelli, M, Pons, J. M. (1996), *Lewis Acids and Selectivity in Organic Synthesis*; CRC Press, Boca Raton.
2. Moiseev, A. M., Tyurin, D. D., Balenkova, E. S., Nenajdenko V. G. (2006) *Tetrahedron*, 62, 4139.
3. Nenajdenko, V. G., Moiseev, A. M., Balenkova, (2005), E. S., *Tetrahedron*, 61, 10880.
4. Domingo, L.R., Aurell, M.J., Pérez, P., Contreras, R., (2002), *J. Phys. Chem. A*, 106, 6871.
5. Pérez, P., Domingo, L. R., Duque-Norena, M., Chamorro, E., (2009), *J. Mol. Struct.*, 895, 86.
6. Ghomri, A., Mekelleche, S. M., (2010), *J. Mol. Struct.*, 941, 36.
7. Messaoudi, B., Mekelleche, S. M., (2011), *Lett. Org. Chem.*, 8, 95.

DFT Study of Nucleic Acid Base Pairs and Their Complexes with Metal ions

N.E.-Y. Amraoui, D. Hammoutène

Laboratory of Thermodynamic and Molecular Modelization, Chemistry Faculty,

USTHB, BP32 El Alia, 16111 Bab Ezzouar, Algiers, Algeria.

amraoui.nour@yahoo.com

Nucleic acids DNA and RNA are polyelectrolyte biological systems having a large number of negative charges on phosphate groups [1], that's why metal ions [2] and their complexes [3] interact with them. These complexes act as anti-inflammatory and anti-tumor [4] drugs. These interactions of DNA with several natural products, synthetic drugs and drug candidates are known to be metal-mediated [5]. Drug–DNA interactions can be classified into two major categories, intercalation and groove binding [6].

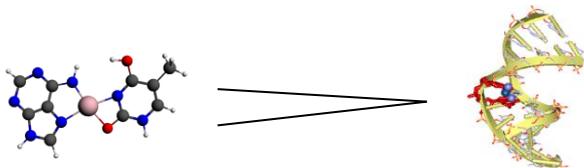


Figure 1: Base pairs related with metal ions:

Figure 2: DNA molecule related with metal

A-M-T M=Cu(II), Co(II), Ru(I), Ni(I). ions and metal complexes

In this study, we follow a theoretical approach using dispersion-corrected Density Functional methods to evaluate a variety of artificial nucleobases as candidates interacting with some metal ions. We focus on adenine and thymine base pair with M=Cu(II), Co(II), Ru(I), Ni(I). All calculations are performed using **(ADF 09)** program. Metal-mediated base pairs are studied as drug candidates, their geometry optimizations are performed at **ZORA/TZ2P/BLYP-D** level. The molecular geometries and different energies as total energies, coordination energies, Pauli interactions, orbitalar interactions and electrostatic energies are determined.

Références:

[1]:Gan Wu^a, Jianfeng Zhu. Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy 61 (2012) 1-70.

[2]: Dheerendra Kumar Patel^a, J. NiclÓs-Gutiérrez ^{a,*}. Coordination Chemistry Reviews 256 (2012) 193-211. [3]: Sofia Tsiliou^a, Lida-Aikaterini Kefala^a,Franc Perdih^b, Iztok Turel^b, Dimitris P. Kessissoglou^a, George Psomas^a. European Journal Medicinal Chemistry 48 (2012) 132–142. [4]: A. Arslantas, A. Kadir Devrin and Hacali Necefoglu. Int. J. Mol. Sci. 8 (2007) 1225-1233. [5]: Karin M. Keller and Jennifer S. Brodbelt. J Am Soc Mass Spectrom 16 (2005) 28–37.[6]: Rahul Palchaudhuri and Paul J Hergenrother.

ETUDE THEORIQUE DU COMPLEXE D'INCLUSION DE 3-AMINO-5-METHYL PYRAZOLE AVEC LA BETA-CYCLODEXTRINE

• **Djilani Imene**. • Nouar Leïla. • Bouhadiba Abdelaziz. • Khatmi DjamelEddine.

Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructures

Université 8 mai 1945 GUELMA

djilaniimene@hotmail.fr

Résumé :

3-amino-5-méthyl pyrazole (AMP) appartient à la classe des anti-inflammatoires, et se caractérise par une faible solubilité dans l'eau. Afin d'augmenter sa solubilité dans l'eau, le complexe d'inclusion d'ampino pyrazole (AMP) avec la β -cyclodextrine (β -CD) a été formé. Le complexe d'inclusion obtenu (AMP/ β -CD) a été étudié théoriquement en utilisant les méthodes PM6, DFT, HF et ONIM2.

Dans cette étude nous prenons en compte la stœchiométrie 1:1. La pénétration de l'AMP dans la cavité de la β -CD peut être faite selon deux orientations A et B

Quand le groupement méthyle (-CH₃) est introduit en premier lieu dans la cavité de la β -CD l'orientation est nommée orientation A, et quand il est introduit en dernier c'est l'orientation B.

Les résultats trouvés indiquent que le complexe d'inclusion formé est stable.

Utilisation des descripteurs moléculaire et GA-MLR pour l'estimation de la température d'ébullition des alcools

BOUCHAMA Fateh¹, KHATMI Djameleddine¹

¹Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructures Université 08 Mai 45 Guelma

fatehmez@gmail.com

khatmi.djameleddine@gmail.com

Résumé:

Durant les deux dernières décennies des modèles QSAR et QSPR ont été développés et appliqués dans l'estimation d'une large gamme de propriétés chimiques et d'activités biologiques. La première étape consiste à sélectionner un ensemble d'apprentissage (ou d'essai) significatif avec des données bien établies. Par la suite, des paramètres structuraux appropriés descripteurs ou propriétés moléculaires sont choisis de façon à établir la meilleure corrélation QSAR possible. L'analyse statistique de l'ensemble des résultats obtenus permet alors d'aboutir au modèle ou à la corrélation requis. Le domaine des descripteurs moléculaire est purement multidisciplinaire et fait appel à une masse de différentes théories. Pour la définition des descripteurs moléculaire, des connaissances de l'algèbre, théorie de graphe, chimie computationnelle, informatique théorique, et les théories de la réactivité organique et chimie physique est généralement requis[1]. Avant d'appliquer le modèle à l'estimation des propriétés ou des activités désirées sur Une grande échelle, on doit le valider sur un ensemble de test représentatif.

Le choix de l'ensemble d'apprentissage joue un rôle pivot dans la dérivation du modèle attendu, dans la mesure où la représentativité et la taille de cet ensemble, ainsi que la qualité des données sélectionnées, affecteront les étapes ultérieures de la construction du modèle.

Ce travail s'inscrit dans le but de développer un modèle QSAR pour la prédiction de la température d'ébullition des alcools. Les données concernant 107 Alcools [2], ont été éclatés en deux sous-ensembles disjoints comprenant respectivement 87 éléments pour le calcul du modèle, et 20 éléments pour sa validation externe. Des descripteurs moléculaires théoriques ont été calculés en utilisant des logiciels de

Modélisation moléculaire. La taille du modèle a été déterminée en optimisant le FIT de Kubinyi, et la sélection des descripteurs réalisée par algorithme génétique. Les valeurs des paramètres statistiques (R^2 , Q^2 , Q^2_{ext}) obtenues attestent de la pertinence du modèle développé.

Mots-clés : QSAR - QSPR -Alcool - Température d'ébullition - Descripteurs moléculaires.

Références:

[1] Roberto Todeschini and Viviana Consonni, Handbook of Molecular Descriptors (August 2000) p11.

[2] Qianfeng Lia,b,* , Xingguo Chena, Zhide Hua, Quantitative structure–property relationships studies for estimating boiling points of alcohols using calculated molecular descriptors with radial basis function neural networks.

ETUDE DFT DE LA REACTION D'ABSTRACTION D'ATOME D'HYDROGENE DE L'AMMONIAC

Nouara MASSOUT¹, D. KHEFFACHE², O.OUAMERALI³

Ecole Doctorale : Physique Chimie Théorique Chimie Informatique.

Faculté de Chimie, USTHB, BP 32, El Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger. Algérie

nouara.massout@hotmail.fr

kheffache.djefe@hotmail.fr

ouameralio@hotmail.fr

Résumé:

Dans la quête permanente d'une méthodologie efficace de calcul des paramètres thermodynamiques et cinétiques, l'approche basée sur la théorie de la fonctionnelle densité (DFT) est d'une importance capitale.

Dans le cadre de cette étude nous avons évalué à quel niveau de qualité se situe les nouvelles fonctionnelles DFT : MPWB1K[1],M05[2] et BMK[3], pour le calcul des constantes de vitesse en considérant la réaction d'abstraction d'atome d'hydrogène $H+NH_3 \rightarrow NH_2 + H_2$ en phase gazeuse. Les réactions d'abstraction d'atomes d'hydrogène sont très importantes dans les processus de combustion, d'oxydation et de pyrolyse. Le calcul des constantes de vitesse $k(T)$ de la réaction $H + NH_3 \rightarrow NH_2 + H_2$ a été effectué en utilisant la théorie de l'état de transition (Transition State Theory (TST)) [4] pour un domaine de température allant de 298 K jusqu'à 2000 K. Pour prendre en compte la correction à l'effet tunnel, nous avons utilisé la théorie de Wigner.

Mots clés: réaction d'abstraction d'hydrogène; DFT ; Etat de transition; constante de vitesse.

Références

[1]. Zhao, Y.; Truhlar, D. G. *J. Phys. Chem. A*, **108** (2004) 6908.

[2]. Zhao, Y.; Schultz, N. E.; Truhlar, D. G. *J. Chem. Phys.*, **123** (2005) 161103.

[3]. Boese, A. D.; Martin, J. M. L. Martin, "Development of Density Functionals for Thermochemical Kinetics," *J. Chem. Phys.*, **121** (2004) 3405.

[4]. J. I. Steinfeld, J. S. Francisco, W. L. Hase, Chemical Kinetics and dynamics, Prenticehall, Upper Saddle River, NJ, (1999).

ETUDE DES PROPRIETES ELECTRONIQUES ET STRUCTURALES PAR MODELISATION MOLECULAIRE

DE QUELQUES DERIVEES DE 1,3-DITHIOL-5-ONE

ROUAHNA Yasmina, KERASSA aicha et BELAIDI Salah

Faculty of Sciences, LMCE Laboratory, Department of Chemistry, Group of Computational and Pharmaceutical Chemistry, University of Biskra, 07000, Biskra, Algeria.

rouahnayasmina@yahoo.fr

Résumé:

Les hétérocycles antibiotiques jouent un rôle thérapeutique très important. En raison de leur intérêt biologique, la chimie des hétérocycles antibiotiques est en développement croissant^{1,2,3}.

Le modèle QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationships*) est une corrélation basée sur un calcul statistique, de paramètres physico-chimiques avec l'activité biologique⁴.

L'objectif de ce travail est de déterminer la structure électronique et géométrique des composés 1,3-dithiol-5-one, par la modélisation moléculaire (mécanique moléculaire, PM3, Ab-initio et DFT).

Les calculs ont montré que la majorité des structures des composés 1,3-dithiol-5-one sont planes et ont un groupe de symétrie Cs, ceci est en accord avec les travaux expérimentales⁵.

Les valeurs des moments dipolaires, les charges, les distances entre atomes et les angles calculés à l'aide des différentes méthodes de calculs ont été comparées avec les données expérimentaux.

L'effet de la substitution sur l'activité chimique de quelques dérivés est étudié en détail à la lumière de l'écart énergétique entre les orbitales HOMO-LUMO.

Références

1. S. Belaidi, A. Dibi, M. Omari, *Türk. J. Chem*, 26, p: 491, (2002).
2. S. Belaidi, M. Omari, T. Lanez, A. Dibi, *J. Soc. Alger. Chem*, 14, pp: 27, (2004).
3. Salah Belaidi and Dalal Harkati, *ISRN Organic Chemistry*, vol. 2011, Article ID 594242, 5 pages, 2011. doi:10.5402/2011/594242
4. V. N. Viswanadhan, M. R. Reddy, R.J. Bacquet, M.D. Erion, *Journal of computational chemistry*, 14, pp:1019, (1993).
5. J. Fabian and K. Herzog, *Vibrational Spectroscopy*. 16, pp: 77-83 (1998).

ETUDE DE L'EVOLUTION DES HERBICIDES DANS L'ENVIRONNEMENT PAR LA PREDICTION DE LEURS SOLUBILITE

BOUAKKADIA Amel, HADDAG Hamza, BOUARRA Nabil, MESSADI Djelloul

Laboratoire de Sécurité Environnementale et Alimentaire

Faculté des sciences -Université Badji Mokhtar –Annaba-B.P12, Annaba Algérie.

amelbouakkadia@yahoo.fr

haddaghamza@yahoo.fr

nabilos_26@yahoo.fr

d_messadi@yahoo.fr

Résumé:

La détermination du devenir et du comportement des pesticides dépend de plusieurs de leurs propriétés. La solubilité caractérise leur distribution dans l'environnement liquide. Les méthodes QSPR sont souvent utilisés pour estimer les propriétés physico-chimiques des composés organiques et de prédire leur comportement dans l'environnement. Des méthodes chimiométriques peuvent être utilisées pour décrire la manière dont les propriétés physicochimiques varient en fonction des caractéristiques de la structure moléculaire exprimées en termes de descripteurs moléculaires appropriés. Les modèles QSPR peuvent également donner un aperçu général de la structure moléculaire qui influe sur ces propriétés. Cette technique statistique est souvent utilisée pour remplacer les tests biologiques coûteux ou des expériences d'une propriété physico-chimique donnée avec des descripteurs calculés, et peut également être utilisé pour prédire les réponses d'intérêt pour les nouveaux composés.

Les données prélevées dans la littérature ont été, au préalable, séparées aléatoirement [1] en un ensemble de calibration de 20 éléments pour la sélection des descripteurs par algorithme génétique [2] et le calcul du modèle QSPR, et un ensemble de validation de 10 éléments uniquement utilisés pour la validation statistique externe. La qualité de l'ajustement, ainsi que la robustesse du modèle, et ses capacités prédictives (interne et externe) ont été examinées. Enfin, le domaine d'application (DA) a été discuté à l'aide du diagramme de Williams (traité en détail dans [3]) qui représente les résidus de prédiction standardisés en fonction des valeurs des leviers (h_i).

Mots clés : pesticides, modélisation, QSPR

Références:

1. MINITAB, Release 13.31, Statistical software, 2000.
2. Leardi R., Boggia R., Terrile M., 1992. Genetic Algorithms as a Strategy for Feature Selection. J. Chemom. vol. 6, 267- 281.
3. Eriksson L., Jaworska J., Worth A., Cronin M., Mc Dowell R. M., Gramatica P., 2003. Methods for reliability, uncertainty assessment, and applicability evaluations of regression based and classification QSPRs. Environmental health perspective, Vol. 111 (10), 1361- 1375.

A DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY OF THE REGIO- AND STEREOSELECTIVITY OF THE 1,3- DIPOLAR CYCLOADDITION

Chafaa Fouad^a, Abdelmalek Khorief Nacereddine^{a,b}, Abdelhafid Djerourou^a

^aLaboratory of Synthesis and Organic Biocatalyst, Department of Chemistry, Faculty of Science, University Badji Mokhtar Annaba, BP 12 23000, Annaba, Algeria

chafaafouad@yahoo.fr

^bDepartment of Physics and Chemistry, School Normal Superior of Technological Education-Skikda, City of Boucetta brothers Azzaba, Skikda Algeria

Khorief.abdelmalek@univ-annaba.org

Abstract:

Cycloadditions are among the most useful organic reactions since they allow for the preparation of carbocyclic and heterocyclic compounds of great pharmaceutical and industrial interest.¹ Isoxazolidine compounds are of biological and pharmacological interests as they can exhibit antibacterial² or antiretroviral³ activity. Electronic effects that stabilize transition states² (TSs) selectively are conceptually important for predicting and interpreting the outcome of chemical processes. The aim of our work is to undertake a theoretical study of the mechanism and the regio- and stereoselectivities for the 1,3-DC between C-phenyl-N-methylnitron and diethyl 2-benzylidenecyclopropane has been studied theoretically. We have performed a comparison study between the functionals B3LYP and MPWB95. The MPWB95 gives the best results in kinetic or thermodynamic results. We have performed this analysis on the possible paths of the reaction, namely, the regioisomeric channels *ortho* and *meta* and the two stereoisomeric approaches *endo* and *exo*. We have also planned to study the electronic effect on the mechanism and selectivity of the group placed in the *para* position of the benzyl ring of the alkene and nitron. The obtained results corroborate very well with the experimental findings.

Keywords: 1,3-cycloaddition, selectivity, mechanism, isoxazolidines, DFT calculations

References

1. a) Carruthers, W. *Some Modern Methods of Organic Synthesis*, 2nd ed.; Cambridge University Press: Cambridge, **1978**; (b) Carruthers, W. *Cycloaddition Reactions in Organic Synthesis*; Pergamon: Oxford, **1990**; (c) (a) Padwa, A. *Dipolar Cycloaddition Chemistry*; Wiley-Interscience: New York, NY, **1984**; Vol. 1; (d) Grigg, R. *Chem. Soc. Rev.* **1987**, 16, 89.
2. a) Pauling, L. *Chem. Eng. News* **1946**, 24, 1375. b) Zimmerman, H. E. *J. Am. Chem. Soc.* **1966**, 88, 1566.
3. a) Damodiran, M.; Sivakumar, P. M.; SenthilKumar, R.; Muralidharan, D.; Kumar, B. V. N. P.; Doble, M.; Perumal, P. T. *Chem. Biol. Drug Des.* **2009**, 74, 494. b) Loh, B.; Vozzolo, L.; Mok, B. J.; Lee, C. C.; Fitzmaurice, R. J.; Caddick, S.; Fassati, A. *Chem. Biol. Drug Des.* **2010**, 75, 461.
4. Tung Q. Tran a, Ruslan S. Savinkov b, Vyacheslav V. Diev c, Galina L. Starova b, Alexander P. Molchanov, *Tetrahedron* **2013**, 69, 5173-5177

QSRR STUDY BASED ON MOLECULAR PROPERTIES

Imen TOUHAMI^{1,2}, Mabrouka DIDDJ² Djelloul MESSADI²

Ecole Préparatoire aux Science et Techniques Annaba

¹Touhami23@yahoo.fr

²Laboratoire de Sécurité Alimentaire et Environnementale

Université BADJI Mokhtar Annaba

d_messadi@voila.fr

Polycyclic aromatic compounds (PAHs) are of concern in environmental science and toxicology. In the present study, a quantitative structure retention relationship (QSRR) study was performed for 209 PAHs using quantum mechanics and other sources descriptors estimated by different approaches. The 209 PAHs was randomly split into two group (training and test). The QSRR between gas-chromatographic retention index and a set of descriptors was found by genetic algorithm selection. The results indicate that a strong correlation exists between the retention index and the a set of selected descriptors for chemical compounds. The prediction results are in good agreement with the experimental values ($R^2=0.98$, $Q^2_{LOO} = 0.971$). The external validations indicated that the model showed a good predictive power was ($Q^2_{Ext}=0.9587$).The mechanistic interpretation of QSRR model was carried out according to the definition of descriptors. Therefore, the result meets the five principles recommended by the Organization for Economic Co-operation and Development (OECD) for validation of QSRR model.

Key words: PLS; PAHs; Retention Index; QSRR; Molecular properties.

References:

- 1- Modèles QSRR hybrides algorithme génétique-régression linéaire multiple des indices de rétention de pyrazines en chromatographie gazeuse : I.Touhami, K.Mokrani et D.Messadi : Lebanese Science Journal, Vol. 13, No. 1, 2012
- 2- Relation structure/solubilité aqueuse de HAP prioritaires ; Sciences & Technologie A – N°29, Juin. (2009), pp. 49-54 I.TOUHAMI ; D.MESSADI
- 3- J.C. Drosos, M. V. Rhenals, R. V. Reyes, J. Chromatogr. A. 1217 (2010) 4411.

ETUDE THEORIQUE DE PROCESSUS DE L'INHIBITION DE LA CORROSION PAR DES DÉRIVÉS DE LA THIOURÉE

KHEDDAOUI Abdelkrim¹, RAHMOUNI Ali²

¹ *Laboratoire de modélisation et des méthodes de calcul, Centre universitaire de Saida, B.P. 138, Cité En Nasr, 20002, Algérie.*

kheddaoui_abdelkrim@yahoo.fr

² *Laboratoire de modélisation et des méthodes de calcul, Centre universitaire de Saida, B.P. 138, Cité En Nasr, 20002, Algérie.*

rahmouniali@hotmail.com

Résumé:

Les indices de réactivité dérivant de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), en l'occurrence, les indices de Fukui (f^-), molleses globales (s) et molleses locales (S) constituent un bon outil pour l'étude de la réactivité chimique, dans notre cas l'adsorption de l'inhibiteur organique sur le métal, car ils expriment la variation de la densité électronique des différents sites lors du passage de la molécule de l'état initial (avant adsorption) à l'état final (après adsorption).

Les indices de réactivité (Indices de Fukui et Molleses locales) ont été calculés en utilisant les analyses de population de Mulliken (MPA). La réactivité locale a été analysée au moyen des indices de Fukui. Les valeurs des indices ces indiquent que tous les hétéroatomes de nos molécules peuvent être considérés des sites favorables aux attaques électrophiles ou nucléophiles.

Références:

1. A. Kheddaoui, mémoire de magister, Université Université Dr. Tahar MOULAY Saïda, Étude theorique de l'inhibition de la corrosion par des derives de la thiouree, 2013,120p.
2. M.J. Frisch et Al , Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
3. R.G. Pearson, J. Am. Chem. Soc. 85 (1983) 3533.

Modèle QSAR utilisant des descripteurs quantiques pour la prédiction de l'activité anti-VIH des dérivés de HEPT.

*TOUHAMI Mofida*¹, *RAHMOUNI Ali*¹

¹ *Laboratoire de Modélisation et méthodes de calcul de l'Université de Saida,*

20002-Saida- Algérie

moufida_1616@hotmail.fr

rahmouniali@hotmail.com

Résumé:

Les ordinateurs sont devenus des outils indispensables en chimie pharmaceutique moderne, tant au niveau de la découverte de nouveaux médicaments que de leur développement. Ils joueront un rôle important dans la mise au point d'un médicament capable de guérir de l'infection au VIH. Il est à noter qu'aucun médicament de ce type n'existe actuellement et que les différents traitements disponibles ont pour rôle de bloquer l'évolution du virus dans l'organisme et de maintenir l'équilibre entre la présence du virus dans le corps et le système de défense de l'organisme. Le Virus de l'Immunodéficience Humaine (VIH-1) est le rétrovirus le plus fréquent et le plus pathogène puisqu'il est responsable de la survenue du SIDA. La transcriptase inverse du virus de (VIH-1) est une enzyme essentielle pour catalyser la conversion de l'ARN viral en ADN proviral et est donc une cible de choix pour la thérapie antivirale contre le syndrome SIDA. En fait, un grand nombre de composés ont été synthétisés pour cibler divers sites actifs sur cette enzyme. Parmi eux, plusieurs dérivés de 1 - [(2-hydroxyéthoxy) méthyl] -6 (phénylthio) thymine (HEPT) se sont révélés comme étant des inhibiteurs puissants et sélectifs.

Le développement et l'utilisation des modèles QSAR est l'un des exemples de l'utilisation des ordinateurs dans le développement des médicaments. De la littérature, on note que plusieurs modèles QSAR ont été développés sur un ensemble de 107 dérivés HEPT pour la prédiction de l'inhibition de la transcriptase inverse du VIH-1. Les techniques utilisées sont : la régression linéaire multiple, régression des moindres carrés partiels, réseau neurone et les machines à vecteurs de support. Les relations entre la structure et l'activité ont été examinées quantitativement en utilisant des descripteurs hydrophobiques et géométriques. La comparaison de la qualité des différents modèles montre que les machines à vecteurs de support est une meilleure approche pour améliorer les possibilités d'interprétation des données et également de présenter des modèles avec une meilleure qualité prédictive. L'objectif de notre étude est d'introduire certains descripteurs quantiques dans le modèle QSAR pour prédire l'activité anti-VIH des dérivés de HEPT. Les descripteurs quantiques ont été évalués par la méthode DFT/B3LYP/6-31G.

Références:

[1]:Baba, M.; Tanaka, H.; De Clercq, E.; Pauwels, R.; Balzarini, J.; Schols,D.; Nakashima, H.; Perno, C. F.; Walker, R. T.; Miyasaka, T. Highly Specific Inhibition of Human Immunodeficiency Virus Type 1 by a Novel 6-Substituted Acycloiridine Derivative. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 1989, 165, 1375-1381.

[2]:Luco, J. and Ferretti, F., QSAR based on multiple linear regression and PLS methods for the anti-HIV activity of a large group of HEPT derivatives, *J. Chem.Comput. Sci.*, 37 (1997) 392–401.

[3]:Douali, L., Villemin, D., Ziad, A., & Cherqaoui, D. (2004). Artificial neural networks: non-linear QSAR studies of HEPT derivatives as HIV-1 reverse transcriptase inhibitors. *Molecular diversity*, 8(1), 1-8.

[4]:Shaik, B., Zafar, T., & Agrawal, V. K. (2013). Estimation of Anti-HIV Activity of HEPT Analogues Using MLR, ANN, and SVM Techniques. *International Journal of Medicinal Chemistry*, 2013.

Modèles QSAR pour la prédiction de la toxicité aquatique

De dérivés benzéniques substitués vis-à-vis de pemiphales promelas

Ziani Nadia, Hamza Haddag, Didi mabrouka, Amirat khadidja, Messadi Djelloul.

ziani_nadia84@yahoo.fr

Laboratoire de Sécurité Environnementale et Alimentaire (LSEA), Faculté des Sciences, Département de Chimie, Université Badji Mokhtar

Annaba, B. P. 12, 23000, El-Hadjar, Algér

Résumé

Une relation structure/ dose létale (DL50) de dérivés benzéniques a été recherchée en utilisant les paramètres structuraux (descripteurs moléculaires) calculés avec le logiciel DRAGON [1].

Les composés aminés ont été optimisés a partir de la méthode semi empirique AM1 du logicielle Hyperchem [2].

Parmi la centaine de modèles obtenus nous avons sélectionné celui qui présente les meilleures valeurs du paramètre de prédiction (Q^2) et du coefficient de détermination (R^2).

Le modèle obtenu par régression linéaire multiple [3], a pour équation:

$$pDL50 = - 2.86 - 0.320 \text{ RDF045v} - 0.367 \text{ BEHm6} - 1.56 \text{ Mor27v} - 0.557 \text{ E1m}$$

$n= 61$; $Q^2(\%) = 92,22$; $R^2 (\%) = 91.26$; $Q^2_{\text{bootstrap}}(\%)=94.93$; $RMSE =0.185$

Mot clés : Modélisation ; QSAR ; Descripteurs Moléculaires; DL50 ;

Références:

[1] Todeschini R., Consonni V., Mauri A. & Pavan M. 2005 DRAGON Software for the Calculation of Molecular Descriptors– version 5.3 for Windows, Talete s.r.l., Milano, Italy.

[2] HYPERCHEM/CHEMPLUS ver.7.03 for Windows Autodesk Inc., Sausalito, CA, U.S.A. 2002.

[3] MOBYDIGS – Models BY Descriptors In Genetic Selection – ver. 1.1 for Windows, Talete S.r.l., Milano, Italy.

Vibrational spectra of Glyphosate using quantum chemical calculation

F.Z.Kouidri^{1,2,3}, N. Benbrahim^{1,4}, A. Rahmouni¹

¹Laboratoire de Modélisation et de Méthodes de Calcul, Université Docteur

MoulayTahar, Saïda, Algeria

alirahmouni@hotmail.fr, fatimazohrakouidri@yahoo.fr

² Faculté des sciences de la nature et de la vie, Université de Mascara.

³ université de Abou Bekr Belkaid Tlemcen

⁴ Département de Médecine, Faculté de Médecine Taleb Mourad, Université DjillaliLiabes,

SidiBelAbbès, 22000, Algeria

benbrahimm@yahoo.fr

Glyphosate, N-(phosphonomethylglycine) (PMG), the active ingredient in Roundup, has become the most popular nonselective post-emergent herbicide in the world [1]. The low phytotoxicity of which in soils is attributed to its strong adsorption to soil components, on which it is rapidly inactivated by microbial degradation. Adsorption in soils and sediments is considered to occur by the phosphonate group. Moreover, this herbicide is able to form strong complexes with water and transition metals due to the presence of amino, carboxylic, and phosphonic moieties in its molecule, which each could coordinate separately to metal ions or in combination as a bidentate or tridentate ligand [2]. Because of the importance of glyphosate complexes with water, we have aimed at elucidating which mechanisms are implicated in the solvation process of PMG by using quantum calculations. In a first part we are interested in vibrational spectra of GMP and its determination using quantum calculations. So, the geometries and vibrations spectra of the glyphosate are calculated using the DFT (B3LYP/6-31+G**) and the semi-empirical method PM6 in the gas phase and in aqueous solution. The energy of the optimal geometry is evaluated the B3LYP/6-31+G**//B3LYP/6-311++G(3df,2p). The DFT results are compared with those of PM6 method.

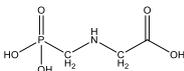


Fig. 1: The Glyphosate [(N-phosphonomethyl)glycine] structure

References

- [1] G.A. Khoury, T.C. Gehris, L. Tribe, R.M. Torres Sánchez, M. dos Santos Afonso, Glyphosate adsorption on montmorillonite, *Applied Clay Science*, **2010**, 50, 167
- [2] T. UNDA BEYTIYA, E. MORILLO, C. MAQUEDA, FTIR Study of Glyphosate-Copper Complexes, *J. Agric. Food Chem.* **2002**, 50, 1918.

THEORETICAL STUDY OF INTRAMOLECULAR DIELS-ALDER REACTION OF E,E-ACRYLATE DIENYL.

Bouacha Samir¹, Fouad Chafaa², A.H Djerourou³.

¹ University of M'sila (Algeria). e-mail: bouachasamir10@yahoo.fr

^{2,3} Organic Synthesis and Biocatalysis Laboratory, Chemistry Department, University of Annaba (Badji Mokhtar), B.P:12, 23000, Annaba, Algeria.

Abstract

In this work, we have presented a theoretical study of intramolecular Diels-Alder reaction (IMDA) of E,E-acrylate dienyl to elucidate the stereoselectivity observed experimentally, chemical reactivity and reaction mechanism. The theoretical study was performed by means of following quantum approaches: Theory of the transition state (TST) and Indices derived from conceptual DFT. The calculations were performed with the Gaussian 09W program and using the method DFT/B3LYP/6-31G*. The results obtained in this work are in agreement with experimental data.

Keywords: intramolecular Diels-Alder reaction, Stereoselectivity, Effect of catalyst, Conceptual DFT, Theory of transition state.

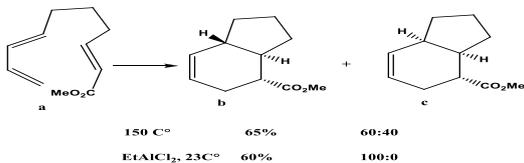


Fig.1 : The Diels-Alder intramolecular (IMDA) of E, E-dienyl acrylate with or without catalyst (EtAlCl₂).

References

- [1]. W. R. Roush, H. R. Gillis, A. I. Ko, J. Am. Chem. Soc. **1982**, 104, 2269.
- [2]. L. Meneses, W. Tiznado, R. Contreras, P. Fuentealba, Chem. Phys. Lett. **2004**, 388.
- [3]. J. Soto-Delgado, L. R. Domingo, R. Contreras, Org. Biomol. Chem. **2010**, 8, 3678.

Modélisation de la rétention de quelques phénols séparés par chromatographie en phase liquide

BOUFENAYA Hamza¹, SOUISI M^{ed} Lotfi², HADDAG Hamza³ MESSADI Djelloul⁴ KHELAFI Moustafa⁵

(1) *Unité de recherche en Energies Renouvelles en Milieu Saharien, URERMS, Centre de Développement des Energies Renouvelles, CDER, 01000, Adrar, Algeria.*

(2) *Laboratoire de sécurité environnementale et alimentaire – UBMA*

¹ hamza_boufenaya@yahoo.fr ² ml8souici@voila.fr

³ Haddaghamza@yahoo.fr ⁴ d_messadi@yahoo.fr

⁵ m.khelafi@urerms.dz

Résumé :

La rétention (log k) d'un mélange hétérogène de phénols séparés en régime isochratique par CLHP-PI, avec une phase mobile méthanol – eau a été reliée aux conditions d'analyse (température T ; fraction volumique, ϕ , du co-solvant organique) et au coefficient de partage n-octanol/eau de Ghose-Crippen-Viswanadhan (AlogP) calculé à l'aide du logiciel DRAGON[1].

Les conditions expérimentales obtenus dans différent conditions de séparation s'imposent d'elles mêmes dans le choix de T (température de la colonne) ; x (la fraction volumique) du méthanol des phases mobiles hydro -organiques, en plus du descripteur log P (coefficient de partage phase organique /aqueuse) est introduit dans le modèle QSRR[2], parce que l'hydrophobicité encode la plupart des forces d'intermoléculaire ente le soluté et le solvant. Nous avons appliqué la Régression Linéaire Multiple pour rechercher des corrélations linéaires entre la variable dépendante et les variables explicatives imposées. Les 76 observations ont été séparées une fois aléatoirement, et autre fois par l'algorithme DUPLEX, en ensemble de calibration de 60 observations, et ensemble de validation externe de 16 éléments. Les deux modèles obtenus sont bons à tous les points de vue : qualité de l'ajustement, robustesse interne et externe, capacité prédictive, et la stabilité ce qui prouve que les corrélations variables dépendantes – variables indépendantes (température de la colonne, fraction volumique et LOGP) sont linéaires.

Mots clés : Phénols, chromatographie phase liquide, Rétention, Modèle QSRR.

Références:

1.R. Todeschini, V. Consonni, M. Pavan. DRAGON, Software for the Calculation of Molecular Descriptors. Release 5.3 for windows, Milano (2005).

2. Moriguchi,S.Hirono,I.Nakagome,H.Hirono,Chem.Pharm.Bull.1994,42,976-978.

Density functional study of polymer (SeN)_x

Z. Ben Mesbah, M. Rekhis

Laboratoire de Chimie Théorique Computationnelle et Photonique (LCTCP)

Faculté de Chimie, USTHB, BP 32, El Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger.

benmesbah_zahia@hotmail.fr

The main challenge in the extensive research carried out for heterocyclic sulfur-nitrogen compounds was originally to understand the unexpected structural and bonding properties of this species. The supraconducting properties of (SN)_x have aroused tremendous interest in this area of chemistry and boosting the activity synthetic and structural work of sulfur-nitrogen compounds and directing it toward the preparation of heavier chalcogen nitride polymers (SeN)_x, (TeN)_x, and the mixed chalcogen-nitrogen polymers, which are expected to have enhanced electrical properties.

In this work, we have examined the conducting and the supraconducting properties of H(Se₂N₂)_xH (x= 1, 2, 3, 4 and 5) within two models of conductivity, modeling the supraconducting polymer (SeN)_x.

Four electronic states have been examined: the lowest singlet and triplet in the neutral species, as well as the cation and anion for H(Se₂N₂)_xH (x= 1, 2, 3, 4 and 5), HNSe and HSeN. Different methods are using with many bases set.

Keywords: *Polymer (SeN)_x, DFT, conductivity and superconductivity.*

References:

- [1] A.J. Heeger, J. Phys. Chem. B 105 (2001) 8475.
- [2] A.J. Banister, I.B. Gorrell, Adv. Mater. 10 (1998) 1415.
- [3] C.M. Mikulski, P.J. Russo, M.S. Saran, A.G. MacDiarmid, A.F. Garito, A.M.J. Heeger, J. Am. Chem. Soc. 97 (1975) 6358.

Structure et spectre électronique des complexes de 1,1'-bis (diphénylphosphino)ferrocène et p-tolylsulfonyl dithiocarbamate avec les métaux : Ni , Pd et Pt.

BRAHIM Sefia¹, RAHMOUNI ALI², BRAHIM Houari³

¹⁻²⁻³ *Labaoratoire de Modélisation et Méthodes de calculs (LMMC), Université de Saida.*

¹safi_mah@hotmail.fr, ²rahmouniali@hotmail.com, ³brahim_lmmc@hotmail.com

Résumé:

L'énergie solaire est l'une des meilleures alternatives aux combustibles fossiles en tant que source d'énergie du monde de demain¹. Cependant il faut la capter et convertir en énergie électrique. D'intenses travaux de recherches sont en cours pour optimiser le rendement des cellules photovoltaïques qui permettent la réalisation de ces deux tâches. Des complexes de métaux de transitions sont utilisés pour capter l'énergie solaire en tant que photosensibilisateurs. Ces derniers doivent présenter une absorption maximum de la lumière visible.

Dans l'objectif de les utiliser en tant que photosensibilisateurs les complexes : $[M(dppf)L]$ [où $dppf=1,1'$ -bis(diphénylphosphino)ferrocène; $M = Ni(II)$ (1), $Pd(II)$ (2), $Pt(II)$ (3) et $L = p$ -tolylsulfonyl dithiocarbamate, $M=Ni(II)$ (4), $Pd(II)$ (5), $Pt(II)$ (6) et $L = p$ -chlorobenzène sulfonyl dithiocarbamate, $M = Ni(II)$ (7), $Pd(II)$ (8) et $L = p$ -bromobenzène sulfonyl dithiocarbamate, $M = Ni(II)$ (9), $Pd(II)$ (10) et $L = 1$ -ethoxycarbonyl-1-cyanoéthylène-2,2-dithiolate, ont été synthétisés, caractérisés et leurs spectres d'absorption électronique réalisés². Notre contribution dans l'étude de ces complexes est d'établir leurs spectres électroniques théoriques à partir de calculs quantiques. Pour chaque complexe cette contribution est réalisée en deux grandes étapes. La première est une optimisation de géométrie pour rechercher la structure optimale. Dans cette étape nous utilisons la théorie de la fonctionnelle de la densité en utilisant la fonctionnelle B3LYP et les base 6-31G* pour représenter les électrons des atomes légers et LANL2DZ pour représenter les électrons de valence des atomes lourds. Les effets des électrons de cœur des atomes lourds sont représentés par le pseudo-potentiel LANL2DZ. La deuxième étape qui consiste en l'établissement du spectre UV-visible, est réalisée en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps TD-DFT. On présentera les résultats obtenus pour les complexes : (1), (2) et (3).

Références:

1. Y.Bessette, André, Papyrus(2012).
2. S.K. Singh, R. Chauhan, K.Diwan, M. G. B. Drew., L. Bahadur, N.Singh, *Organometallic Chemistry* 745-746 (2013) 190-200.

PREDICTION DES PARAMETRES PHYSICO-CHIMIQUES DE 38 DERIVES BENZENIQUES

K. DJELLOUL MOKRANI, I. TOUHAMI, D. MESSADI

*Laboratoire de Sécurité Environnementale et Alimentaire (LASEA) Université Badji Mokhtar –
Annaba-, 23 000 Annaba, Algérie.*

mokrani_karima04@yahoo.fr

Résumé :

Les indices de rétention (I) en chromatographie gazeuse de 38 benzènes diversement substitués ont été corrélés avec 4 descripteurs moléculaires : indices topologiques (XV0, NOCH₃), descripteur géométrique (VOL), descripteur électronique (DIMO).

Les modèles construits sur différents ensembles de données d'estimation sont pratiquement équivalents (Stabilité du modèle à 4 régresseurs).

Quel que soit le nombre de données d'estimation le modèle à 4 descripteur (dans l'ordre XV0, NOCH₃, VOL, DIMO) a été adapté et validé en calculant le coefficient de détermination multiple de prédiction et l'écart type résiduel qui est très faible : $R^2 = 100\%$; $S \leq 0,009$; leurs capacités prédictives sont excellentes, ce qui a été confirmé par une double validation croisée : $R^2_{CV} = 100,0\%$.

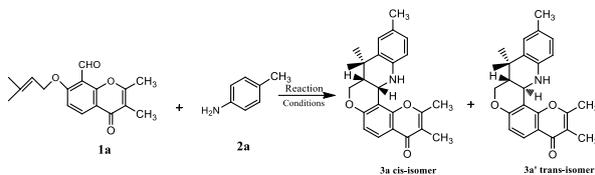
Nous avons opté en définitive pour le modèle à 15 données d'estimation qui présente la plus faible valeur de la statistique MRSPE qui la moyenne quadratique des résidus prédits (=0,0040).

DFT Study of the Structure and Spectroscopic Properties of Tetrahydrochromeno[4,3-b]quinolines

T. Ardjani, S. Mekelleche*

takiainan@yahoo.fr & sidi_mekelleche@yahoo.fr

Experimentally, it has been shown that the intramolecular [4+2] imino-Diels-Alder reaction of 2-azadienes derived in situ from aromatic amines and 7-O-prenyl derivatives of 8-formyl-2,3-disubstituted chromenones gives good to excellent yields of cis-fused tetrahydrochromeno[4,3-b] quinolines (**3a**) (scheme 1).



scheme 1

In this work, we have performed a theoretical study of the geometrical structures of the cis/trans stereoisomers of the tetrahydrochromeno [4,3-b] quinolines. Comparison with available X-ray data has also been made. The IR and ¹H and ¹³C NMR nuclear magnetic resonance chemical shifts and the coupling constants were calculated at the B3LYP level of theory using 6-31G(d) and 6-31G(d,p) basis sets. Solvent effects were taken into account using IEFPCM solvation model.

The calculated ¹H and ¹³C NMR chemical shifts are compared to experimental data and coupling constants are computed in order to put in evidence the relative proton positions and to give useful information about the cis/trans preference of the tetrahydrochromeno[4,3-b] quinolines stereoisomers.

Key words: Tetrahydrochromeno[4,3-b] quinolines, IR spectrum, ¹H NMR spectrum, ¹³C NMR spectrum, Coupling constants, DFT calculations.

References:

K. Nagaiah et al., Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters 20 (2010) 3259–3264

Docking moléculaire, Autodock et ses fonctionnalités

Krid Adel¹

Département de chimie université Constantine 1

wadelkrid@gmail.com

Résumé:

Les interactions protéin-ligand jouent un grand rôle, très important dans plusieurs domaines tels que la chimie, biologie, médecine et autres. Ces interactions sont à la base des mécanismes biologiques [1]. Les détails de ces interactions sont souvent étudiés par cristallographie RX ou par résonance magnétique nucléaire RMN.

Le docking moléculaire a pour but la prédiction d'un complexe moléculaire à partir de molécules isolées (séparées) [2]. Cette technique qui entre dans le cadre de la modélisation moléculaire est considérablement plus facile à mettre en oeuvre, moins cher et plus rapide que l'utilisation des méthodes expérimentales.

Les logiciels de docking moléculaire sont d'une grande utilisation dans l'industrie et la recherche pharmaceutique puisque la plus part des principes actifs sont de petites molécules (ligands) qui interagissent avec une cible biologique généralement protéique (récepteur).

Dans cet exposé, je vais essayer d'étaler d'une manière générale l'état de l'art du docking moléculaire ainsi que l'utilisation et les fonctionnalités du logiciel AUTODOCK[3] [4] qui représente le logiciel de docking moléculaire le plus utilisé dans ce domaine de recherche.

MODELISATION DE LA TENSION SUPERFICIELLE D'UNE SERIE DE DERIVEES DE PROPANE EN UTILISANT DES DESCRIPTEURS MOLECULAIRES THEORIQUES ET UNE APPROCHE ALGORITHME GENETIQUE / REGRESSION LINEAIRE MULTIPLE

***AMIRAT Khadidja**¹, Ziani Nadia², MESSADI DJELLOUL³*

1, 2,3 Laboratoire de Sécurité Environnementale et Alimentaire (LASEA), Université BADJI Mokhtar Annaba, B. P. N° 12, 23000, Annaba, Algérie.

[*khadidjaamirat@voila.fr*](mailto:khadidjaamirat@voila.fr)

[*Ziani_nadia84@yahoo.fr*](mailto:Ziani_nadia84@yahoo.fr)

[*d-messadi@yahoo.fr*](mailto:d-messadi@yahoo.fr)

Résumé

Une relation structure/ tension superficielle d'une série de dérivées de propane a été recherchée en favorisant l'approche hybride algorithme génétique/régression multilinéaire, les paramètres structuraux étant calculés avec les logiciels Hyperchem[1] et DRAGON[2]. Parmi la centaine de modèles à 3 régresseurs obtenus nous avons sélectionné par le logiciel Mobidigs [3] celui qui présente les meilleures valeurs du paramètre de prédiction (Q₂) et du coefficient de détermination (R²) :

La tension superficielle(δ)= 75.5 - 18.5 GATS1v - 26.3 BELm1 - 3.70 Mor09u;

n=26 ; ES= 1.4312; Q²(%)=96.65; R² (%)=97.32 ; F= 266.2815; P=0,000

La première variable explicative est associée à un descripteur topologique, alors que la seconde est appartient à descripteurs Morse alors que la troisième présente la première valeur propre de la matrice de Burden.

Mots clés: Descripteurs théoriques, une série de dérivées de propane, descripteurs moléculaires, relation quantitative structure/rétention, approche hybride.

Références :

1. Hyperchem™ Release 7.5 for windows, Molecular Modelling system (2000).
- 2.R. Todeschini, V. Consonni, M. Pavan, DRAGON, Software for the calculation of Molecular Descriptors. Release 5.3 for Windows, Milano(2005).
3. R. Todeschini, D. Ballabio, Consonni, A. Mauri and M. Pavan Milano Chemometrics and QSAR Research Group Moby Digs Professional – Version 1.0 – 2004.

L'étude Theorique de la tautomérie de l'histamine

LAFIFI Ismahan¹, KHATMI Djameleddine²

^{1,2}Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructures

lafifiismahane@gmail.com

khatmi.djameleddine@gmail.com

Résumé:

Les calculs DFT avec des différents niveaux sont appliqués pour examiner les formes tautomères de la molécule d'histamine induite par transfert de protons en phase gazeuse, dans un solvant et en milieu explicite microhydraté avec une, deux et trois molécules d'eau. Les résultats obtenus dans cette étude montrent que la forme A est le tautomère plus stable. La relative stabilité dans l'eau est légèrement modifiée lorsque le système a été décrit avec le modèle PCM (des calculs effectués uniquement avec B3LYP). Enfin, avec l'environnement hydraté avec deux molécules d'eau, les calculs montrent que le tautomère A est plus stable grâce à sa structure qui permet la mise en place de la liaison hydrogène avec la molécule d'eau.

Références:

1. L. B. Hough, J. W. Nalwalk, R. Leurs, W. M. Menge, H. Timmerman, *Pharmacology Biochemistry and Behaviour*, 66 (2000) 61-66.
2. A. J. Vila, Y. A. Arnautova, Y. Vorobojev, H. A. Scheraga, *Biophysics Computational Biology*, 108 (2011) 5602-5607.
3. S. Abdalla, M. Springborg, *J. Phys. Chem. A*. 114 (2010) 5823–5829.)

Theoretical and experimental study of inclusion complexation of β -lactam antibiotics with β -cyclodextrin

N.BOUSSATHA et H.Ghoualem

*Laboratoire d'Electrochimie, Corrosion, Métallurgie et Chimie Minérale. Faculté de Chimie
USTHB. BP32 El-Alia Bab-Ezzouar.16111. Alger*

**nadia-boussatha@live.fr*

Abstract

The inclusion complexes of selected β -lactam antibiotics with β -cyclodextrin (β -CD) were studied by UV-Vis spectroscopy, differential scanning calorimetry (DSC), powder X-ray diffractometry and molecular mechanics (MM) calculations and modeling.

Molecular mechanics calculations has been used to describe details of the structural, energetic, and dynamic features of host-guest complex as well as to foresee the better stoichiometry of the complex formed.

Physicochemical characterizations were performed using differential scanning calorimetry and powder X-ray diffractometry.

Due to the targeting effect after the complexation with β -CD, the antimicrobial activity can be significantly improved.

Keywords: Antibiotics, β -Cyclodextrin, Inclusion complexation, Molecular calculation.

DFT/TDDFT LIGAND EFFECTS ON STRUCTURES AND SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF YTTRIUM GUANIDINATE

Salima Lakehal^{1,2}, Aicha Lakehal³, Nadia Ouddai¹

¹Laboratoire Chimie des matériaux et des vivants: Activité, Réactivité Université Hadj Lakhdar, Batna, 05000- Algérie

²Department of materials sciences, Faculty of sciences, University of Oum el Bouaghi, 04000-Algeria

³Chemistry and Environmental Chemistry Laboratory , Université Hadj Lakhdar, Batna, 05000- Algeria

e-mail:Lakehal.salima@yahoo.fr

Résumé: guanidinate ligands are efficient catalysts in homogeneous catalyses such as polymerization of nonpolar and polar monomers, e.g., ethylene, propylene, styrene, and lactones, as well as hydrosilylation of alkenes and methyl methacrylate polymerization. Furthermore, the bidentate chelating effect of the guanidinate ligands is expected to enhance the thermal/chemical stability of the resulting metal complexes and thus make them suitable precursors for metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) and atomic laser deposition (ALD). To date, a very few homoleptic tris-guanidinate rare-earth complexes have been reported in the literature. Very recently, Milanov et al. synthesized homoleptic rare-earth guanidinate complexes, and study their structure and reactivity in order to evaluate them as precursors for MOCVD and ALD of rare-earth oxide films [1].

The electronic and molecular structures of the homoleptic Ytterium tris-guanidinate complexes $Y[(N^iPr)_2CNR_1R_2]_3$, [$R_1=R_2=Me, Et$ and iPr] have been investigated employing DFT calculations in order to understand the structures, bonding and energies of the interactions between Ytterium metal and a guanidinate ligands. The effect of the substitution on nitrogen position of guanidinate on these complexes has been also investigated employing DFT and TDDFT calculations for 6 kinds of models obtained by alternative substitution of alkyl on nitrogen of guanidinate ligands. The results reveal that the substitution position plays a crucial role in the geometry structure by affecting the torsion angle and the HOMO-LUMO transitions. The energy decomposition analysis indicates a majority of ionic bonding in all systems; the exception is in the $(Y[(N^iR)_2CN^iR_1R_2]_3; R=Et$ and $R_1=R_2=H)$ which present a significant degree of covalency.

Références:

1. Milanov. A. P.; Fischer. R. A.; Devi. A. *inorg.chem.* **2008**,47(23),11405.

Stabilité de l'ibuprofen avec la β -cyclodextrin (β -CD) dans le vide et le dans solvant

BEZZINA Belgacem^{1,2}, ABED GHARS Med Tayeb¹, BENDJAMA Hocine¹, KHATMI Djameleddine²

¹ Centre National de Recherche Scientifique et Technique en Soudage et Contrôle, Unité de Recherche Appliquée en Sidérurgie et Métallurgie URASM-CSC, B.P 196,23000 Annaba, Algérie

²Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructure LCCN, Université 8 Mai 1945 Guelma, Algérie

bezzinabelgacem@yahoo.fr

Résumé:

Le procédé d'inclusion de l'ibuprofen dans la β -cyclodextrin (β -CD) a été étudié expérimentalement tout à fait intensivement [1, 2,...], au contraire l'étude théorique .

Nous avons étudié le procédé d'inclusion de l'ibuprofen (IBP) dans la β -cyclodextrin (β -CD) ; en utilisant différentes méthodes : PM3, HF, et ONIOM2. Dans cette étude nous avons tenu compte seulement la stoechiométrie 1:1 [1, 2, 3].

Les énergies de complexation et d'interaction pour les deux orientations considérées sont étudiées, dans le vide (gas) puis dans le solvant (implicite (COSMO) et explicite) pour évaluer l'effet de solvant sur le phénomène de complexation [4]. Toutes les méthodes quantiques ont prouvé que l'orientation 2, dans laquelle le cycle benzénique de l'ibuprofen est totalement incluse dans la cavité hydrophobe de β -CD avec le radical isobutyl situé près de l'ouverture primaire et le groupement d'acide propionique du côté de l'ouverture secondaire, est favorisée compte tenu de l'énergie de complexation, En outre, il existe plusieurs liaisons hydrogènes intermoléculaires

entre l'hôte et l'invité . Ici, la liaison H est définie comme C-H ... O ou O-H ... O avec la distance entre O et H étant variant de 1,79 à 3,00 Å , qui elle joue un rôle important dans la stabilité des complexes . Les calculs statistiques thermodynamiques à 1 atm et 298.15 K par la méthode PM3 démontrait que le complexe 1:1 IBP/ β -CD est enthalpiquement favorable.

Mots clé : Procédé d'inclusion, Ibuprofen , β -cyclodextrin ,Solvatation.

Références:

1. Heydari,S.,kakhki,R.M. *Arabian Journal of Chemistry* (2013), <http://dx.doi.org/10.1016/j.arabjc.2013.02.021>
2. Mura, P., Bettinetti, G.P., Manderioli, A., Faucci, M.T., Bramanti, G., Sorrenti, M. *Int. J. Pharm.* 1998; 166:189–203
3. Hladon T, Pawlaczyk J, Szafran B. *J Inclusion Phenom Macro Chem.*2000;36:1-8.
4. Klamt, A., Schuurmann, G.J. *Chem. Soc., Perkin Trans. 2* 1993, 799.

**Development of reliable QSPR models for the prediction
of acidity constants of some Drugs.**

A Guendouzi^a and S. M. Mekelleche^b

^a Département de Chimie, Faculté des Sciences et technologie, Université M. TAHAR B.P.138, Saïda 20000, Algeria.

^b Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université A. B. Belkaïd, B.P.119, Tlemcen, 13000, Algeria.

Abstract:

This work presents a study aimed at the theoretical prediction of pKa values of benzoic acids in aqueous solution we investigated the solute-solvent interactions of these acids and their corresponding anions. The deprotonation Gibbs free energies in aqueous solution have been computed by our last version of the polarizable continuum model (SMD), that it was used to describe the solvent. The framework set by the thermodynamic cycle have been studied for describing protonation in aqueous and gas phases. The pKa values have been calculated using the density functional theory (DFT) with B3lyp and 6-311++G(d,p) basis set. Using these methods, an excellent correlation was found between the deprotonation Gibbs free energy changes and the experimental data of 51 compounds acids in aqueous for the majority of the acids studied than other recently published results. The mean absolute deviation of the calculated pKa values is < 0.36 in pKa units, for the benzoic acids considered with R²= 0.93

Keywords: QSPR; MLR analysis; Free Energies; SMD; DFT; pka; benzoic acids; drugs compounds.

References:

[1] CRC Handbook of Chemistry and Physics 90th Edition [CRC Press] (2009-2010).

[3] A. Guendouzi, S. M. Mekelleche "Prediction of the melting points of fatty acids from computed molecular descriptors: A quantitative structure–property relationship study" Chemistry and Physics of Lipids, Volume 165, Issue 1, January 2012, Pages 1-6.

Etude théorique structurale des composés du titane mono,bi et trimétalliques possédant une activité biologique

S. Lebaal¹ and N. Ouddai²

¹University Hadj Lakhdar, Batna, 05000 - Algeria

s_lebaal@yahoo.fr

²Laboratoire de chimie des matériaux et des vivants: Activité, Réactivité

mail: ouddai_nadia@yahoo.fr

Résumé :

Notre travail consiste à une étude théorique structurale d'une série de composées organométalliques à base de dichlorure de titanocène(CP_2TiCl_2), Ces composés présentent une activité biologique anti-tumorale¹. La série des composés a été synthétisée par matthias Tacke et al². Notre apport consiste en une approche théorique au moyen de calculs quantiques. Les résultats se résument en une corrélation entre les descripteurs quantiques et géométriques et l'activité biologique.

Mots clés : DFT, TTDFT, LLC-PK, anti-tumorale

Reference:

1. RJ Knox et PC McGowan. "Les métallocènes comme anti-tumeur réactifs". *demande de brevet international WO 2004/005305* .

Etude par modélisation moléculaire du complexe d'inclusion Acriflavine dans alpha et beta cyclodextrines

Bouhadiba Abdelaziz, Rahim Mouhamed, Djilani. Imene, Nouar. Leila.

Laboratory of Computational Chemistry and nanostructure, Guelma University

Address: BP: 401; Guelma, 24000, Algeria.

bouhadibaaziz@yahoo.fr

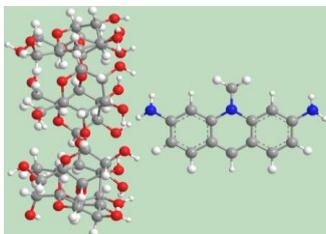
rahimskikda21@yahoo.fr

djilaniimene@hotmail.fr

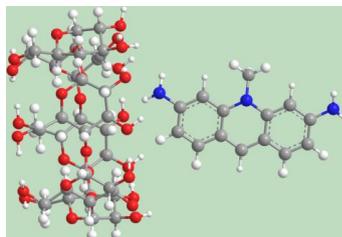
Nouar.laïla@yahoo.fr

En nous basant sur des résultats expérimentaux qui montrent une inclusion de stœchiométrie 1:1, nous avons fait l'étude computationnelle du processus d'inclusion de L'acriflavine dans la bêta et alpha cyclodextrines en utilisant la méthode semi empirique PM3.

Les résultats obtenus avec les différentes approches, confirment que l'orientation la plus favorable correspond à celle où la molécule invitée est presque totalement séquestrée dans la cavité du macrocycle du modèle A.



(a)



(b)

Figure: Système de coordonnées utilisé pour définir le processus d'inclusion

(a) le modèle A et (b) le modèle B.

Références:

- 1- [Bouhadiba Abdelaziz](#), [Nouar Leila](#), [Haiahem Sakina](#), [Djilani Imene](#), [Madi Fatima](#), [Khatmi DjamelEddine](#) : Theoretical investigation study based on PM3MM and ONIOM2 calculations of β -Cyclodextrin complexes with diphenylamine. *J Incl Phenom Macrocycl Chem.* 77 (2013) 455-462.
- 2- Karelson, M., Lobanov, V.S., Katritzky, R. *Chem Rev* 96 (1996) 1027-1043.