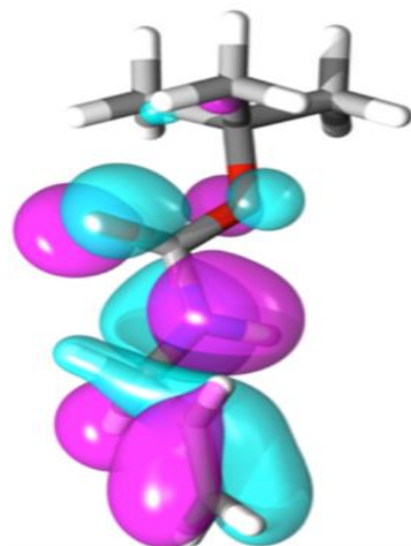
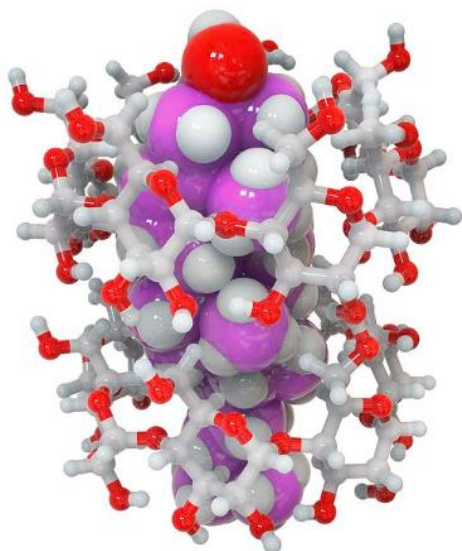


Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université 8 Mai 1945, Guelma
Faculté de Mathématiques, Informatique et Sciences de la matière
Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructures
Laboratoire de Chimie Appliquée



RECUEIL DES RESUMES



19 Décembre 2023
Guelma



PRESIDENTS D'HONNEUR

- Pr. ELLAGOUNE S., Recteur de l'université
- Pr. MEDDOUR A., Doyen de la faculté

COMITE D'ORGANISATION

Présidente : Dr. MERABET Nora

Dr. KSOURI Rabah
Dr. CHEGHIB Nadjoua
Dr. SERIDI Saida
Dr. LAFIFI Ismahan
Dr. HAIAHEM Sakina
Dr. DERDARE Meryem
Dr. MEZARI Yasmine
Dr. LACHI Nadia
Dr. BAHLOUL Abida
Dr. BOUCHEMELLA Houria
Dr. MAIZI Rafik
Dr. DJAGHOUT Ilhem
Mme BADI Sonia
Melle ARAAR Nassira
Mme CHEKATTI Leyla
Mme BOULTIF Assia

COMITE SCIENTIFIQUE

Présidente : Pr. Madi Fatiha

Pr. MERDES Rachid Université de Guelma
Pr. NOUAR Leila Université de Guelma
Pr. BOUDJAHAM Abdel-Ghani Université de Guelma
Pr. DJEMIL Rayenne Université de Guelma
Pr. GUEBAILIA Habiba Université de Guelma
Pr. ROUAIGUIA Samia Université de Guelma
Pr. FISLI Hassina Université de Guelma
Pr. NIGRI Soraya Université de Guelma
Pr. KADRI Mekki Université de Guelma
Pr. GHEID Abdelhak Université de Souk-Ahras
Pr. BELKHERI Lotfi Université de Constantine
Pr. BERREDJEM Yamina Université d'Annaba
Pr. BENDJEDOU Amel Université de Souk-Ahras
Dr. KSOURI Rabah Université de Guelma
Dr. BOUHADIBA Abdelaziz Université de Skikda
Dr. GUENDOZI Abdelkrim Université de Saida
Dr. BRAHIM Houari Université de Saida
Dr. BELBEH Hayet Université de Guelma
Dr. BOULMOKH Yamina Université de Guelma
Dr. ZEKRI Kamel Eddine Université de Guelma
Dr. BELGUIDOUM Karima Université de Guelma
Dr. CHEGHIB Nadjoua Université de Guelma
Dr. STITI Maamar Université de Guelma
Dr. LAFIFI Ismahan Université de Guelma
Dr. HAIAHEM Sakina Université de Souk-Ahras
Dr. LACHI Nadia Université de Guelma
Dr. BAHLOUL Abida Université de Guelma
Dr. BOUCHEMELLA Houria Université de Guelma
Dr. MAIZI Rafik Université de Guelma
Dr. MERABET Nora Université de Guelma
Dr. DJAGHOUT Ilhem Université de Souk-Ahras

L'organisation du 2^{ème} Séminaire National sur la Modélisation Moléculaire et la chimie Appliquée entre dans le cadre de l'établissement d'une tradition régulière qui tente de réunir les chercheurs travaillant dans le domaine de la chimie appliquée et de la modélisation moléculaire. Ce séminaire permettra aux jeunes chercheurs d'échanger des idées et des informations concernant les récents résultats de la modélisation moléculaire et leurs applications en chimie. Le comité d'organisation du séminaire souhaite la bienvenue à tous les participants et tiens à remercier les membres du comité scientifique et tous les membres du comité d'organisation.



SOMMAIRE

THEMES	PAGES
<u>PROGRAMME</u>	02
<u>MODELISATION MOLECULAIRE</u>	09
<u>CHIMIE APPLIQUEE</u>	77



Programme

2^{ème} Séminaire National sur la Modélisation Moléculaire et la
chimie appliquée

Guelma le 19 Décembre 2023

Lieu : Salle des conférences, Bibliothèque Centrale, Ancien
Campus

- 07h : 30mn – 09h : 00: Inscriptions
- 09h : 00mn – 09h : 25 mn: Ouverture officielle
- 09h : 25mn – 9h : 50 mn : **Conférence plénière / Dr. AITKAKI Samira**, Département de Pharmacie, Faculté de Médecine, UBMA
« **COMBINAISON SHAPE SCREENING ET DOCKING MOLECULAIRE POUR VALORISER BIOLOGIQUEMENT DES MOLECULES D'ORIGINE SYNTHETIQUE OU NATURELLE** »
- 09h : 50mn – 10h : 15 mn : **Conférence plénière / Pr. BOUDJAHM Abdel-Ghani**, Université 8 Mai 1945, Guelma
« **ADSORPTION ET MECANISME DE DECOMPOSITION DE N₂O SUR LES FULLERENES** »
- 10h : 15mn – 11h : 00 mn: *Session Orale /Modélisation Moléculaire – Chimie Appliquée- Salle de conférences*
- 11h : 00 mn - 11h : 30 mn : *Session Poster (1) + Pause-café*
- 11h :30 mn – 12h : 15 mn: *Session Orale/ Modélisation Moléculaire – Chimie Appliquée- Salle de conférences*
- 12h : 15 mn – 12h : 45 mn: *Session Poster (2)*
- 12h : 45mn : *Déjeuner & Clôture*



Modélisation Moléculaire

Titre	Auteur	Page
ADSORPTION ET MECANISME DE DECOMPOSITION DE N ₂ O SUR LES FULLERENES	BOUDJAHM Abdel-Ghani	9
COMBINAISON SHAPE SCREENING ET DOCKING MOLECULAIRE POUR VALORISER BIOLOGIQUEMENT DES MOLECULES D'ORIGINE SYNTHETIQUE OU NATURELLE	AIT KAKI Samira	10
THEORETICAL STUDY OF CHEMICAL REACTIVITY OF PYRITHIONE AND ITS COMPLEXATION WITH ZINC	LAFIFI Ismahan	11
MOLECULAR DOCKING STUDY APPLICATION TO EPIDERMAL GROWTH FACTOR RECEPTOR	ASLI Faiza	12
ETUDE PAR MODELISATION MOLECULAIRE DU COMPLEXE D'INCLUSION ANTI-ASTHMATIQUE 2-HP-β-CYCLODEXTRINE	HAYAHEM Sakina	13
SYNTHESIS, <i>IN VITRO</i> AND <i>IN SILICO</i> STUDIES OF CHLORINATED 3, 5-DIARYL-2-PYRAZOLINES AS ANTIMICROBIAL AGENTS	BENMEKHBI Lotfi	14
ANALYSE DFT DES PROPRIETES STRUCTURALES ET OPTIQUES DES DERIVES D'ANTHRAQUINONE : UN PONT CONCEPTUEL ENTRE LA NATURE ET LA TECHNOLOGIE	HAFID Abdelwahab	15
CONSTRUCTION D'UN MODELE QSPR POUR PREDIRE LA TEMPERATURE CRITIQUE DES MOLECULES ORGANIQUES	BEGHOUR Yassine	16
<i>IN SILICO</i> STUDY (DOCKING MOLECULAR, ADMET) OF NOVEL SULFONYL UREA	BELDJEZIA Dounia	17
REVEALING THE NICKEL COORDINATION MECHANISM OF 7-ACETOXY-2H-1-BENZOPYRAN-2-ONE: A DFT EXPLORATION	BELGUIDOUM Karima	18
SOLUBILITY OF 1,2-DIHYDRO-2-METHYL-2-PHENYL-3H-INDOLE-3-ONE-1-OXYL HOSTED AT RANDOMLY METHYLATED-β-CYCLODEXTRIN : A COMPUTATIONAL INVESTIGATION	CHEKATTI leyla	19
ÉTUDE QSAR PAR MODELISATION MOLECULAIRE D'UNE SERIE BIO-ACTIVE (THIAZOLINONE)	BOULAHIA salma	20
LA PRÉDICTION DE L'ACTIVITÉ BIOLOGIQUE DE THYMOQUINONE PAR MODÉLISATION MOLÉCULAIRE	HOUAS Donia	21
COMPUTATIONAL STUDY OF A NOVEL SYNTHESIZED AZACYCLOHEXANE DERIVATIVES	Zaboub Amel	22
MODELISATION ET PREDICTION DE LA SOLUBILITE DES HYDROCARBURES AROMATIQUES POLYCYCLIQUES DANS L'EAU : MODELE QSPR	DRIUCHE Youssouf	23
ÉTUDE THEORIQUE DU PROCESSUS D'INCLUSION DE LA LIDOCAÏNE AVEC LA β-CYCLODEXTRINE	KADRI Amira	24
CALCULS DES PROPRIÉTÉS STRUCTURALES, ÉLASTIQUES, ÉLECTRONIQUES ET HERMODYNAMIQUES DE PÉROVSKITE SrTiO ₃	Maizi Rafik	25



RECHERCHE DE NOUVEAUX INHIBITEURS DE HSQS PAR UNE APPROCHE DE MODELISATION PHARMACOPHORE BASEE SUR LES LIGANDS COMBINEE A UN CRIBLAGE VIRTUEL.	ABDAOUI Meriem	26
CHARACTERIZATION OF NEW STRONTIUM HYDROGENSQUARATE POWDER	KHANFER Hiba	27
THEORETICAL STUDY OF INCLUSION COMPLEXES OF CUCURBIT [7] URIL AND B-CYCLODEXTRIN HOSTS AND NEUTRAL RED GUEST	DJILANI Imene	28
ANALYSE IN SILICO DES INTERACTIONS ALPHA-CASEINE / LIGANDS (ACIDES GRAS ET POLYPHENOLS) PAR LE BIAIS DE SIMULATIONS DE DOCKING MOLECULAIRE.	CHOUARFA Fella	29
ETUDE PAR MODELISATION MOLECULAIRE LA STABILITE D'UN PESTICIDE DANS LA B-CYCLODEXTRINE	BOUNEB Wahiba	30
THEORETICAL STUDY OF B-CYCLODEXTRIN INCLUSION COMPLEXES WITH CHLOROPHANE	BOUHADIBA Abdelaziz	31
EFFET INHIBITEUR DE LA PLANTE <i>ORIGANUM VULGARE</i> SUR LA CYCLOOXYGÉNASE 2 PAR DOCKING MOLÉCULAIRE	ALLALA Ilham	32
THEORETICAL STUDY OF THE ELASTIC, ELECTRONIC AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE CS ₂ MF ₆ (M=CR AND MO) PEROVSKITES	CHEGHIB Nedjouda	33
MOLECULAR MODELLING STUDIES THE INTERACTIONS OF NON-STEROIDAL ANTI INFLAMMATORY DRUGS WITH B-CYCLODEXTRIN.	LACHI Nadia	34
PREDICTION DE LA TOXICITE DES SUBSTANCES NATURELLES PAR LES METHODES COMPUTATIONNELLES; EXEMPLE DE DOCKING MOLECULAIRE	BOUCHENTOUF Salim	35
IN SILICO ET IN VITRO	AIT KAKI Samira	36
STABILISATION DU CURCUMINE PAR LA B-CYCLODEXTRINE (ETUDE THEORIQUE)	BOUZIT Habiba	37
COMPLEXES BETWEEN ADRIAMYCIN AND U(II)/FE(II) IONS: EXPERIMENTAL AND DFT/ B3LYP AND CAM-B3LYP STUDIES.	KADRI Rayene	38
INVESTIGATION OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN INCLUSION COMPLEXES OF PROBENECID WITH 2-HYDROXYPROPYL-B-CYCLODEXTRIN USING DFT-D3	DJELLALA Imane	39
DOCKING STUDIES OF NOVEL MONOVALENT AND BIVALENT BENZENESULFONAMIDE INCORPORATING 1,2,3-TRIAZOLE SCAFFOLD AS POTENTIAL CARBONIC ANHYDRASE IX AND XII INHIBITORS	OURDJINI Zeyneb	40



CONFORMATION WITH DFT AND STRUCTURE OF 1,3-DIIDO-5-CHLORO-2,4,6-TRIMETHYL-BENEZENE AT 293K	GHANEMI Soumia	41
THEORETICAL STUDY OF ADSORPTION OF LEUCINE AMINO ACID ON DIAMOND LIKE CARBON CAOTINGS WITH DFT DISPERSION CORRECTION	BRAHIMI Nawel	42
ADSORPTION OF HCOOH MOLECULE OVER THE Cu_{Nv} ; N = 3–8) NANOCCLUSERS: A DFT STUDY	BOULBAZINE Mouhssin	43
DFT INVESTIGATION OF PHENOL ADSORPTION FROM WATER ON PRISTINE GRAPHENE	BOUDJAHM Ines	44
THEORETICAL STUDY OF BENZENE REMOVAL FROM WATER BY ADSORPTION ON THE GRAPHENE SURFACE	BOUDJAHM Ines	45
ÉTUDE IN SILICO DE PRODUITS NATURELS SELECTIONNES COMME LE LIANT SARS-COV2 M ^{PRO} : DOCKING MOLECULAIRE ET MOLECULAIRE SIMULATION DYNAMIQUE.	BENCHEIKHA Bochra	46
THEORTICAL MODELING AND EXPERIMENTAL STUDIES OF ALUMINUM IN 3.0 WT.% NACL SOLUTION CONTAINING A GREEN CORROSION INHIBITOR	BAHLOUL Abida	47
OPTICAL PROPERTIES OF RUTILE TiO_2 CO-DOPED WITH NICKEL AND CERIUM	AMRAOUI Rabie	48
A DFT STUDY OF THE MECHANISM AND THE REGIO-STERIOSELECTIVITY OF ASYMMETRIC [3+2] CYCLOADDITION REACTION OF A CHIRAL CYCLIC NITRONE WITH α,β - UNSATURATED LACTONE	ACHOURI Rahma	49
CHARACTERIZATION AND REACTIVITY OF Ni-Ag/ Al_2O_3 NANOPARTICLES PREPARED BY CHEMICAL METHOD	MEZARI Yasmine	50
STABILITY AND ELECTRONIC PROPERTIES OF IR-DOPED VANADIUM NANOMATERIALS AND THEIR INTERACTION WITH N_2H_4 MOLECULE: A THEORETICAL STUDY	DERDARE Meryem	51
THEORETICAL INVESTIGATION OF HOST GUEST INTERACTIONS BETWEEN MDA AND B-CYCLODEXTRIN	BOUCHEMELLA Houria	52
MOLECULAR DOCKING, ADMET, DFT STUDIES OF N-NAPHTOYL AND 6-NAPHTOYL-2(3H)-BENZOXAZOLONE	NESSAIBIA Hanen	53
ANALYSIS AND CONTROL OF THE MAGNETO-HYDRODYNAMIC PUMP	MERDJ Fatima	54
A THEORETICAL STUDY OF ELECTRONIC STRUCTURE AND OPTICAL PROPERTIES OF SQUARE PLANAR PLATINUM(II) AND NEWLY DESIGNED NICKEL(II) COMPLEXES	RACHA SELMI Oumnia	55
ENCAPSULATION OF MENTHOL IN β -CYCLODEXTRIN AND RELEASE CHARACTERISTICS OF THE INCLUSION COMPLEX	BAHLOUL Abida	56
CHEMICAL COMPOSITIONS AND MOLECULAR MODELLING OF <i>ANETHUM GRAVEOLENS</i> ESSENTIAL OILS	SAIDANI Abdelmadjid	57
SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, DFT STUDY AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF (E)-4-(((4-HYDROXYPHENYL)IMINO)METHYL)-2-METHOXYPHENOL	BENMABROUK Marwa	58



FLAV-3-ENE MEDIATED INHIBITION OF PROTEIN KINASE 1A Q1 : A MOLECULAR DOCKING ANALYSIS	BOUDKHIL Ridha	59
STRUCTURAL STUDY, UV/VIS AND EXCITED STATE OF BIOCERAMIC	LABIDI Chams Edoha	60
A COMPUTATIONAL STUDY OF THE MECANISM AND SELECTIVIES CYCLOADDITION OF NITRONES TO INDOLYL-AND PYRROLYLACRYLATES	CHIHEB Ahlam	61
ANNONA MURICATA ALKALOID ANTIDEPRESSANT EFFECTS: MOLECULAR DOCKING AND DFT STUDY	MECHERI Sabri	62
METALLIC COMPLEX BETWEEN N-METHYL THIO SEMICARBAZIDE SCHIFF BASE LIGAND AND CO(II): DFT/M06-2X AND DOCKING INVESTIGATIONS	HASNI Nour	63
PHARMACOPHRE-BASED VIRTUEL SCREENING, MOLECULAR DOCKING, AND MOLECULAR DYNAMICS STUDIES FOR THE DISCOVERY OF THE NOVEL FLT3 INHIBITORS	ANEDE Nada	64
SYNTHESIS AND MOLECULAR DOCKING STUDY IN TARGETING CARBONIC ANHYDRASE II FOR CANCER THERAPEUTICS	DEKIR Ali	65
EFFECT OF DOPING C20 SMALL FULLERENE WITH SINGLE AND MULTI-GOLD ATOM: A DFT STUDY	REMOUGUI Chaima Basma	66
THEORICQAL STUDY OF MOLNOPIRAVIR ADSORPTION ON GOLD DOPED C20 FULLERENE	REMOUGUI Chaima Basma	68
ETUDE THEORIQUE PAR MODELISATION DE L'ACTIVITE ANTIOXYDANTE DES CONFORMERES DE N-E-FERULOYL TYRAMINE ET DE LEURS ANALOGUES SULFURES	BAHLOUL Asma	70
HOST-GUEST INCLUSION COMPLEX OF B-CYCLODEXTRIN / PENAM: THEORETICAL APPROACH	MESSIAD Hanane	72
DOUBLE IONIZATION CROSS SECTIONS OF THE HYDROGEN FLUORIDE MOLECULE BY ELECTRON IMPACT	BOUMATI Ryma	73
CONTRIBUTION TO THE STUDY OF THE INCLUSION COMPLEX OF 3-AC @ B-CYCLODEXTRIN BY QUANTUM METHODS.	MERABET Nora	74
REACTIVITY AND INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN THE INCLUSION COMPLEX OF EUGENOL@ B-CYCLODEXTRIN	MERABET Nora	75
A DFT STUDY OF THE STRUCTURAL, ELASTIC AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE RB ₂ TIBR ₆ PEROVSKITE	KSOURI Rabah	76



Chimie Appliquée

Titre	Auteur	Page
ETUDE D'ELIMINATION D'UN PRODUIT PHARMACEUTIQUE PAR ADSORPTION	KHELIFI Omar	77
INTERCALATION AND PRODUCTION OF POLYETHYLENE GLYCOL-KAOLINITE COMPOSITE	ROUABHIA Fatima	78
CHARGE TRANSFER COMPLEXATION OF THE POLYPHENOL RUTIN AS ELECTRON DONOR WITH TWO π -ACCEPTORS (DDQ AND TCNE)	HAMAMDIA Fatima Zahra	79
INHIBITION DE LA CORROSION DE L'ACIER PAR L'EXTRAIT DE FEUILLES D'OLIVIER EN MILIEU NaCl 3%	RAHMOUNI Halima	80
OPTIMISATION ET VALIDATION D'UNE METHODE DE DOSAGE D'UN MEDICAMENT DE LA FAMILLE DES β -BLOQUANTS PAR CHROMATOGRAPHIE LIQUIDE A HAUTE PERFORMANCE	BOUCHAIR Nabila	81
EFFET DE LA ZONE GEOGRAPHIQUE SUR LES CARACTERISTIQUES CHIMIQUES ET SENSORIELLES D'HUILE D'OLIVE VIERGE.	MEZROUA El Yamine	82
PROPRIÉTÉS SOLVATOCHROMIQUES ET PARAMÈTRES IN SILICO D'ADMET DE NOUVEAUX DÉRIVÉS DE CHLOROÉTHYL-NITROSOURÉE PRÉSENTANT UNE ACTIVITÉ ANTICANCÉREUSE POTENTIELLE ET LEURS COMPLEXES AVEC LA β -CYCLODEXTRINE	FISLI Hassina	83
CHEMICAL STUDY OF GROUNDWATER POLLUTION IN ORTHEASTERN ALGERIA	NEFLA Loubna	84
SYNTHESE ET CARACTERISATION DES COMPLEXES BASES DE SCHIFF DU MANGANESE.	CHEGHIB Nedjoud	85
SYNTHESE, CARACTERISATION ET ETUDES THEORIQUE D'UNE SERIE DE MOLECULES α -AMINOPHOSPHONATES	GRIB Ismahene	86
APPLICATIONS DES LIGANDS DERIVES DE L'HISTAMINE : SYNTHESE, CARACTERISATION ET POTENTIEL ANTIOXYDANT EN PHARMACOLOGIE ET MEDECINE	BELFILALI Imane	87
EFFECT OF THE LEAVING GROUP ON THE ENZYMIC ENANTIOSELECTIVITY DURING THE HYDROLYSIS REACTION OF RACEMIC ESTERS	RAZI Samra	88
ENANTIOSELECTIVE REDUCTION OF AROMATIC KETONES BY CATALYSIS WITH RUTHENIUM COMPLEXES	RAZI Samra	89
DESIGN OF GOLD NANOPARTICLES BEARING THIOUREIDO-SUBSTITUTED BENZENESULFONAMIDE	STITI Maamar	90
SYNTHESE ET CARACTERISATION DE NOUVEAUX HETEROCYCLES AZOTES DE TYPE QUINOLEINES	MILLOUDI Yousra	92
FULL FACTORIAL OPTIMISATION OF TERPENE ACYLATION WITH <i>HAMMAM DEBAGH</i> KAOLINITE CLAY.	BOUKACHABIA Mourad	93
STUDY OF THE ADSORPTION OF CADMIUM ON AN ACTIVATED CARBON FROM ALGAE	BENGOURNA Nadjette	94
ELABORATION OF ELECTROLYTIC DEPOSITS BASED ON NICKEL WITH AN ELECTRO-CATALYTIC EFFECT	DJAGHOUT Ilhem	95



ULTRAFAST SYNTHESIS OF METAL DIBORIDE USING ELECTRIC FIELD-ASSISTED PROCESSING TECHNIQUE	TAIBI Ahmed	96
CYCLIC VOLTAMMETRY ANALYSIS OF THE BRIGHTENING EFFECT OF <i>DAPHNE GNIDIUM L</i> ON NICKEL DEPOSITS	BELBAH Hayet	97
INVESTIGATION OF THE ANTIBIOLOGICAL PROPERTIES OF A SYNTHESIZED SCHIFF BASE	CHETTIBI Manal	98



ADSORPTION ET MECANISME DE DECOMPOSITION DE N₂O SUR LES FULLERENES

Abdel-Ghani Boudjahem

*Computational Catalysis Group, Laboratory of Applied Chemistry, University of Guelma, Box 401,
24000, Guelma, Algeria.*

E-mail : boudjahem@yahoo.fr.

Abstract:

The adsorption and decomposition of N₂O over the surface of the fullerenes were investigated using the DFT calculations. The mechanism of the N₂O dissociation over the above clusters has also been proposed, and the results show that the activation energies are respectively 7.9 and 9.3 kcal mol⁻¹ in process 1, and 23.8 and 52.4 kcal mol⁻¹ in process 2. It was also demonstrated that the O₂ desorption step is considered as the rate-limiting step in these clusters. Furthermore, the results indicate that the regeneration of the surface metal sites of the fullerenes is possible.

Key words: [DFT](#), fullerenes, adsorption, N₂O decomposition reaction



COMBINAISON *SHAPE SCREENING* ET DOCKING MOLECULAIRE POUR VALORISER BIOLOGIQUEMENT DES MOLECULES D'ORIGINE SYNTHETIQUE OU NATURELLE.

Ait kaki Samira^{1,2*}, Layachi Fayçal^{1,2}, Batouche Manel¹, Bentabet Soundous¹, Kraïm Khaïreddine³,
Djahoudi Abdelghani⁴, Neghra Abdelhak¹, Ferkous Foued²

¹Département de pharmacie, faculté de médecine, université Badji Mokhtar Annaba, ²Laboratoire de
recherche de chimie organique appliquée, université Badji Mokhtar Annaba, ³ENSET Skikda,

⁴Laboratoire de microbiologie, faculté de médecine d'Annaba

*Kaki_samira@yahoo.fr.

Résumé

Que ce soit dans le domaine de la chimie ou de la biologie, la modélisation moléculaire devient un outil indispensable, qui aide notamment à la recherche des profils d'activité biologique de molécules synthétisés ou contenues dans des extraits de plantes médicinales, et à la compréhension de leur mécanisme d'action pharmacologique par la recherche de la cible impliquée dans les pathologies d'intérêt prédites. Parmi les méthodes de modélisation utilisées dans ce sens, il ya la prédiction de l'activité par Pass online et la prédiction de la cible par une méthode de screening inverse basé sur la forme « Shape screening » en utilisant Swiss Target Prediction. Le docking moléculaire permet de confirmer ces prédictions en étudiant l'affinité des molécules pour les cibles proposées. L'étude *in silico* des propriétés physicochimiques, pharmacocinétiques et toxicologiques et de la drugabilité permet d'affiner l'étude des molécules ayant présenté un intérêt thérapeutique. Dans cette présente conférence, nous nous proposons de décrire le principe du reverse screening et de son intérêt dans la valorisation biologique des molécules étudiées, qu'elles soient d'origine naturelle ou synthétique. Un rappel sur les secrets de réussite du docking moléculaire pour une cible donnée et le mode et principe de fonctionnement des différents web serveurs de prédiction seront également abordés.

Nous décrivons par la suite un Workflow d'une étude réalisée *in silico* et *in vitro*, au niveau du laboratoire de chimie thérapeutique et du laboratoire de microbiologie du Pr Djahoudi, à la faculté de médecine d'Annaba, pour valoriser les huiles essentielles de la nigelle. Dans ce protocole, des propriétés et les cibles d'intérêt des principaux composants de cette huile ont été prédites. Le docking des cinq composés bioactifs a été réalisé pour les cinq cibles prédites. Une étude pharmacocinétique et toxicologique ADME-Tox a suivi. Une évaluation de l'activité antioxydante et antibactérienne a été réalisée parallèle.

Mots-clés: reverse screening, shape screening, docking, Pass online, ADME-To



THEORETICAL STUDY OF CHEMICAL REACTIVITY OF PYRITHIONE AND ITS COMPLEXATION WITH ZINC

LAFIFI Ismahan¹, MERABET Nora, NOUAR Leila & MADI Fatiha

Laboratory of computational chemistry and nanostructures, University 8 Mai 1945 Guelma.

1e-mail: lafifiismahane@gmail.com.

Abstract

Pyrithione (or 2-mercaptopyridine N-oxide) exists as a pair of tautomers, it is a derivative of natural aspergillilic acid, used as a powerful antimicrobial. However, it has major drawbacks. A promising approach to overcome these drawbacks is to use metal pyrithiones, primarily zinc pyrithione ZPT. A theoretical study of thione-thiol tautomerism and the ZPT complex, using the DFT/B3LYB density functional theory based on 6-31g*, makes it possible to determine the stability of the products and their chemical properties.

The study of the chemical reactivity of thione-thiole tautomerism was carried out by locating the transition states by QST2 and QST3 followed by IRC calculation for reaction path verification. The thermodynamic properties have been shown that the tautomerization is spontaneous and favorable, and that the complexation of pyrithione with metals increases its stability and its biological interest. The energies of the frontier orbitals HOMO and LUMO confirmed the thermodynamic results.

Keywords: DFT, tautomerism, ZPT, Transition state.

References:

1-Antonov L., Tautomerism : Methods and Theories, Weinheim, Wiley-VCH, 2013, 1re éd., 377 p. (ISBN 978-3-527-33294-6).

2- Jones, R. A.; Katritzky, A. R. "721. Tautomeric pyridines. Part I. Pyrid-2- and-4-thione". J. Chem. Soc.: 3610–3613.



MOLECULAR DOCKING STUDY APPLICATION TO EPIDERMAL GROWTH FACTOR RECEPTOR

Faiza Asli¹, Saida Khamouli²

1. *Group of Computational and medicinal Chemistry LMCE Laboratory, University Mohamed Khider, Biskra, 07000, Algeria University Mohamed Khider.Laboratoire, Université, (Times New roman 10)*

E-mail : faiza.asli@univ-biskra.dz.

Abstract:

With the development of computer tools over the past 20 years. Molecular modeling and more precisely molecular docking has very quickly entered field of pharmaceutical research¹. EGFR enzyme involved in cancer disease². Our work consists of studying the inhibition of EGFR (1M17) with deferent inhibitors derived from quinazoline and quinoline by molecular docking. The values of ligands L148 and L177 are the best ligands for inhibit the activity of 1M17 since it forms a stable complex with this enzyme by better binding to the active site. The results obtained show that the ligands L148 and L177 give weak interactions with the active site residues EGFR (1M17) which stabilize the complexes formed of this ligands, which gives a better binding at the level of the active site, and an RMSD of L148 [1,9563 Å] and of L177 [1,2483 Å]. [1, 9563, 1.2483] Å

Key words: Docking, EGFR, Quinazoline , Quinoliène, Shrodinger.

References:

1. Cavasotto, Claudio N., María Gabriela Aucar, and Natalia S. Adler. "Computational chemistry in drug lead discovery and design." International Journal of Quantum Chemistry 119.2 (2019): e25678.
2. Okines, Alicia, David Cunningham, and Ian Chau. "Targeting the human EGFR family in esophagogastric cancer." Nature reviews Clinical oncology 8.8 (2011) 492.



**ETUDE PAR MODELISATION MOLECULAIRE DU COMPLEXE D'INCLUSION
ANTIASTHMATIQUE 2-HP- β -CYCLODEXTRINE**

S.Hayahem¹; N.Nouar²; F.Madi³

1. *Université Mohamed cherif messaidia Soukahras Laboratoire LCCN*
2. *Université 08 mai 1945 Guelma, Laboratoire LCCN*
3. *Université 08 mai 1945 Guelma, Laboratoire LCCN*

s.hayaheme@univ-soukahras.dz.

Résumé :

Cette étude présente une analyse computationnelle de formation de complexe d'inclusion entre l'antiasthmatic et la 2-HP- β -cyclodextrine dans le vide et dans l'eau en utilisant la méthode de solvation implicite (modèle CPCM). Les optimisations de géométrie ont été effectuées par les niveaux de théorie B3LYP/6-31G. Pour chaque modèle, l'antiasthmatic est totalement encapsulé dans la cavité 2-HP- β -CD. Les analyses théoriques effectuées par AIM, QAIM et NCI ont permis de dénombrer et visualiser des liaisons de type hydrogène et Vander Waals justifiant la stabilité des deux modèles. L'analyse QTAIM a montré que ces liaisons hydrogènes formées entre l'invité et l'hôte sont fortes avec une prédominance de l'énergie potentielle par rapport à l'énergie cinétique caractérisant ainsi ces liaisons comme partiellement covalente. Le gap énergétique ΔE (HOMO-LUMO) et les descripteurs de réactivité globaux des molécules libres sont plus importants que les partenaires complexées, laissant prévoir la formation d'un complexe plus stable.

Mots Clés : 2-HP- β -CD, antiasthmatic, complexe d'inclusion, AIM

References:

- [1] V. Nikolic, M. Stankovic, A. Kapor, L. Nikolic, D. Cvetkovic, J. Stamenkovic, Allylthiosulfinate: β -cyclodextrin inclusion complex: preparation, characterization and microbiological activity, *Pharmazie* 59 (2004) 845–848.
- [2] W. Chen, L.J. Yang, S.X. Ma, X.D. Yang, B.M. Fan, J. Lin, Crassicauline A/ β cyclodextrin host-guest system: preparation, characterization, inclusion mode, solubilization and stability, *Carbohydr. Polym.* 84 (2011) 1321–13.



SYNTHESIS, *IN VITRO* AND *IN SILICO* STUDIES OF CHLORINATED 3, 5-DIARYL-2-PYRAZOLINES AS ANTIMICROBIAL AGENTS

Benmekhbi Lotfi^{a,b}, Ikram Hamlaoui^c, Mosbah Salima^b

a- Department of process engineering, university of Salah Bounider Constantine3, Algeria.

b- Laboratory of molecular chemistry, University of Frères Mentouri Constantine1 Algeria.

c- Faculty of medical science university of Constantine3 Algeria.

Email: benmekhbi@yahoo.fr

Abstract:

A series of chlorinated 3, 5-diaryl-2-pyrazolines has been synthesized by the reaction of appropriately substituted chloroalcones and phenyl hydrazine. The structures of the obtained compounds have been elucidated by microanalysis and ¹H- and ¹³C- NMR spectroscopic measurements. The antimicrobial activity of the synthesized compounds against *Staphylococcus aureus* ATCC 6538, *Escherichia coli* ATCC 8739, *Klebsiella pneumoniae* ATCC 4352, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 1539, *Proteus mirabilis*, were tested using disk diffusion. The minimum inhibitory concentration (MIC) method has shown that the tested compounds own a significant inhibitory effect (11-25 µg.ml⁻¹) on both gram-positive and gram-negative bacteria.

The antibacterial activity against E.coli DNA-Gyrase B and human DNA topoisomérases IIβ has been reported by molecular docking. The results revealed that chlorinated 3, 5-diaryl-2-pyrazolines derivatives possessed a lowest binding energy values compared to ciprofloxacin and vosaroxin used as positive control. Drug-likeness and *in silico* pre-ADMET properties were also predicted.

References:

- 1- Adel A H, Abdel-Rahman, and Abdel-Megied; *Monatshefte fur Chemie. Chemical Monthly*.2007, 889-897.
- 2- Cattoir V, Felden B, *J. Infect. Dis.* **2019**, 220, 350–360
- 3- Dayakar C., Kumar B.S., Sneha G., Sagarika G., Meghana K., Ramakrishna S., Prakasham R.S., China R.B. *Bioorg. Med. Chem.* 2017;25:5678–5691.



**"ANALYSE DFT DES PROPRIETES STRUCTURALES ET OPTIQUES DES DERIVES
D'ANTHRAQUINONE : UN PONT CONCEPTUEL ENTRE LA NATURE ET LA
TECHNOLOGIE"**

HAFID Abdelwahab & DR LAIB Souhila

Laboratoire de Chimie des Matériaux et des Vivants : Activité & Réactivité (LCMVAR).

Département de Chimie, Université Batna 1

Abdelwahab.hafid@univ-batna.dz

Cette étude pionnière se penche sur une exploration approfondie des caractéristiques moléculaires des dérivés d'antraquinone provenant de plantes médicinales. En établissant un lien entre la phytothérapie traditionnelle et la chimie théorique, nous examinons de manière comparative la structure électronique, la réactivité et les propriétés optiques de ces composés. L'analyse des caractéristiques géométriques met en évidence l'impact significatif des substituants sur la géométrie de ces composés. Les calculs DFT des diagrammes des orbitales moléculaires frontières révèlent que la molécule (3) présente un gap énergétique plus élevé que les autres, ouvrant des perspectives intéressantes. L'étude des descripteurs de la réactivité chimique désigne la molécule (1) comme l'acide de Lewis le plus fort, ajoutant une dimension pratique à ces découvertes théoriques. Une analyse topologique détaillée met en lumière l'existence de liaisons hydrogène de type (O...H) dans les trois molécules, offrant des informations cruciales sur leur comportement chimique.

En parallèle, notre travail met en évidence l'influence du substituant sur les propriétés spectroscopiques, mettant en avant la molécule (3) caractérisée par un effet hyperchromique notable. Une exploration théorique des propriétés optiques non linéaires révèle que les molécules (1) et (2) présentent des propriétés ONL, ouvrant des voies innovantes pour l'application potentielle de ces dérivés.

Mots clés : DFT, Structure moléculaire, Propriétés optiques, Dérivés d'antraquinone, UV-Visibl



CONSTRUCTION D'UN MODELE QSPR POUR PREDIRE LA TEMPERATURE CRITIQUE DES MOLECULES ORGANIQUES

**,¹ BEGHOUR Yassine*,² LAHIOUEL Yasmina*

¹ **Laboratoire des silicates, Polymères et des Nano composites (LSPN), Université 08 mai 1945
Guelma, BP 401.Guelma 24000, Algérie.**

*** : BEGHOURYASSINE90@GMAIL.COM**

Résumé : L'objectif de ce travail vise à développer un modèle mathématique basé sur les structures moléculaires des composées, pour prédire le paramètre physico-chimique des molécules organiques, par le biais d'un Réseau de Neurone Artificiel-Perceptron Multi Couches (RNA-PMC) basé sur le concept des Relations Quantitatives Structures Propriétés (RQSP). Les modèles issus de la combinaison entre le concept RQSP et le RNA sont appelés modèles de type Relations Quantitatives de Structure Propriété-Réseau de Neurone Artificiel (RQSP-RNA). Un modèle de type RQSP-RNA est développé pour prédire un paramètre physicochimique des molécules organiques : la température normale du point critique (TC). Une base de données complète de 490 est utilisée dans la création du modèle de type RQSP-RNA pour la construction du modèle. Cette base de données totale a été divisée aléatoirement en deux sous-ensembles : 80 % utilisé pour l'apprentissage et 20 % pour le test. 1977 de descripteurs moléculaires ont été calculés à l'aide du logiciel PADEL. Ensuite, une méthode statistique basée sur la méthode de la régression linéaire multiple (RLM) est utilisée pour réduire le nombre de descripteurs moléculaires. L'algorithme BFGS (Propagation en arrière quasi-newtonienne) a été appliqué afin d'entraîner le RNA. L'architecture du meilleur modèle de type RQSP-RNA est représenté comme : (17-8-1). Le résultat de ce modèle de type RQSP-RNA obtenu a montré une bonne précision confirmée par les valeurs des coefficients de régression (R) et de détermination (R²) élevées, qui sont respectivement comprises entre 0,9855-0,9835, et 0,9752-0,9740 pour les trois sous-ensembles de base des données (l'ensemble d'apprentissage, de test, et entier). Mots-clés : RQSP-RNA modèle, la température normale du point critique (Tc), Neurone Artificiel-Perceptron Multi Couches RNA-PMC.



IN SILICO STUDY (DOCKING MOLECULAR, ADMET) OF NOVEL SULFONYL UREA

Dounia Beldjezzia^{1*}, Rayene sayad¹, Hacem k'tir^{1,2}, Aicha Amira^{1,3}

¹Laboratory of Applied Organic Chemistry LCOA, Bio-Organic group, department of chemistry, sciences faculty, Badji-Mokhtar-Annaba University. Box12, 23000 Annaba Algeria

²Medical Sciences faculty, Badji-Mokhtar-Annaba University. Box 12, 23000 Annaba Algeria.

³Preparatory classes in sciences and technology department, national higher school of mining and metallurgy Amar Laskri-Annaba.

* beldjezzia.dounia96@gmail.com

Cancer, a complex of diseases, is one of the main public health concerns worldwide¹. Over the years, despite the fundamental advances in medicine, particularly in the development of antitumor agents with improved efficacy, finding an absolute cure against cancer has become one of the ambitious researcher challenges. Due to the important applications of urea derivatives, many research groups have been interested to develop the possibility of next generation urea which could be more potent as chemotherapeutic agents. The synthesized molecule was also studied for evaluation of breast cancer activity. Molecular docking was done with VEGFR2. An ADMET study was performed to predict the pharmacokinetic properties, toxicity of the compound. Our docking study was performed by using Maestro Schrödinger, and we used the server **SwissADME**, **PkCSM** and **PreADMET** for the ADMET predictions.

Key words: anticancer, cyclic urea, docking.

¹ V. Ganapathy, M. Thangaraju and P. D. Prasad, Nutrient transporters in cancer: relevance to Warburg hypothesis and beyond, Pharmacol. Therapeut., 2009, 121(1), 29–40

REVEALING THE NICKEL COORDINATION MECHANISM OF 7-ACETOXY-2H-1-BENZOPYRAN-2-ONE: A DFT EXPLORATION

Karima Belguidoum¹, Yamina boulmokh¹, Mouna Nacef², Hanane Mesiad^{1,3}, Hayet Belbah¹, Fatima Zahra Hamamdia¹ and Habiba Amira-Guebailia¹

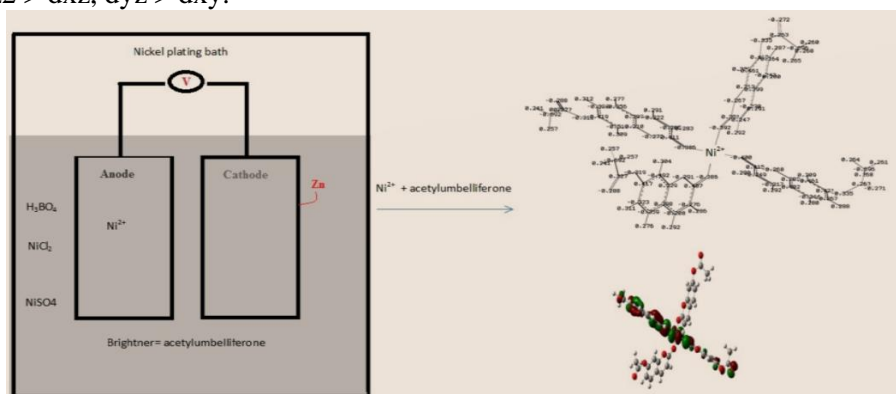
1- Laboratoire de Chimie Appliquée -LCA, Université 8 Mai 1945 Guelma, BP 401, Guelma 24000, Algeria.

2- Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux, Université 08 mai 1945-Guelma, BP 401, Guelma, 24000, Algeria.

3- Université de Constantine 3, Algeria.

ABSTRACT

Polyphenols, especially coumarins, have been shown to improve the quality of electrodeposited metal plates through various mechanisms, such as acting as antioxidants, chelating metal ions, and modulating the electrochemical deposition process [1]. In this study, we have theoretically investigated the formation of a highly stable complex between a coumarin derivative, 7-acetoxycoumarin (ACC), and nickel (Ni) in an aqueous solution using density functional (DFT/B3LYP) with 6-311+G(d,p) and LANL2DZ basis sets. Molecular geometry and vibrational frequencies were carried out for the structures to explain stability and geometry. ¹H-NMR chemical shifts were also studied using a gauge-including atomic orbital approach (GIAO), and were found to be in good agreement with the experimental values. The Mulliken charges and HOMO–LUMO orbital energies were calculated and analyzed. Electronic transitions were determined using the time-dependent density functional theory (TD-DFT). The charge transfer between the metal and the ligand serves as the primary factor for the stabilization of the complex (Ni-(ACC)₄) [2,3]. The analysis of the natural bonding orbital confirms this finding and indicates that the 3d orbital energy level order is $dx^2-y^2 > dz^2 > dxz, dyz > dxy$.



KEYWORDS: Coumarin, metal complex, spectroscopy, natural bonding orbital, TD-DFT, excited states.

REFERENCES

1. Kulkarni A, Avaji PG, Bagihalli GB, Patil SA, Badami PS (2009) Synthesis, spectral, electrochemical and biological studies of Co(II), Ni(II) and Cu(II) complexes with Schiff bases of 8-formyl-7-hydroxy-4-methyl coumarin. *J Coord Chem* 62:481–492
2. Börgel J, Campbell MG, Ritter T (2016) Transition metal d-orbital splitting diagrams: an updated educational resource for square planar transition metal complexes. *J Chem Educ* 1(93):118–121. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.5b00542>
3. Takashiro A, Seiko K, Akio U (2001) Assignment of d-d transitions of square planar [CuIIIn4] complexes containing imidate and amine ligands by means of polarized crystal spectra. *Bull Chem Soc Jpn.* 74:851–860.



**SOLUBILITY OF 1,2 -DIHYDRO-2-METHYL-2-PHENYL-3H-INDOLE-3-ONE-1-OXYL
HOSTED AT RANDOMLY METHYLATED-BÉTACYCLODEXTRIN : A
COMPUTATIONAL INVESTIGATION**

Chekatti leyla^{1,*}, madi fatiha¹, nouar leila¹, oumeddour rabah²

¹Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, Department of Material Sciences,
Faculty of Mathematical, Informatics and Material Sciences, University of 8 Mai 1945, Guelma,
Algeria.

* E-mail : chekatti.leyla@gmail.com

Abstract

In this work, The formation of an inclusion complex (stoichiometry 1:1) between the radical form of 1,2-dihydro-2-methyl-2-phenyl-3H-indole-3-one-1-oxyl and the randomly methylated β -cyclodextrin was studied theoretically according to two models C1 and C2 using B3LYP-D3/6-31G(d) method. Complexation energy, dipole moment, HOMO and LUMO energies and structural parameters of two proposed models are investigated. The results show clearly that the complexes formed are energetically favored. In addition, QTAIM analysis is largely used for studying weak interactions. Finally, The results obtained show that the formation of the inclusion complex according to the two models C1 and C2 leads to an increase in solubility of 1,2-dihydro-2-methyl-2-phenyl-3H-indole-3-one-1-oxyl radical.

Key words: indolinonic nitroxide radical, RM- β CD, B3LYP-D3/6-31G(d).



ÉTUDE QSAR PAR MODELISATION MOLECULAIRE D'UNE SERIE BIO-ACTIVE (THIAZOLINONE)

E-mail salma.boulahia@univ-biskra.dz

Résumés :

La modélisation de propriétés et d'activités biologiques de molécules constitue un champ de recherche important, qui permet par exemple de guider la synthèse des médicaments et l'étude de leurs réactivités chimiques. Dans le cadre de ces travaux de recherche, nous sommes intéressés à l'étude de la relation structure-activité des dérivés THIAZOLINONE par des différentes méthodes de modélisation moléculaire. On a réalisé une comparaison structurale et électronique avec des différentes méthodes théoriques (Ab-initio, DFT) et on a trouvé une similitude entre les résultats obtenus par les deux méthodes. Par la comparaison entre les résultats .on remarque que la méthode de DFT est plus proche et la plus approprié pour faire des calculs sur le noyau THIAZOLINONE la méthode de DFT permet d'étudier les propriétés structurales et l'effet de substitution L'étude de l'effet de la substitution sur notre noyau par les groupements donneurs : méthyle, éthyle , les groupements accepteurs : cyanure, chlorure se présente comme suit : les plus actives chimiquement sont : le composé que les plus actives chimiquement groupement électro attracteur (A6 ,A3) et des groupes électro donneurs (B1 ,B2) qu'ils présent les plus faible gap HOMO-LUMO. Les études QSAR trouvé une relation entre les propriétés physicochimiques telles que l'énergie d'hydratation, la lipophile, le volume moléculaire ...etc. MOTS-CLÉS : DFT, modélisation moléculaire, structure-activité, QSAR



LA PRÉDICTION DE L'ACTIVITÉ BIOLOGIQUE DE THYMOQUINONE PAR MODÉLISATION MOLÉCULAIRE

HOUAS Donia^{1, *}, NEGhra Abdelhak², AÏT KAKÏ Samira³, LAYACHI Fayçal⁴.

¹ Résident en chimie thérapeutique Laboratoire de chimie thérapeutique ; Faculté de médecine Badji Mokhtar Annaba.

² Professeur de chimie thérapeutique Laboratoire de Chimie Thérapeutique ; Faculté de médecine Badji Mokhtar Annaba.

³ Maître de conférences classe A, Laboratoire de chimie thérapeutique ; Faculté de médecine Badji Mokhtar Annaba.

⁴ Maître de conférences classe A ; Laboratoire de Chimie Thérapeutique ; Faculté de médecine Badji Mokhtar Annaba.

E. mail : houasdonia13@gmail.com.

Résumé :

La thymoquinone est un constituant majeur des graines de *Nigella sativa*, connue sous le nom « Habba Al-Sauda » en arabe. Les graines sont fréquemment utilisées dans les pays du Moyen-Orient en médecine traditionnelle pour le traitement de nombreuses maladies ainsi l'amélioration de la santé et du bien-être en général.

Matériels et méthodes : des serveurs Web ouvert swisstargetprediction et reverse Dock a été utilisé pour identifier les cibles possibles de la thymoquinone grâce à la cartographie de similarité et Docking inverse. Les résultats ont été visualisés et validés par amarrage avec Schrödinger.

Résultats et discussion : Les outils swisstargetprediction et reverse Dock ont traité un certain nombre de cibles potentielles données qui ont été classées en fonction de leur score d'affinité. Parmi les cibles les mieux classées, avec un score correspondant bien aux caractéristiques moléculaires de la thymoquinone, on note récepteur aux protéin kinase, androgènes, aldose réductase, CDK2...etc ; qui ont de bons scores. La visualisation de la thymoquinone avec ses cibles obtenues par criblage inverse a montré une plus grande affinité de liaison avec ses récepteurs avec le moins d'énergie de liaison.

Conclusion : D'après les résultats, nous pouvons conclure que l'aldose réductase et la cdk2 ont été identifiées comme une cible possible de composé où les informations récupérées peuvent être utiles pour la conception rationnelle des médicaments anti-diabétiques et anti-cancéreux.

Mots-clés : *Nigella sativa*, thymoquinone, reverse Dock, pêche ciblée, amarrage inverse, mala



COMPUTATIONAL STUDY OF A NOVEL SYNTHESIZED AZACYCLOHEXANE DERIVATIVES

A. ZABOUB^{1,2*}, M. HADJAM³, F. MADI⁴, R. MERDES²

¹Department of Biology, Faculty of Nature and Life Science, University of Souk-Ahras 41000, Algeria.

²Laboratory of Applied Chemistry, Faculty of Maths Computer Science and Matter Science, University of Guelma 24000, Algeria, e-mai : a.zaboub@univ-soukahras.dz

³Laboratory of Applied Chemistry and Materials Technology, Larbi Ben Mhidi University 04000 Oum El Bouaghi, e-mail : meriemhchimie@gmail.com

⁴Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures. University of Guelma. BP 401. Guelma. E-mail: fatiha_madi@yahoo.fr

Abstract:

Azacyclohexanes are organic derivatives obtained by a condensation reaction using aromatic or aliphatic amines with Formalin.

In this work, computational study have been carried out using the Density Functional Theory (DFT) by choosing different levels of calculations (B3LYP: 6-31+G(d,p), B3LYP: 6-311+G(d,p) et B3LYP: 6-31++G(d,p)) and TD-DFT (B3LYP: 6-31+G(d,p)) method. Geometrical data, UV-VIS, IR and NMR spectrums have been generated from structure optimisation and frequency calculations. Moreover, a comparative study have been performed basing on experimental data.

It was found that, theoretical results are in good agreement with those obtained experimentally in spectroscopic analysis.

Key Words : Azacyclohexanes; B3LYP; TD-DFT; 6-31+G(d,p) Spectroscopic analysis.



**MODELISATION ET PREDICTION DE LA SOLUBILITE DES HYDROCARBURES
AROMATIQUES POLYCYCLIQUES DANS L'EAU: MODELE QSPR**

**DRIOUCHE Youssouf¹, FERFAR Meriem¹, BOUAKKADIA Amel², HADDAG Hamza³,
BOUARRA Nabil⁴**

¹*Centre de Recherche en Environnement - Annaba, Alzon, Avenue Boughazi Said, BP.2024, 23005,
Annaba, Algérie*

²*Université Abbes Laghrour, Faculté des Sciences et Techniques – Khenchela, BP. 1252, Route de
Batna 40004 Khenchela, Algérie*

³*Laboratoire de Synthèse Organique et Biocatalyse, Université Badji Mokhtar, BP. 12, 23000,
Annaba, Algérie*

⁴*Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyse Physico-Chimique, Zone Industrielle,
Tipaza, 42004, Algérie*

Corresponding author: ydrinou@gmail.com / y.driouche@cre.dz

Résumé : La modélisation des relations quantitatives structure-propriété (QSPR) est une approche puissante pour prédire les propriétés des polluants organiques environnementaux à partir de leurs descripteurs de structure. Dans cette étude, un modèle QSPR ont été établis pour estimer la solubilité des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAPs) dans l'eau.

Dans un premier temps, l'ensemble de données a été séparé avec l'algorithme DUPLEX en un ensemble de calibrage (22 composés) et un ensemble de validation (10 composés) pour une validation statistique externe.

Un modèle à un descripteur a été développé en utilisant comme variable indépendante des descripteurs théoriques dérivés du logiciel DRAGON lors de l'application de la procédure GA (algorithme génétique) - VSS (sélection de sous-ensemble variable).

La robustesse et les performances prédictives du modèle proposé ont été vérifiées par une validation statistique interne et externe. Les paramètres statistiques de haute qualité ($R^2 = 91,09\%$, $Q^2_{100} = 89,15\%$, $Q^2_{ext} = 84,96\%$, $F = 204,405$, $s = 0,515$) soulignent la stabilité et la capacité prédictive du modèle proposé. Cette étude démontre l'efficacité du modèle établi pour prévoir la solubilité des hydrocarbures aromatiques polycycliques dans l'eau.

Mots Clé : Modélisation Moléculaire, solubilité Aqueuse, QSPR, Régression Linéaire Multiple, Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques

ÉTUDE THEORIQUE DU PROCESSUS D'INCLUSION DE LA LIDOCAÏNE AVEC LA B-CYCLODEXTRINE

Kadri Amira ^{1*}, Attoui Yahia Ouassila ¹

¹ Laboratoire de chimie organique appliquée, groupe de synthèse de biomolécules et modélisation moléculaire, faculté des sciences, département de chimie, Université Badji Mokhtar-Annaba, BP :12, Annaba, 23000, Algérie.

* amira.kadri07@gmail.com

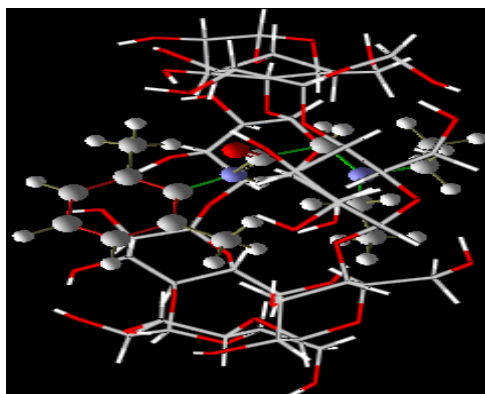
Résumé :

Au cours des dernières années, le concept de reconnaissance moléculaire à travers la complexation des molécules à effets thérapeutiques, est devenue de plus en plus utile dans plusieurs domaines de recherche¹. En effet, divers systèmes macromoléculaires hautement spécifiques ont fait l'objet d'un usage intensif de la complexation moléculaire, dont les interactions mutuelles de nature non covalentes jouant un rôle important².

La cyclodextrine est un excellent excipient largement utilisé pour sa capacité d'encapsulation de molécules invitées, améliorer la stabilité du médicament et réguler efficacement le taux de libération du médicament.

Dans cet optique, nous avons envisagé une étude du processus d'encapsulation de la Lidocaïne qui est un anesthésique local et un anti-arythmique de type amino-amide³, dans la cavité hydrophobe de la β -cyclodextrine par le docking moléculaire en utilisant le logiciel Molegro Virtuel Docker (MVD), pour envisager des différentes orientations possibles.

Les résultats du docking montrent une insertion partielle de la Lidocaïne à l'intérieur de la cavité du β -cyclodextrine. La valeur MolDock score prédit une meilleure orientation dont laquelle le groupe phényle de l'invité est orienté vers la face primaire du β -CD, cette structure sera par la suite exposée à un calcul de mécanique quantique en utilisant l'approche ONIOM.



Mots clés : complexe d'inclusion, β -cyclodextrine, lidocaïne, docking moléculaire, ONIOM.

Références :

- [1]. Zhou, Y.; Liu, C.; Yu, H.; Xu, H.; Lu, Q.; Wang, L. Spectrosc. Lett. 2006, 39 (5), 409.
- [2]. G.Crini, M.Morcellet, N.Morin, L'actualité chimique., 2001, 247, 18-25
- [3]. lidocaine In : Wikipédia, l'encyclopédie libre [en ligne]. Disponible sur : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Lidoca%C3%A>



CALCULS DES PROPRIÉTÉS STRUCTURALES, ÉLASTIQUES, ÉLECTRONIQUES ET THERMODYNAMIQUES DE PÉROVSKITE SrTiO₃

R. Maizi*, R. Ksouri, N. Cheghib, A-G. Boudjahem and M. Dardare.

Computational Catalysis Group, Laboratory of Applied Chemistry, University of Guelma, Box 401, 24000, Guelma, Algeria.

*e-mail: rmaizi24@gmail.com

Résumé :

Dans ce travail, nous avons calculé les propriétés structurales, élastiques et thermodynamiques de composé SrTiO₃ dans la structure cristalline en NaCl, en utilisant la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) avec les méthodes Wu-Cohen (WC) et Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Les constantes élastiques, le module de masse B, le module de cisaillement G, le module de Young E et le rapport de Poisson sont également calculées. Les paramètres élastiques calculés de composé SrTiO₃ en la structure cubique à face centrée vérifient les critères de stabilité mécanique relative ce composé. De plus, les valeurs obtenues pour ces constantes sont en bon accord avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux. Nous avons terminé notre étude par les propriétés thermodynamiques de SrTiO₃ telles que le coefficient de dilatation thermique (α) et la capacité thermique (C_V) de ce composé sont estimés dans la plage de température de 0 à 1200 K. Enfin, Les résultats obtenus pour ce composé ont été analysés et discutés en détail.

Mots-clés : DFT, SrTiO₃, propriétés élastiques, électroniques et thermodynamiques.



RECHERCHE DE NOUVEAUX INHIBITEURS DE HSQS PAR UNE APPROCHE DE MODELISATION PHARMACOPHORE BASEE SUR LES LIGANDS COMBINEE A UN CRIBLAGE VIRTUEL.

Meriem Abdaoui

Pharmacienne spécialiste en chimie thérapeutique

meriem.abdaoui.th@gmail.com

INTRODUCTION

La modélisation des pharmacophores à base de ligands est devenue une stratégie informatique clé pour faciliter la découverte de médicaments. la squalène synthase (SQS) une enzyme clé impliquée dans la voie de biosynthèse du cholestérol, est considérée comme une cible attrayante pour l'hyperlipidémie.

MATERIELS ET METHODES

La modélisation des pharmacophores, l'amarrage moléculaire et des études ADMETox in silico ont été menées pour déterminer le mode de liaison et le profil de probabilité de médicaments des dérivés naturels en tant qu'inhibiteurs de la squalène synthase humaine. Lors de la réalisation ce travail, plusieurs logiciels ont été utilisés : *Maestro de la compagnie Schrödinger* et ces outils ainsi que *LigPlot⁺ v.2.2*.

RESULTATS ET DISCUSSION

Plusieurs modèles pharmacophoriques commun « commun pharmacophore » ont été générés à l'aide du module Phase de la suite Schrodinger de maestro, à partir d'un ensemble d'apprentissage de trente ligands inhibiteurs de hSQS. Une seule hypothèse pharmacophorique a été révélée significative par les différentes métriques de validation mentionnés dans la littérature ; test d'enrichissement, courbe ROC... etc.

Le modèle pharmacophorique validé ADHNRR_1 a été ensuite utilisé comme requête pour le criblage virtuel de la base de données NPASS préalablement filtré selon la règle de Lipinski.

A partir de 16129 composés de départ ; 6535 hits ont été obtenus, et 3152 ont été retenus selon leur score de fitness, et d'alignement. Ces derniers ont été filtrés par une étude d'amarrage moléculaire contre la protéine cible 1EZF de squalène synthase.

L'amarrage moléculaire a été faite par le virtuel screening workflow intégré dans Glide, caractérisé par 3 stages de précision « HTVS, SP et XP ». 2656 molécules ont été obtenus après docking HTVS, ces derniers ont été filtrés par une autre étude de précision standard générant 664 composés, qui ont été finalement optimisés par un amarrage d'extra précision « Glide XP » aboutissant à la fin à 165 hits.

39 composés ont été choisis selon l'énergie de liaison, dont l'analyse des interactions établis avec les résidus clés du site actif ont conduit à 24 composés.

Les 24 hits obtenus présentant une très bonne affinité pour le site actif de la hSQS ont subi une étude ADMETox, et ont enfin abouti à dix molécules drug-like exempt des fractions chimiques indésirables.

CONCLUSION

Cette étude a fourni dix composés candidats inhibiteurs SQS prometteurs pour le traitement de l'hyperlipidémie. La combinaison d'approches informatiques et d'essais biologiques « des tests expérimentaux complémentaires in vitro et in vivo » doivent être envisagés afin de confirmer l'approche théorique préalablement obtenue in silico.

MOTS CLES : pharmacophore, ligand, criblage virtuel, amarrage, ADME-Tox.

CHARACTERIZATION OF NEW STRONTIUM HYDROGENSQUARATE POWDER

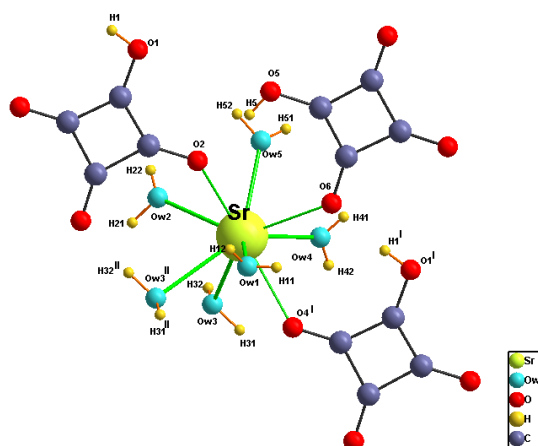
Hiba Khanfer ¹, Amira Bouhali ¹, Chaouki Boudaren ¹

¹ *Unité de Recherche Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale (URCHEMS),
Université des frères Mentouri Constantine, route Ain El-Bey, Constantine, Algérie*

E-mail:

hiba.ka250@gmail.com

Laboratory
obtained with a Siemens
using monochromatic
1.5406 Å). The pattern
temperature, over the
(2θ), with a step length
pattern indexing was
program DICVOL04,
monoclinic unit cell: $a =$
8.8020 (5) Å, $c =$
119.612° (6) °.



powder data were
D500 diffractometer
Cu Kα₁ radiation (λ=
was scanned at room
angular range 5–80°
of 0.02° (2θ). Powder
performed with the
leading to the
24.884 (2) Å, $b =$
13.8930 (1) Å, $\beta =$

The systematic absences revealed by a careful examination of the powder data are consistent with the space group $C2/c$. The Sr²⁺ ion is coordinated by three monodentate hydrogensquarate (hsq) anions and six aqua ligands.

KEY-WORDS: strontium ion, Dicvol 04, aqua ligands, hydrogensquarate anions

REFERENCES

- [1] [A.](#) Bouhali, R. Dridi, C. Boudaren, M. Boudraa, H. Merazig ;Zeitschrift für Kristallographie - New Crystal Structures De Gruyter 236 (4) (2021) 705-707.
[2] R. Dridi, [A.](#) Bouhali, C. Boudaren, A. Bouraiou, H. Merazig ; Zeitschrift für Kristallographie - New Crystal Structures De Gruyter 236 (3) (2021) 675–677.
[3] A. Boultif, D. Louër, J. Appl. Crystallogr. 37 (2004) 724.



THEORETICAL STUDY OF INCLUSION COMPLEXES OF CUCURBIT [7] URIL AND B-CYCLODEXTRIN HOSTS AND NEUTRAL RED GUEST

DJILANI IMENE^{1,2}, NOUAR LEILA²

¹ Higher Normal School of Technological Education – SKIKDA- B.P. Cité frères Bousseta Azzaba Skikda - Algeria.

² Lab. of computational chemistry and nanostructure. University of 8 Mai 1945 Guelma- B.P. 401 GUELMA 24000 - ALGERIA

djilaniimene@hotmail.fr.

Abstract:

Molecular interactions between cucurbit[7]uril (CB[7]), β -Cyclodextrin (β -CD) hosts and Neutral Red (NR) guest (CB[7]/ NR and β -CD/ NR) have been analyzed employing the PM6, DFT and NBO methods. The calculations were carried out just for the 1:1 stoichiometries complexes.

Upon encapsulation, binding energy, thermodynamic parameters, structural parameters and electronic structures of complexes are investigated.

The lowest energies complexes reveal the encapsulation of guest within host cavity.

The structures show the presence of several intermolecular and hydrogen bond interactions that were studied on the basis of NBO analysis employed to quantify the donor-acceptor interactions between the hosts molecules and Neutral Red.

Keywords : Neutral Red, β -Cyclodextrin, cucurbit[7]uril, PM6, DFT.



ANALYSE IN SILICO DES INTERACTIONS ALPHA-CASEINE / LIGANDS (ACIDES GRAS ET POLYPHENOLS) PAR LE BIAIS DE SIMULATIONS DE DOCKING MOLECULAIRE.

Chouarfa Fella¹, Bahloul Abida²

¹Laboratoire d'Analyse Industrielle et Génie des Matériaux.

²Laboratoire de Chimie computationnelle et Nanostructures.
Université de 8 Mai 1945 Guelma B.P. 401, Algérie.

Résumé

L'étude des interactions entre l'alpha-caséine et les ligands choisis, à savoir les acides gras et les polyphénols, revêt une importance cruciale dans le domaine de l'agroalimentaire, plus particulièrement dans la production de produits laitiers. Ce travail joue un rôle essentiel dans l'étude de la stabilité, de la texture, des propriétés sensorielles et de la valeur nutritionnelle des produits finis. Pour mener à bien cette investigation, nous avons opté pour une approche in silico, en utilisant des études de Docking moléculaire, afin d'évaluer l'affinité entre l'alpha-caséine et les ligands. Cette analyse s'est basée sur la détermination de l'énergie de liaison et l'analyse des différentes interactions entre ces composants. En outre, nous avons effectué une évaluation préliminaire de la déviation quadratique moyenne (RMSD) pour vérifier la précision du protocole d'Autodock Vina. Les résultats de nos études de Binding Energy mettent en évidence que la meilleure affinité se manifeste dans le cas de l'association entre l'alpha-caséine et la catéchine. Cette interaction est renforcée par les acides aminés présents dans l'alpha-caséine, qui établissent des interactions hydrophobes et hydrogènes avec les ligands. Ces interactions assurent la stabilité du complexe protéine/ligand, ce qui revêt une grande importance dans le contexte de l'agroalimentaire pour garantir la qualité des produits laitiers finis.

Mots clé : Docking, alpha-caséine, catéchine, autodock.



ETUDE PAR MODELISATION MOLECULAIRE LA STABILITE D'UN PESTICIDE DANS LA B-CYCLODEXTRINE

Bouneb wahiba ^{1,2}, Bouhadiba Abdelaziz ¹ Rahim mohamed¹

¹Laboratory of catalysis, bioprocess and environment, Department of Process Engineering, Faculty of Technology, University of 20 August 1955, Skikda 21000, Algeria

²LRPCSI-Laboratoire de Recherche sur la Physico-Chimie des Surfaces et Interfaces, University of 20 August 1955, Skikda 21000, Algeria

Adresse e-mail: wahibabouneb@gmail.com.

Résumé

Dans ce présent travail, la structure et la stabilité du complexe d'inclusion formé par d'un pesticide (Linuron) et la β -cyclodextrine (β -CD) ont été étudiées théoriquement par différentes méthodes de calculs computationnels dans le vide.

Une recherche conformationnelle par la méthode semi-empirique PM7 a permis de détecter deux minimums globaux : le modèle A situé à (1Å) et le modèle B situé à (0Å) de la cavité large de la β -CD.

Les résultats indiquent que le complexe A plus favorable que complexe B. En fin, La résonance magnétique nucléaire du proton RMN 1H a été calculée par la méthode (GIAO) et comparée par les valeurs expérimentales. Les calculs théoriques sont conformes avec ceux obtenus expérimentalement.

Les mots clés: pesticide, PM7, cyclodextrine et RMN 1H.



THEORETICAL STUDY OF B-CYCLODEXTRIN INCLUSION COMPLEXES WITH CHLOROPHANE

Bouhadiba Abdelaziz¹, Rahim mohamed¹, Bouneb wahiba^{1,2}, Nouar Leila³, Madi fatiha³

¹Laboratory of catalysis, bioprocess and environment, Department of Process Engineering, Faculty of Technology, University of 20 August 1955, Skikda 21000, Algeria

²LRPCSI-Laboratoire de Recherche sur la Physico-Chimie des Surfaces et Interfaces, University of 20 August 1955, Skikda 21000, Algeria

³Laboratory of Computational Chemistry and nanostructure, Guelma University Address: BP: 401; Guelma, 24000, Algeria.

The interactions between chlorophane and β -Cyclodextrin (β -CD) have been analyzed employing PM6-D3, and DFT methods in vacuum and water. Complexation, deformation, HOMO and LUMO energies were determined and discussed. DFT method was used to confirm the most favorable inclusion complex structure. The favorable structure of the optimized complex indicates the existence of weak intermolecular hydrogen bonds and the most important van der Waals (vdW) interactions which are studied on the basis of Natural Bonding Orbital (NBO) analysis. The NBO is employed to compute the electronic donor–acceptor exchanges between cyanazine and β -CD.

Keywords: β -Cyclodextrin, chlorophane, PM6-D3, DFT, NBO.



**EFFET INHIBITEUR DE LA PLANTE *ORIGANUM VULGARE* SUR LA
CYCLOOXYGÉNASE 2 PAR DOCKING MOLÉCULAIRE**

Allala Ilham¹, Alem Karima², Boumendjel Amel³, Djouder Chaouki⁴

^{1,2,3,4} *Laboratoire de Biochimie et Toxicologie Environnementale, Département de Biochimie, Faculté des Sciences, Université de Badji Mokhtar, Annaba, 23000, Annaba, Algérie.*

¹allailham96@gmail.com, ²Kari_alem@yahoo.fr,

³amelibis@yahoo.fr, ⁴Chaouki.djouder@gmail.com

Résumé

L'arthrose est une maladie articulaire la plus répandue, souvent associée aux personnes âgées plus de 50 ans, elle touche les articulations et occasionne des douleurs intenses au quotidien. L'arthrose se traite par des médicaments antalgiques et anti-inflammatoires non stéroïdiens (AINS) tels que l'indométacine qui se caractérise par l'inhibition de la synthèse des prostaglandines via les deux enzymes : cyclooxygénase-1 (COX-1) et cyclooxygénase 2 (COX-2). Ce médicament possède des effets secondaires tels que la réaction d'hypersensibilité et ulcère gastroduodéal évolutif. Pour cela, nous avons fait recours aux remèdes alternatifs naturels avec moins d'effets indésirables. Notre objectif est de rechercher l'effet inhibiteur des deux principes actifs de la plante *Origanum vulgare* (carvacrol et thymol) contre celui de l'indométacine par docking moléculaire en utilisant MGLTools 1.5.7, Autodock vina 1.1.2 et Biovia Discovery Studio 2.1.1. Le docking moléculaire des deux composés naturels montre une affinité de liaison élevée du carvacrol (-6.5 Kcal/mol) et thymol (-6.3 Kcal/mol) pour le site actif de COX-2 par rapport à celle de l'indométacine qui présente une affinité de liaison de -7.2 Kcal/mol. Nos résultats valorisant l'utilisation de cette plante en phytothérapie pour ses vertus antalgiques.

Mots clés : *Origanum vulgare*, Indométacine, Cyclooxygénase 2, Docking moléculaire.



THEORETICAL STUDY OF THE ELASTIC, ELECTRONIC AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE Cs_2MF_6 (M=CR AND MO) PEROVSKITES

*Nedjouda Cheghib, Rafik Maizi**, Rabah Ksouri, Abdel-Ghani Boudjahem, Meryem Derdare
Computational Catalysis Group, Laboratory of Applied Chemistry, University of Guelma, Box 401,
24000, Guelma, Algeria.

* Corresponding author: rmaizi24@gmail.com

Abstract

Ab-initio calculations have been performed on the structural, electronic, elastic and thermodynamic properties of Cs_2MF_6 compounds (M = Cr and Ni) using the density functional theory (DFT). The exchange-correlation potential has been treated by the generalized gradient approximation (GGA) based on the Perdew-Burke-Ernzerhof function (PBE) implemented in the Quantum Espresso code. The elastic constants of the compound have been estimated and the results obtained verify the stability criteria, suggesting that the two compounds are very stable. The electronic properties of the compounds indicate that the compound Cs_2CrF_6 is a semi-metal, in contrast, the compound Cs_2NiF_6 behaves as a semiconductor. Using the quasi-harmonic Debye model implemented in the Gibbs2 program, the thermodynamic properties of Cs_2CrF_6 and Cs_2NiF_6 compounds such as the heat capacity (C_V) and the thermal expansion (α) have also been calculated and discussed.

Keywords: DFT, Quantum Espresso, perovskites, electronic, elastic, and thermodynamic properties.



MOLECULAR MODELLING STUDIES THE INTERACTIONS OF NON-STEROIDAL ANTI INFLAMMATORY DRUGS WITH B-CYCLODEXTRIN.

Lachi Nadia

Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures,
Department of Material Sciences,
Faculty of Mathematical, Informatics and Material Sciences,
University of 8 May 1945, Guelma, ALGERIA.

Lachi_n@yahoo.fr

Abstract

Non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) are commonly used to treat pain and inflammation. Ibuprofen (IBU) is a non-steroidal anti-inflammatory drug (NSAID) belonging to the propionic group, derived from arylcarboxylic acid. It has been used widely as an anti-inflammatory and anti-pyretic agent. It is slightly soluble in water. Several investigators have conducted studies to improve the dissolution rate of ibuprofen using cyclodextrin complexation. In this study, the inclusion interaction between β -cyclodextrin and ibuprofen with 1:1 stoichiometry was investigated using DFT and ONIOM methods. Two modes of complexation were considered for studying such complex. In mode A the carboxyl group of the guest was pointed toward wider side of the host (primary hydroxyl group side), while in mode B the carboxyl group was directed to the narrow side (secondary hydroxyl group side). Chemical shifts (ppm) of free and complexed IBU were calculated at B3LYP/6-31G(d) by GIAO method and compared with experimental data taken from the literature. The results obtained are in agreement with the experimental data. The natural bonding orbital (NBO) analysis is also employed to quantify the donor-acceptor interactions between the host and the guest molecule.

Key words: inclusion complex, ibuprofen, β -Cyclodextrin, ONIOM, DFT, NBO, GIAO.



**PREDICTION DE LA TOXICITE DES SUBSTANCES NATURELLES PAR LES
METHODES COMPUTATIONNELLES; EXEMPLE DE DOCKING MOLECULAIRE**
BOUCHENTOUF Salim^{1,2}

¹ Laboratory of Natural and Bioactive Substances (LASNABIO), Department of Chemistry, Faculty of Sciences, Abou Bekr Belkaïd University, P.O. Box 119, Tlemcen 13000, Algeria;

[*bouchentouf.salim@yahoo.fr](mailto:bouchentouf.salim@yahoo.fr), <https://orcid.org/0000-0002-2725-9798>

² Department of Process Engineering, Faculty of Technology, Doctor Tahar Moulay University of Saida, Algeria, BP 138 cité EN-NASR, Saïda 20000, Algeria,

salim.bouchentouf@univ-saida.dz

Nous assistons de nos jours à une utilisation avancée du Docking moléculaire qui est une méthode *in-silico* largement appliquée dans les programmes de découverte de médicaments pour prédire le mode de liaison d'une molécule donnée interagissant avec une cible biologique spécifique. Cette technique informatique émerge aujourd'hui également dans le domaine de la toxicologie prédictive en permettant l'identification rapide et efficace des substances d'origine naturelles qui pourrait présenter un risque pour la santé humaine ou l'environnement avec moins de temps et d'argent. Le Docking moléculaire peut prédire si une molécule se lie et interagit avec des protéines cibles connues pour être impliquées dans des processus toxiques. Cela peut fournir des indications sur la probabilité que la molécule cible provoque comme effets néfastes ce qui peut constituer aussi une étape de plus dans l'identification de molécules thérapeutiques. Le processus de Docking moléculaire dans le cas de la toxicologie prédictive obéit aux mêmes exigences et procédures que nécessite l'étude de l'inhibition d'une enzyme par une quelconque molécule de façon classique sauf que l'interprétation de l'énergie obtenue après Docking est interprétée inversement. La présente présentation permettra aux différents chercheurs de découvrir de plus près cette méthode ainsi que ses avantages dans la prédiction de la toxicologie et la valorisation des intérêts thérapeutiques des substances chimiques par la modélisation moléculaire. **Mots clés** : Toxicité – substances naturelles – Docking moléculaire – enzymes –scoring function



IN SILICO ET IN VITRO

Ait kaki Samira^{1,2*}, Layachi Fayçal^{1,2}, Kraim Khaireddine³, Djahoudi Abdelghani⁴, Neghra Abdelhak¹, Ferkous Foued²

¹Département de pharmacie, faculté de médecine, université Badji Mokhtar Annaba, ²Laboratoire de recherche de chimie organique appliquée, université Badji Mokhtar Annaba, ³ENSET Skikda,

⁴Laboratoire de microbiologie, faculté de médecine d'Annaba

*Kaki_samira@yahoo.fr.

Résumé :

Les substances médicinales d'origine naturelle présentent les caractéristiques d'une moindre toxicité, une plus grande sécurité, effets plus bénéfiques de manière multi-cibles et d'un meilleur potentiel de sélectivité en tant qu'inhibiteurs naturels en raison de leur vaste diversité chimique et biologique.

Parmi les méthodes de modélisation moléculaire utilisées pour la valorisation des produits naturels et la compréhension des mécanismes d'action thérapeutiques de leurs principaux composés, il ya le docking moléculaire.

Dans cette étude, réalisée au niveau du laboratoire de chimie thérapeutique et de microbiologie du Pr Djahoudi, à la faculté de médecine d'Annaba, nous avons exploré des données de la littérature pour recenser cinq composés d'une plante médicinale du sud qui étaient décrits ayant une activité antibactérienne. Nous avons par la suite réalisé une évaluation *in vitro* de l'activité antibactérienne des extraits de cette plante et une étude de modélisation moléculaire des cinq ligands bioactifs.

Dans celle-ci, nous avons choisi l'ADN gyrase, cible potentielle des antibactériens. Après l'avoir préparé au Swiss-PdbViewer, nous avons fait le docking des ligands préalablement préparé au ligprep de Schrodinger. Evidemment le protocole de docking a d'abord été validé avant de l'appliquer dans notre étude. Nous avons comparé les résultats obtenus avec la molécule de référence (l'ofloxacine).

L'activité antibactérienne basée sur la méthode par diffusion en milieu gélosé appelée l'aromatogramme a été appliquée sur 26 souches isolées de la clinique et ATCC. Un extrait butanolique et un autre obtenu par soxhlet ont été testés.

En combinant les résultats de la modélisation moléculaire avec les évaluations expérimentales de l'activité antibactérienne, cette étude a contribué à la valorisation des extraits de notre plante en fournissant des informations importantes sur les composés bioactifs et leurs propriétés thérapeutiques potentielles *in vitro* et *in silico*.

Enfin, ces résultats peuvent ouvrir de nouvelles perspectives pour le développement de produits antibactériens.

Mots-clés : docking, ADNgyrase, extraits, activité antibactérienne, ofloxacine.

STABILISATION DU CURCUMINE PAR LA B-CYCLODEXTRINE (ETUDE THEORIQUE)

Habiba BOUZIT^{a, b}, Maamar STITI ^a, Sehaïlia MOUSSA ^b, Nadia TAIBI^b, Adh'ya-eddine HAMITOUCHE ^b, Abdel-Ghani BOUDJAHM

^a *Laboratoire de Chimie Appliquée. Université 8 Mai 1945, BP 401, 24000 Guelma, Algérie.*

^b *Research Centre in Analytical Chemistry and Physics (CRAPC), BP 248, Algiers RP, Algiers 16004, Algeria*

E-mail: bouzit.habiba@gmail.com

Résumé

Les complexes d'inclusion formés à partir des cyclodextrines sont considérés parmi les structures les plus intéressantes en raison de leur diversité et le nombre important de leurs applications. . La curcumine fait preuve de magie, selon un grand nombre d'auteurs, elle est d'un pouvoir thérapeutique extrême qui peut convenir presque à toutes les maladies (anti-inflammatoire, anti-oxydante, activité antibactérienne, activité antivirale, activité antifongique, activité anti VIH, activité anti diabétique, activité anti Alzheimer, cancérologie...).

Dans le but d'améliorer les propriétés pharmacologiques et pharmacocinétiques de la curcumine , nous avons fait une simulation moléculaire de l'interaction de ce composé avec la β -cyclodextrine et étudier sa stabilité (figure 1).

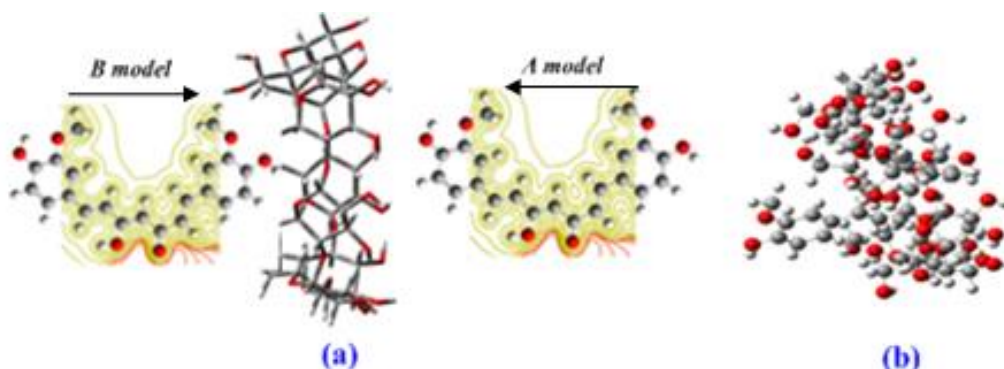


Figure.1 : a) Procédure de l'inclusion de la molécule Curcumine dans la β -CD
b) Structure du complexe Curcumine / β -CD obtenue par un calcul PM3

Mots clés : Curcumine, β -cyclodextrine, complexe d'inclusion, DFT. Modélisation moléculaire, PM3, HOMO, LUMO.

Références

- [1] L. Rivail, "Eléments de chimie quantique à l'usage des chimistes", CNRS Edition, Paris, 1999.
- [2] D. A. Mc Quarrie, J. D. Simon, "Chimie Physique, Approche Moléculaire", Dunod, Paris, 2000
- [3] M. Abdaoui, G. Dewynter, N. Aouf, G. Favre, A. Morore, J. L. Montero, *Bioorg. Med.* A. M. Fahim, M. A. Shalaby, *J. Mol. Struc.*, 2018, 08, 12.
- [4] Maria Florenzia Mazzobre et al., "Solubility and Stability of β -Cyclodextrin-Terpineol Inclusion Complex as affected by Water", *Food Biophysics*, 6, 274-280 (2011).

COMPLEXES BETWEEN ADRIAMYCIN AND CU(II)/FE(II) IONS: EXPERIMENTAL AND DFT/ B3LYP AND CAM-B3LYP STUDIES.

Rayene KADRI^{a*}, Nour HASNI^a, and Mekki KADRI^a.

^a *Laboratoire de Chimie Physique, Université 08 Mai 1945, Guelma 24000, Algérie*

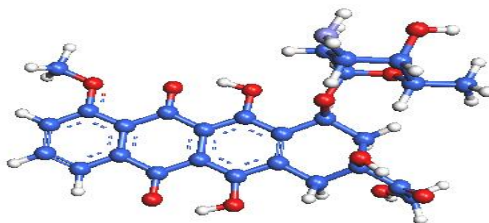
* *Corresponding author: Kadri_Rana@live.fr*

ABSTRACT

Adriamycin (ADR) has been used effectively in chemotherapy since 1963 [1,2] as an anticancer drug. Nevertheless, this molecule's adverse effect of cardiotoxicity is caused by the radical processes in which the ADR molecule engages [3].

According to previous study, it has been reported that the presence of Fe (III) and Cu (II) ions catalyzes the reaction of ADR with free radicals. This finding prompted researchers to investigate the relationship between these ions and ADR as well as the effects of ADR on radical processes [4].

The aim of the first part of this work is to investigate the Fe (III) and Cu (II) –ADR interactions with the help of the spectroscopic and thermodynamic study. Distribution diagrams of different formed chemical species were plotted, stability constants of 1:1 and 1:2 complexes then the thermodynamic quantities (ΔH^0 , ΔS^0 , ΔG^0) were computed.



The solid-state complexes were prepared in methanol solution under appropriate conditions and characterized.

Additionally, interesting insights were obtained using DFT / B3LYP and CAM-B3LYP /6.311++g (d, p) investigations. Structural parameters, vibrational frequencies, frontier orbitals properties and the global reactivity indexes were predicted with the selected theoretical levels. The detection and the visualization of the non covalent interactions were performed with the help of the NBO and the QTAIM analyses.

KEYWORDS HP- β CD, thymoquinone, inclusion complex, DFT, dispersion, HS, QTAIM, RDG.

REFERENCES

- [1] Damiani, R.M., Moura, D.J., Viau, C.M., Caceres, R.A., Henriques, J.A.P., Saffi, J., 2016. Arch. Toxicol. 90, 2063–2076.
- [2] Davies KJ, Doroshov JH (1986). J Biol Chem 261: 3060-3067.
- [3] Myers CE, McGuire WP, Liss RH, Ifrim I, Grotzinger K et al. (1977). Science 197 : 165-167.
- [4] Vincenzo Malatesta, Antonella Gervasini, Franca Morazzoni. Inor.chim.acta, 136,(1987)

**INVESTIGATION OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN INCLUSION
COMPLEXES OF PROBENECID WITH 2-HYDROXYPROPYL-B-CYCLODEXTRIN
USING DFT-D3**

Imane DJELLALA^{1*}, *Leila NOUAR*¹, *Fatiha MADI*¹

¹ *Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, university of 8 May 1945, Guelma, Algeria*

**E-mail: imane.djellala@gmail.com.*

Abstract

In the present work, a detailed computational study of probenecid with β -cyclodextrin 1:1 inclusion complex was investigated by the density functional theory including dispersion correction (DFT-D3) method using the following functional, B3LYP with the split valence double zeta 6-31G(d) basis set in both vacuum and water showed clearly that A model is more active than B. For the two models, the probenecid guest is totally embedded into the β -CD cavity. Vertical electronic transitions obtained from UV-visible calculation show the presence of intra and intermolecular transitions between probenecid and β -CD. In addition, the investigation of intermolecular interactions established between probenecid and β -CD by EDA, NBO, AIM, NCI, and IGM suggests that H-bond and van Der Waals interactions are the major contributions to stabilizing the studied inclusion complex. Finally, ¹H NMR chemical shifts were computed gage-including atomic orbital (GIAO), and compared with experimental results

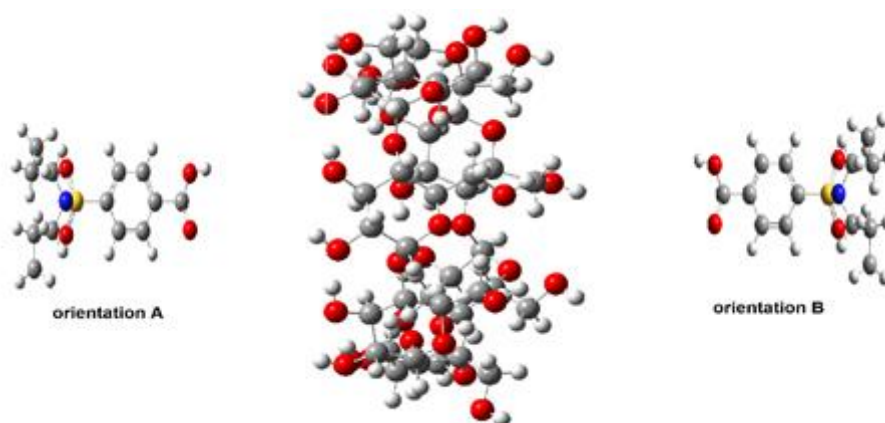


Fig 1. The two inclusion modes A and B for the PB@ β -CD complex.

Keywords: GIAO, EDA, NBO, QTAIM, NCI, IGM, β -CD

Reference:

- [1] F. Kayaci, T. Uyar, Food Chemistry 133 (2012) 641.
- [2] F. Kayaci, T. Uyar, Journal of agricultural and food chemistry 59 (2011) 11772.
- [3] S. Nata, A. S. Enkataramanan, jmgm 81(2018), 50.
- [4] I. Rozas, I. Alkorta, J. Elguero, J. Am. Chem. Soc., 122(2000)11154.

**DOCKING STUDIES OF NOVEL MONOVALENT AND BIVALENT
BENZENESULFONAMIDE INCORPORATING 1,2,3-TRIAZOLE SCAFFOLD AS
POTENTIAL CARBONIC ANHYDRASE IX AND XII INHIBITORS**

Zeyneb Ourdjini, Achour Seridi *

Laboratoire de Chimie physique, Université 8 Mai 1945, Guelma, 24000, Algérie

E-mail : ourdjini.zeyneb@gmail.com / seridi_a@yahoo.fr.**Abstract :**

Human carbonic anhydrase isoforms IX and XII have recently been identified as anticancer targets in solid hypoxic tumours. The selective inhibition of CA IX and XII isoenzymes by small-molecule CA inhibitors, such as sulfonamide derivative has been shown to inhibit many cancer models [1-3]. In this theoretical study, we performed the docking simulation by using Molegro Virtual Docker (MVD) program to investigate the inhibition of carbonic anhydrase IX and XII by a series of monovalent and bivalent benzenesulfonamide derivatives based on 1,2,3-triazole-pyridine in order to suggest its mode of inhibition into the active site of hCA IX and hCA XII and to understand some structural observations about their binding modes and their binding interaction (**Figure 1**). Our data reveals that all of the compounds we tested have exhibited a favorable docking score against hCA IX and hCA XII, suggesting a strong affinity potential for these proteins.

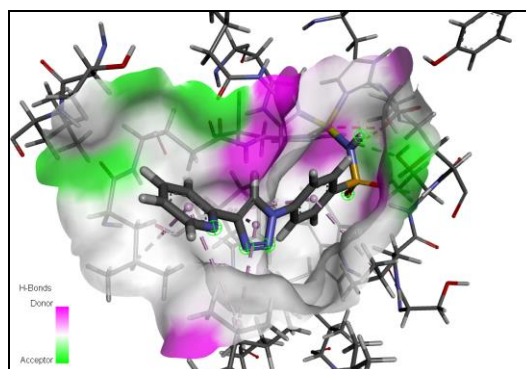


Fig.1 : The docked pose of compound (1,2,3-triazole-pyridine based monovalent benzenesulfonamide) and the residues of Side chain in the cavity of the active site hCA IX. Hydrogen bonds are indicated in dashed green lines.

Keywords : hCA IX and hCA XII, Monovalent and bivalent benzenesulfonamide, DFT, Molecular docking.

References :

- [1] Z. Ourdjini, Kh. Kraim, J-Y. Winum, E. Benoist, A. Seridi, *J. Mol. Struct.*, **2023**, 1282, 135211.
- [2] Y. Aimene, R. Eychenne, S. M-Ladeira, N. Saffon, J-Y. Winum, A. Nocentini, C. T. Supuran, E. Benoist, A. Seridi, *J. Enzym. Inhib. Med. Chem.*, **2019**, 34, 773-782.
- [3] Y. Aimene, R. Eychenne, F. Rodriguez, S. M-Ladeira, N. S-Merceron, J-Y. Winum, A. Nocentini, C. T. Supuran, E. Benoist, A. Seridi, *Crystals*. **2021**, 11(9),



CONFORMATION WITH DFT AND STRUCTURE OF 1,3-DIODO-5-CHLORO-2,4,6-TRIMETHYL-BENZENE AT 293K

Soumia Ghanemi¹, Olivier Jeannin², Ali Boudjada¹

¹Laboratoire de Cristallographie, Département de Physique, Université Mentouri Constantine 25000, Algeria, ghanemisoumia@yahoo.fr, ²UMR 6226 CNRS-Université Rennes, Sciences chimiques de Rennes, Equipe 'Matière condensée et systèmes Electroactifs', Bâtiment 10C, Campus De Beaulieu, 263 Avenue Du Général Leclerc, F-35042 Rennes, France

Halogenomethylbenzenes in particular trihalogenomesitylenes are considered as prototype systems for studying the quantum-rotational tunneling of methyl groups [1]. In addition, they own interesting properties of phase transitions due to dynamic reorientation of the molecules in their plane. Only tribromomesitylene (TBM) [2] and triiodomesitylene (TIM) [3] have been characterized so far. They crystallize at room temperature in the triclinic space group P-1 ($Z=2$). Replacing one halogen substituent by another one; the idealized symmetry of the isolated molecule (ignoring H atoms) decreases from D_{3h} to C_{2v} . In order to establish for the trihalogenomesitylene series the impact of small changes on the molecular symmetry, we report here the crystal structure of 1,3-diiodo-5-chloro-2,4,6-trimethyl-benzene (DICM) at 293 K, obtained by single-crystal X-ray diffraction. In the crystal state at room temperature, the molecule of dibromochloromesitylene present a disorder involving carbon and halogen sites (occupied identically by 67% I, 33% Cl). This disorder, of the rotational type according to previously published NMR measurements, corresponds to fast $2\pi/3$ stochastic in plane reorientation of the molecule between three discernable locations. This kind of rotational disorder can be revealed for the first time by diffractometry thanks to the C_{2v} in the title compound.

Keywords: Trihalogenomesitylene, X-ray diffraction, Disorder.

References:

1. J. Meinnel, A. Boudjada, A. Boucekkine, F. Boudjada, A. Moreac, S.F. Parker, J. Phys. Chem., 2008, **112**: 11124
2. J. Meinnel, M. Mani, A. Cousson, F. Boudjada, W. Paulus, M. Johnson, Chem. Phys., 2000 **261** : 165
3. A. Boudjada, O. Hernandez, J. Meinnel, M. Mani, W. Paulus, Acta Cryst. C, 2001, **57** : 1106



THEORETICAL STUDY OF ADSORPTION OF LEUCINE AMINO ACID ON DIAMOND LIKE CARBON COATINGS WITH DFT DISPERSION CORRECTION

Nawel Brahimi¹, Hayet Moumeni^{1,2}, Abderrafik Nemamcha³

¹ Group: Metallic materials: Energy and Environment, Laboratory of Industrial Analysis and Materials Engineering, (LAIGM), University 8 Mai 1945 Guelma, 24000, Algeria.

² Department of Matter Sciences, Faculty of Mathematics, Informatics and Matter Sciences, University 8 Mai 1945 Guelma, Algeria.

³ Group: Surfaces, Interfaces and Nanostructures, Laboratory of Industrial Analysis and Materials Engineering, (LAIGM), University 8 Mai 1945 Guelma, 24000, Algeria

brahimi.nawal@univ-guelma.dz; brahimi.nawal@gmail.com; brahimi.nawal@yahoo.com

Abstract

The interactions between Leucine (Leu) amino acid and Diamond-Like Carbon (DLC) coatings [1] were thoroughly investigated using Density Functional Theory (DFT) computational technique [2] at the B3LYP functional level and a 6.31G (d) basis set in a vacuum. This study aimed to explore the adsorption process comprehensively, covering molecular optimization, electronic properties, molecular electrostatic potential (MEP), density of states (DOS), and IR analysis. The incorporation of dispersion correction accounted for long-range Van der Waals interactions, offering a more holistic view of the bonding behavior. Additionally, the utilization of AIM analysis provided insights into the nature of intermolecular connections between the DLC surface and the adsorbed Leu molecule. The outcomes of this analysis strongly suggest that physical interactions, particularly non-covalent bonds, primarily drive the adsorption process.

Keywords: Adsorption behavior, amino acids, Diamond-Like Carbon (DLC), density functional theory (DFT)

References:

[1] K. K. Chattopadhyay and D. Banerjee, *Diamond-Like Carbon: An Efficient Cost-Effective Material for Beverage Storing*. Elsevier Inc., 2019.

[2] K. Burke, "Perspective on density functional theory," *J. Chem. Phys.*, vol. 136, no. 15, 2012, doi: 10.1063/1.4704546.



ADSORPTION OF HCOOH MOLECULE OVER THE Cu_nV ; $N = 3-8$ NANOCCLUSERS: A DFT STUDY

Mouhssin Boulbazine,^{1} Abdel-Ghani Boudjahem²*

¹ *The Division of Research in Educational Technologies, National Institute for Research in
Education, Alger, Algeria*

¹ *Computational Catalysis Group, Laboratory of Applied Chemistry, University of Guelma, Guelma,
Algeria*

*E-mail: mohcene24@gmail.com

Abstract

The stability, electronic and magnetic properties of the Cu_nV ; $n = 3-8$ nanoclusters were investigated using the PW91PW91/LANL2DZ/-311G(d,p) level of theory. The electronic sensitivity of these clusters towards the formic acid (FA) has also been evaluated. The interaction of HCOOH molecule over the Cu_nV clusters exhibits that the most favorable adsorption site for the molecule is the metal atom dopant, and the calculated adsorption energies (E_{ads}) range from -113.4 to -436.0 kJ mol^{-1} , indicating great chemisorption between both species. The values of ΔH and ΔG of the formed complexes by the adsorption of the HCOOH onto the Cu_nV clusters are found to be negative, indicating that the adsorption process is regarded as exothermic and thermodynamically realizable at room temperature. these results reveal that the Cu_nV clusters have a greatest sensitivity towards the HCOOH molecule, suggesting that this clusters could be proposed as high-performance clusters for the detection of HCOOH molecule.

Keywords: adsorption, Cu_nV clusters, DFT, sensitivity performances

DFT INVESTIGATION OF PHENOL ADSORPTION FROM WATER ON PRISTINE GRAPHENE

BOUDJAHM Ines^{1,*}, NEMAMCHA Abderrafik¹, MOUMENI Hayet^{2, 3}

1: Surfaces, Interfaces and Nanostructures, Laboratory of Industrial Analysis and Materials Engineering, (LAIGM), University 8 Mai 1945 Guelma, 24000, Algeria

2: Metallic materials: Energy and Environment, Laboratory of Industrial Analysis and Materials Engineering, (LAIGM), University 8 Mai 1945 Guelma, 24000, Algeria.

3: Department of Matter Sciences, Faculty of Mathematics, Informatics and Matter Sciences, University 8 Mai 1945 Guelma, Algeria.

*Author e-mail: bdjhmines@gmail.com , boudjahem.ines@univ-guelma.dz

ABSTRACT

Some organic compounds are known to be highly toxic posing significant health risks and causing environmental pollution [1]. Pesticides, industrial solvents, volatile organic compounds, and certain aromatic organic compounds (AOCs) such as phenol are prominent organic contaminants and water pollutants. To address this problem, various techniques such as adsorption have been employed for water purification. In this sense, the aim of the present work focuses on the study of the adsorption of phenol molecules on graphene surfaces (figure 1). Effectively, graphene is known as a promising material for adsorption applications owing to its unique properties, such as large surface area, high mechanical strength, and excellent chemical stability. In addition, it shows great potential for adsorbing aromatic organic compounds, and ongoing research. Within this context, Density Functional Theory (DFT) calculations were conducted using B3LYP functional level with a 6-311G (d,p) basis set to examine the adsorption process and its characteristics, including molecular optimization, electronic, and spectroscopic properties. Based on the obtained results, it is assumed that graphene can be considered as a good candidate for removing AOCs from wastewater.

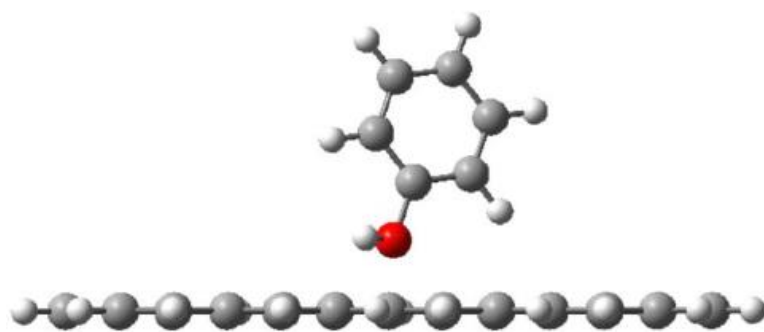


Fig.1- The initial configurations using the optimized structures.

KEYWORDS

Adsorption, Graphene, Aromatic organic compound (AOC), Phenol, Density functional theory (DFT), Environment.

REFERENCES

[1] A. Abu-Nada, A. Abdala, G. McKay, Removal of phenols and dyes from aqueous solutions using graphene and graphene composite adsorption: A review, J. of Environmental Chemical Engineering, Vol. 9, N. 5, 2021.

THEORETICAL STUDY OF BENZENE REMOVAL FROM WATER BY ADSORPTION ON THE GRAPHENE SURFACE

BOUDJAHM Ines^{1,*}, NEMAMCHA Abderrafik¹, MOUMENI Hayet^{2,3}

1: Surfaces, Interfaces and Nanostructures, Laboratory of Industrial Analysis and Materials Engineering, (LAIGM), University 8 Mai 1945 Guelma, 24000, Algeria

2: Metallic materials: Energy and Environment, Laboratory of Industrial Analysis and Materials Engineering, (LAIGM), University 8 Mai 1945 Guelma, 24000, Algeria.

3: Department of Matter Sciences, Faculty of Mathematics, Informatics and Matter Sciences, University 8 Mai 1945 Guelma, Algeria.

*Author e-mail: bdjhmynes@gmail.com.

boudjahem.ines@univ-guelma.dz.

ABSTRACT

Graphene, a single layer of carbon atoms arranged in a hexagonal lattice, has emerged as a material of unparalleled significance [1]. This two-dimensional wonder exhibits exceptional mechanical, electrical, and thermal properties, making it a focal point for groundbreaking advancements in various scientific and industrial domains [2]. In this work, we explore one of the diverse applications of graphene in the environment, which is the adsorption of aromatic organic compounds (AOCs) such as benzene molecules for water purification (figure 1). Density Functional Theory (DFT) with B3LYP correlation dispersion correction functional exchange and a 6-311++G(d,p) basis set in vacuum and water phases was used to investigate the adsorption behavior of benzene molecules on the surface of graphene. Various configurations and binding sites were selected and appraised for this molecule approaching the graphene including electronic properties (Stability, energy, hardness (η), softness (s), chemical potential (μ), and electron affinity (ω)).

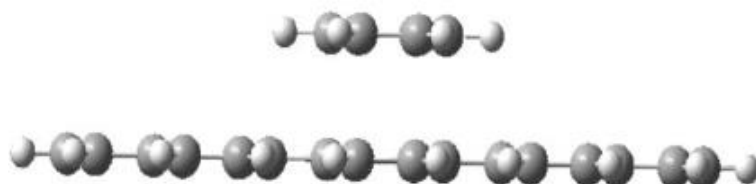


Figure. 1- The initial configurations using the optimized structures.

KEYWORDS

Water pollution, Graphene surface, Benzene, Adsorption, Density functional theory (DFT).

REFERENCES

- [1] E. E. de Moraes, M. Z. Tonelli, S. B. Fagan and M. C. Barbosa, Density functional theory study of π -aromatic interaction of benzene, phenol, catechol, dopamine isolated dimers and adsorbed on graphene surface, J.of Molecular Modeling, (2-3), 2019.
- [2] L. Kong, A. Enders, T.S. Rahman and P.A. Dowben, Molecular adsorption on graphene, J. of Physics: Condensed Matter, Vol. 26, N. 44, 2014.



ÉTUDE IN SILICO DE PRODUITS NATURELS SELECTIONNES COMME LE LIANT SARS-COV2 M^{PRO} : DOCKING MOLECULAIRE ET MOLECULAIRE SIMULATION DYNAMIQUE.

Bochra Bencheikha, Rayenne Djemil, Mouna Cherietb, et Djameleddine Khatmic

^aLaboratoire de Chimie Informatique et Nanostructures, Université du 8 mai 1945, Guelma, Algérie ;

^bUnité de Recherche sur les Plantes Médicinales (URPM.3000, Laghouat) Rattachée au Centre de Recherche en Biotechnologie (CRBt 25000, Constantine), Laghouat, Algérie ; ^cInstitut des Sciences Moléculaires ISM2, Marseille, France

b.bencheikh24@gmail.com

messdjem@gmail.com

mounacheriet@gmail.com

khatmi.djameleddine@gmail.com

Résumé

Le virus SARS-CoV-2, l'agent causal du COVID-19, constitue toujours une menace importante pour l'humanité. Découverte d'un régime médicamenteux efficace contre cette infection encore en cours de développement. Dans la présente étude, le potentiel de composés naturels sélectionnés en tant que liant du SRAS-CoV-2 M^{Pro} a été étudié en utilisant le docking moléculaire et la simulation dynamique. Les calculs chimiques quantiques ont été utilisés pour optimiser la géométrie 3D des coups. Les profils d'inhibiteurs connus ont été utilisés à des fins de comparaison. Les valeurs de Binding Energy ont montré que la majorité des ligands naturels ont une meilleure affinité pour le M^{Pro}, par rapport aux médicaments utilisés pour guérir le SRAS-CoV-2. Les propriétés biologiques et pharmacologiques de ces ligands étaient du même côté que les résultats d'amarrage et de dynamique moléculaire.

Mot clés

Inhibition du SRAS-CoV-2 M^{Pro} ; docking moléculaire ; simulations de dynamique moléculaire.



**THEORETICAL MODELING AND EXPERIMENTAL STUDIES OF ALUMINUM IN 3.0
WT.% NaCl SOLUTION CONTAINING A GREEN CORROSION INHIBITOR**

Bahloul Abida¹, Chouarfa Fella², Badi Sonia¹, Madi Fatiha¹, Nouar Leila¹

¹Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures. University May 8, 1945, P.O. Box 401
Guelma, 24000, Algeria.

²Laboratory of Industrial Analysis and Materials Engineering. University May 8, 1945, P.O. Box 401
Guelma, 24000, Algeria.

¹Corresponding author e-mail: abida_bahloul@yahoo.fr, bahloul.abida@univ-guelma.dz

Abstract

The object of this work is to evaluate the inhibitory **efficiency** of the essential oil of leaves of *Pistacia lentiscus* (EOPL) on the corrosion of commercially pure titanium (CP-Ti) in a simulated marine environment (3.0 wt. % NaCl). The inhibition effectiveness of this green corrosion inhibitor was investigated using weight loss measurement and potentiodynamic polarization in the presence of different concentrations of EOPL ranging from 0.1 to 2.0 g/L. A complementary vision of this study is obtained by means of surface characterization by scanning electron microscopy (SEM). Adsorption of the inhibitor on the titanium surface obeyed Langmuir's isotherm, the thermodynamic parameters were determined and discussed. It is found that the activation energy increases with an increase in inhibitor concentration, suggesting physisorption.

Density functional theory (DFT) calculation confirmed the formation of strong hybridization between the p-orbital of reactive sites in the inhibitor molecules and the sp-orbital of the Ti atom. The quantum chemical parameters such as the highest occupied molecular orbital energy (E_{HOMO}), the lowest unoccupied molecular orbital energy (E_{LUMO}), the energy gap (ΔE), the charge on the reactive core, the hardness (h), and the total energy have all been computed. Observable correlation was found between experimental corrosion inhibition efficiency and the theoretical data.

Keywords: Titanium, electrochemical measurements, Density functional theory (DFT), orbital energy.



OPTICAL PROPERTIES OF RUTILE TiO₂ CO-DOPED WITH NICKEL AND CERIUM

Rabie Amraouia, Mansri Abdelmalekb

- a. Laboratoire de Physique des Matériaux, Université 8 mai 1945, Guelma, Algeria.
- b. Laboratoire de Développement des Energies Nouvelles et Renouvelables dans les Zones Arides et Sahariennes, Département de Physique, Université Kasdi Merbah Ouargla, Algeria.

This paper used the first-principle calculations based on the density functional theory (DFT) to determine the electronic structure and optical absorption of rutile TiO₂ co-doped with nickel (Ni) as a transition metal and cerium (Ce) as a rare earth metal. The calculated results demonstrated that the nickel and cerium TiO₂ co-doping induced impurity energy levels above the valence band maximum (VBM). There reduced transition electrons required energy and limit the recombination rate of charge carriers, as well as prolonging their life span. Likewise, the optical spectra of TiO₂ co-doped with nickel and cerium revealed a larger photo-response for visible light than that of nickel or cerium, single doped TiO₂.

A DFT STUDY OF THE MECHANISM AND THE REGIO-STERIOSELECTIVITY OF ASYMMETRIC [3+2] CYCLOADDITION REACTION OF A CHIRAL CYCLIC NITRONE WITH α,β - UNSATURATED LACTONE

ACHOURI Rahma^{1,2}, CHIHEB Ahlam^{1,2}, MELAIS Nedjma^{1,3}, YAHIA Wassila^{1,4}. ¹Department of Chemistry, Faculty of Sciences, University of 20 August 1955 – Skikda - B.P. 26 street El-Hadaiek 21000 Skikda - Algeria.

²Physical chemistry laboratory of surfaces and interfaces -LRPCSI, University of 20 August 1955 – Skikda - B.P. 26 street El-Hadaiek 21000 Skikda - Algeria.

³Eco-compatible asymmetric catalysis laboratory, university Badji Mokhtar-Annaba, Algeria.

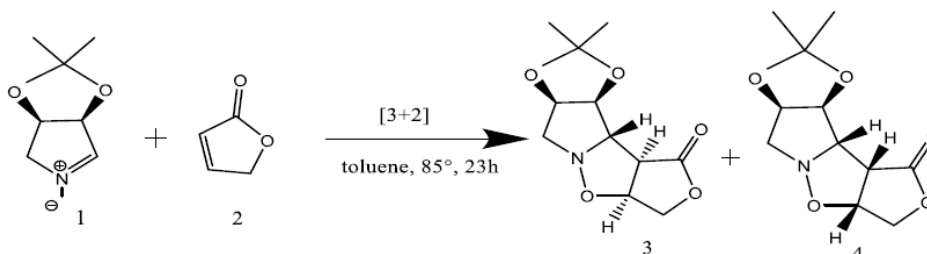
⁴Organic Synthesis and Biocatalysis Laboratory, Department of Chemistry, Faculty of Sciences, University Badji Mokhtar Annaba, BP 12 23000 Annaba, Algeria. achourirahma95@gmail.com

Abstract:

The synthesis of complex and functionally diverse molecules using simple substrates have attracted particular interest in recent days, it's an important structural part of a wide range of heterocyclic systems possessing valuable pharmacological properties. It's known that asymmetric [3+2] cycloaddition between nitrones and lactones is one of the most important methods of synthesis which is done in a regio and selective manner.

This study is about the 1,3-dipolar cycloaddition of nitrone with α,β -unsaturated lactones. When nitrone 1 was reacted with α,β -unsaturated lactone 2, a mixture of isoxazolidines 3 and 4 were obtained in an 86:14 ratio and excellent yields.

To confirm the experimental results and propose a mechanism for their formation we opted for a computational study which have been investigated using the DFT method at the theoretical level B3LYP/6-31G*.



Scheme: 1,3-Dipolar cycloaddition of nitrone 1 and α,β -unsaturated lactone 2

Key words: nitrones, α,β -unsaturated lactone, 1,3-dipolar cycloaddition, DFT calculations.

References:

1. (a)Becke, A. D. J. Chem. Phys. 1993, 98, 5648–5652; (b)Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G.Phys. Rev. B 1988, 37, 785–789.
2. (a) Parr, R. G.; Von Szentpaly, L.; Liu, S. J. Am. Chem. Soc. 1999, 121, 1922.(b) Perez, P.; Domingo, L. R.; Aurell, M. J.; Contreras, R. Tetrahedron 2003, 59, 3117.
3. Esteban A, Izquierdo I, García N, SexmeroMaríJ, Garrido NM, Marcos IS, Sanz F, Jambrina PG, Ortega P, Díez D. Tetrahedron (2019), doi: <https://doi.org/10.1016/j.tet.2019.130764>



**CHARACTERIZATION AND REACTIVITY OF Ni-Ag/Al₂O₃ NANOPARTICLES
PREPARED BY CHEMICAL METHOD**

Yasmine Mezari, Meryem. Dardare 1, Abdel-Ghani. Boudjahem 1

1 *Catalysis Group, Laboratory of Applied Chemistry, University of Guelma, Box 401, 24000,
Guelma, Algeria.*

E-mail: mezari.yasmine@hotmail.com.

ABSTRACT

In this work, the Ni-Ag/Al₂O₃ nanocatalyst were prepared by polyol method, and characterized by XRD, MET, and EDX and hydrogen chemisorption. The catalytic performance of these nanocatalysts was evaluated in the decomposition of hydrazine in the temperature range of 298-363 K. The results obtained show that the average particle size of nickel-silver nanoparticles is about 25 nm. MEB and EDX analysis confirm the presence of the nickel-silver particles on the surface of the support. The Ni-Ag/Al₂O₃ nanocatalysts are found active in decomposition of N₂H₄ molecule, and the catalytic activity has been mainly influenced by the size and shape of the bimetallic particles. It increases with decreasing the particle size. This is attributed to the increase of the number of active sites of nickel-silver over the alumina support. Furthermore, the results show also that a smooth correlation exists between the amount of stored hydrogen in Ni-Ag/Al₂O₃ nanoparticles and the metal dispersion on the surface of the catalysts.

KEY WORDS: Nanoparticles, nickel, silver, polyol, N₂H₄ decomposition, catalytic activity



STABILITY AND ELECTRONIC PROPERTIES OF IR-DOPED VANADIUM NANOMATERIALS AND THEIR INTERACTION WITH N₂H₄ MOLECULE: A THEORETICAL STUDY

Meryem Derdare¹, Nedjwa Cheghib¹, Yasmine Mezari¹, Abdel-Ghani Boudjahem¹
*1Computational Catalysis Group, Laboratory of Applied Chemistry, University of Guelma, Box 401,
24000, Guelma, Algeria.*

E-mail : meryemderdare30@gmail.com.

Abstract:

DFT calculations were performed on the Ir_xV nanoclusters in order to determine their stability, electronic, and catalytic properties. Based on the fragmentation energy (ΔE_f) and the second-order difference energy ($\Delta^2 E$), the results show that the V-doped iridium clusters with sizes of $n = 5$ and 7 were found more stable than their neighboring clusters. Our results also exhibit that the calculated energy gaps (E_g) for these clusters are in the range 0.074 - 0.603 eV, indicating that the metallic character can manifest in these clusters. Thus, these nanoclusters can be employed like nanocatalysts in many catalytic reactions. MEP analysis exhibits that the highest positive charge resides on the V atom, thus the V atom in the binary clusters can be considered as the most active site for the nucleophilic attack. So, it represents a favourable electrophilic adsorption site that can strongly interact with the electron-rich molecules. The influence of the N₂H₄ adsorption over the electronic properties of Ir_xV clusters was also investigated. The results show that the adsorption energies (E_{ad}) vary between -21.3 and -46.6 kcal mol⁻¹, suggesting a chemical adsorption in nature.

Key words: Stability, electronic properties, IrV clusters, N₂H₄ molecule.



THEORETICAL INVESTIGATION OF HOST GUEST INTERACTIONS BETWEEN MDA AND β -CYCLODEXTRIN

Houria bouchemella¹, fatiha madi² and Leila Nouar³

¹ Department of Process Engineering, Faculty of science and technology, Laboratory of computational chemistry and Nanostructure, University 08 Mai 1945, Guelma, Algeria.

² Department of Materiel Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics and Materiel, University 8 Mai 1945, Guelma, Algeria.

³ Department of Materiel Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics and Materiel, University 8 Mai 1945, Guelma, Algeria.

(bouchemella_h@hotmail.it.)

Abstract

- The purpose of this research was to investigate the inclusion complex formation between 4,4'-methylene-bis(N,N-dimethylaniline) (MBDA) and β -cyclodextrin (β -CD). for that purpose a model of the inclusion complex of Methylene Dianiline in β -cyclodextrin (β -CD) has been studied by B3LYP/6-31G and ω B97X-D/6-31G levels of theory in vacuum and in water. Analyses were carried out to obtain more information about the nature of the interaction between MBDA and β -CD. The negative value of the complexation energy and the absence of imaginary frequencies in its infrared spectrum indicate that the studied complex is stable and at its global minimum. Visualisation of the optimised structures and NBO analysis showed complete incorporation of the guest into the β -CD cavity with the formation of physical hydrogen bonds between the two molecules.

Keyword: β -CD, DFT, TD-DFT, NBO.



MOLECULAR DOCKING, ADMET, DFT STUDIES OF N-NAPHTOYL AND 6-NAPHTOYL-2(3H)-BENZOXAZOLONE

Hanen Nessaibia^{*1} and *Faouzi Guenadil*¹

¹ *Chemistry Laboratory, Department of Chemistry, Chadli Bendjedid University El tarf, Bp: 73 El tarf 36000.*

h.nessaibia@univ-eltarf.dz

ABSTRACT: To investigate the electronic, structural properties and chemical reactivity of N-naphtoyl and 6-naphtoyl-2(3H)-Benzoxazolone, a theoretical study of these compounds was carried out using the density functional theory (DFT) method, These compounds were optimized using Gaussian 09 software with the B3LYP/6-31G(d,p) level basis set. This optimization was performed to determine HOMO-LUMO energies, molecular electrostatic potential, and geometric optimization parameters; Additionally energie gap and global descriptors (Electronegativity (χ) chemical potential (μ), global hardness (η), globalsoftness (S) and electrophilicity index (w)) were calculated. On the other hands Docking molecular study was carried to analyze The interactions and binding affinities between these compounds and the binding site of Staphylococcus aureus tyrosyl-tRNA synthetase. This examination aimed to predict the antibacterial properties of these compounds by understanding how they interact with this bacterial protein. Moreover, Pharmacokinetic properties (Drug- Likeness) and Toxicity of this two compounds were predicted.

Keywords: N-Nephtoyle and 6-Nephtoyle-2(3H)-Benzoxazolone, Antimicrobial, Molecular docking, ADMET, DFT analysis.



ANALYSIS AND CONTROL OF THE MAGNETO-HYDRODYNAMIC PUMP

Fatima MERDJ¹, Said DRID²

¹Batna 2 University, Electrical Engineering Department, Batna 05000, Algeria

²Batna 2 University, Electrical Engineering Department, Batna 05000, Algeria

merdj.fat@gmail.com,

s.drid@univ-batna2.dz.

Abstract

The magnetohydrodynamic pump is a desirable option, especially for applications in medicine. The applied magnetic field in an MHD pump generates an electromagnetic force that drives fluid flow. The primary benefit of the MHD pump is that it can be applied directly to veins and has no moving or mechanical parts. This research examines the behaviour of blood in the MHD micropump. A permanent neodymium magnet subjected the MHD micropump's channel to a magnetic field. This numerical study investigates the effects of electrode potentials, flux magnetic density, and channel dimensions on blood velocity. A low-voltage source can be used to control this micropump. The numerical simulation study for the selected model was put into practice to confirm the micropump's operation. The magnetic and electrical fields significantly influence blood velocity in the MHD micropump. Software for finite element modelling was employed in this study.

Keywords: *microsystems, micropumps, magnetohydrodynamic (MHD), DC MHD, Lorentz force.*

A THEORETICAL STUDY OF ELECTRONIC STRUCTURE AND OPTICAL PROPERTIES OF SQUARE PLANAR PLATINUM(II) AND NEWLY DESIGNED NICKEL(II) COMPLEXES

Oumnia Racha Selmi ¹, Rabie Djouama ², Hanane Djouama ¹, Desmond MacLeod-Carey Castro ³

¹Applied Chemistry Laboratory, Faculty of Sciences, Chemistry Department, University of Mohamed Khider, Biskra, Algeria

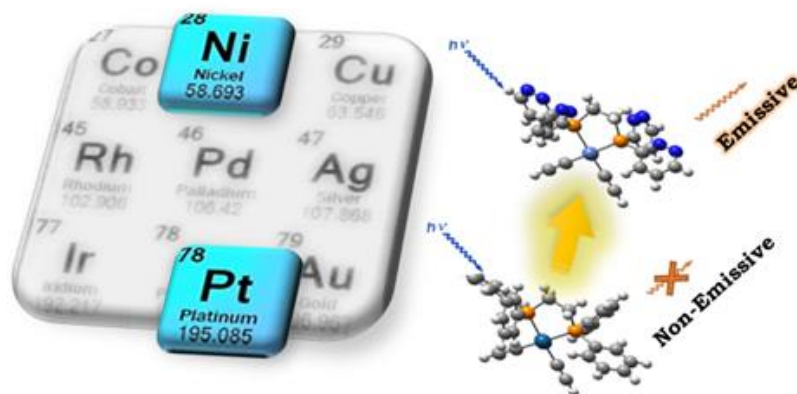
²LCPM Laboratory, Faculty of Sciences, Chemistry Department, University of Oran 1 Ahmed Ben Bella, Oran, Algeria.

³Inorganic Chemistry and Molecular Materials Center, Faculty of Engineering, Institute of Applied Chemical Sciences, Autonomous University of Chile. El Llano Subercaseaux 2801, San Miguel, Santiago – CHILE.

Email: oumniracha.selmi@univ-biskra.dz

ABSTRACT

In the field of luminescent materials, alkynyl metal square planar complexes have recently attracted a lot of interest because of their intriguing photophysical characteristics and potential applications. In this work, the structural, electronic and optical properties of (dppe)Pt-(C≡CH)₂(**1**) and (dppe)Ni-(C≡CH)₂(**2**) complexes were studied using DFT-based quantum calculations. The results of the DFT and TD-DFT calculations of the singular and triplet states of molecular geometry, were used to evaluate the factors influencing the emission energy. These new theoretical data of increasing interest are a considerable help for the advancement of luminescent models.





ENCAPSULATION OF MENTHOL IN β -CYCLODEXTRIN AND RELEASE CHARACTERISTICS OF THE INCLUSION COMPLEX

Bahloul Abida¹, Bouchemela Houria¹, Badi Sonia¹, Madi Fatiha¹, Nouar Leila¹

¹Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, University May 8, 1945, P.O. Box 401
Guelma, 24000, Algeria

abida_bahloul@yahoo.fr, bahloul.abida@univ-guelma.dz

Abstract

Cyclodextrins are capable of forming non covalent host-guest inclusion complexation with of molecules in order to enhance water-solubility and thermal stability such hydrophobic and volatile molecules. Menthol has been widely used in flavour, food and pharmaceuticals. Because of its high volatility and whisker growth, menthol- β -cyclodextrin inclusion complex was produced to improve shelf-life, provide protection, and enhance the stability of l-menthol. In the present work, a detailed computational study of menthol@ β -CD 1:1 inclusion complex was investigated. Firstly, the favor geometry of Menthol@ β -CD inclusion complex was located by PM6-DH+ semi empirical calculation for A and B models. Then, the reactivity parameters calculated by B3LYP/6-311G(d, p), ω B97xD/6-311G(d, p) and M06-2x/6-311G(d, p) in both vacuum and water showed clearly that B model is more active than A one.

Vertical electronic transitions obtained from UV-visible calculation show the presence of intra and intermolecular transitions between Menthol and β -CD. In addition, the investigation of intermolecular interactions established between Menthol and β -CD by: NBO, NCI suggest that H-bond and van Der Waals interactions are the major contributions stabilizing the studied inclusion complex.

Keywords: Inclusion complex, **menthol**, β -cyclodextrin, Molecular modeling.



**CHEMICAL COMPOSITIONS AND MOLECULAR MODELLING OF ANETHUM
GRAVEOLENS ESSENTIAL OILS**

Abdelmadjid saidani¹, Berreghioua Abdelaziz², Nasser Belboukhari¹, Khaled Sekkoum¹

¹Bioactive Molecules and chiral separation Laboratory (BMCSL), PO Box 417, University of Bechar, 08000, Algeria

² Chemistry and Environmental Science Laboratory (LCSE) Faculty of Exact Sciences, University Tahri Mohamed of Bechar, PO Box 417, Bechar, 08000, Algeria

* **Email:**, saidani.abdelmadjid@univ-bechar.dz

Keywords: *Anethum graveolens*, GC-MS, Anti-eczematic activity. Molecular operating environment (MOE)

Abstract

Anethum graveolens is an annual aromatic grass belonging to the Apiacea family known by several names including soya, sowa[1]

The herb was collected from the thagit area 90km about Bechar. The essential oil was obtained by hydrodistillation[2] the volatile chemical components of the essential oils was analyzed by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS).

The main compound found in *Anethum graveolens* oil against anti-eczematic[3] activity The main compound found in *Anethum graveolens* oil was tested against the anti-eczematic activity and the results showed that the compound was very effective against score (-4.3368) and was associated at three sites with the following amino acids Tyr ,Thar ,Asp,



SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, DFT STUDY AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF (E)-4-(((4-HYDROXYPHENYL)IMINO)METHYL)-2-METHOXYPHENOL

Marwa BENMABROUK ^{1*}, Saida SERIDI ¹, Manal CHETTIBI ¹

¹ *Laboratory of Physical Chemistry, University of 8 Mai 1945, BP 401, Guelma, Algeria*

*Corresponding Author : benmabrouk.marwa@univ-gelma.dz.

Abstract:

Schiff bases, chemical compounds arising from the condensation of aldehydes or ketones with amines, are known for their diverse biological activities and ability to scavenge free radicals. In this study, we synthesized and characterized a specific Schiff base compound, namely (E)-4-(((4-hydroxyphenyl)imino)methyl)-2-methoxyphenol, utilizing IR and UV-vis techniques. The resultant empirical data were compared against theoretically simulated spectra. Employing the DFT/B3LYP/6-311+G(d,p) methodology, we probed the energies of the highest occupied molecular orbital (HOMO) and the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO), alongside exploring global chemical reactivity descriptors and electrostatic potential (MEP) for the aforementioned compound. The antioxidant efficacy of the Schiff base compound was assessed via a 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl (DPPH) free radical scavenging assay. Furthermore, a density functional theory (DFT) based theoretical investigation was undertaken to illuminate the mechanism underlying DPPH free radical scavenging. This analysis encompassed both gas phase and methanol environments. The study considered three primary mechanisms: hydrogen atom transfer (HAT), stepwise electron-transfer-proton-transfer (ET-PT), and sequential-proton-loss-electron-transfer (SPLET). Key parameters such as O-H bond dissociation enthalpy (BDE), ionization potential (IP), proton affinity (PA), and electron transfer energy (ETE) were computed to gain insight into these mechanisms. The theoretical findings underscore the significant influence of the hydroxy group on ring B in enhancing the antioxidant properties of the examined compound. These results align closely with the experimental data. The calculated results suggest that in a gaseous environment, HAT emerges as the most favorable mechanism for the compound's radical-scavenging activity. Conversely, in a polar medium such as methanol, SPLET mechanism is thermodynamically favored. Ultimately, the obtained results from this research are expected to provide valuable insights into the design and refinement of novel antioxidant compounds



FLAV-3-ENE MEDIATED INHIBITION OF PROTEIN KINASE 1AQ1 : A MOLECULAR DOCKING ANALYSIS

Ridha BOUDKHIL¹, Mohamed BOUKAR¹ Nasser BELBOUKHARI¹ Khaled SEKKOUM¹
*Bioactive Molecules and Chiral Separation Laboratory, Faculty of exact sciences, Tahri Mohammed
University, Istiklal street PO 417 Bechar, 08000, Algeria.*

boudkhil.ridha@univ-bechar.dz

Flavonoids, renowned for their diverse structures, are abundant in fruits, herbs, stems, cereals, nuts, vegetables, flowers, and seeds [2,3]. Their bioactivity, derived from phytochemical constituents, has led to the identification of over 10,000 compounds, many with recognized therapeutic properties [1,5,6]. Synthesized naturally through the phenylpropanoid pathway, flavonoids' bioactivity is contingent on absorption mechanisms and bioavailability [7].

Beyond their roles as natural dyes and cosmetic ingredients, flavonoids shine in medicine. They exhibit a spectrum of activities, serving as anticancer, antimicrobial, antiviral, antiangiogenic, antimalarial, antioxidant, neuroprotective, antitumor, and anti-proliferative agents [8-9]. Notably, extracts from apple peel rich in flavonoids display antihypertensive properties and contribute to preventing cardio-metabolic disorders, showcasing their potential health benefits.

The study utilized ligands from literature, including the flavonoid derivative “Flav3ene”. Molecular structures were recreated with ChemDraw, converted to MOE-compatible mol format, and subjected to 3D protonation and energy minimization.

Molecular docking focused on the protein kinase 1AQ1 (Human Cyclin Dependent Kinase 2 Complexed with The Inhibitor Staurosporine) from Homo sapiens. Receptor preparation involved adding polar hydrogens, and ligand interactions were evaluated using rescoring1 (London dG) and rescoring2 (GBVI/WSA dG). The study stored results, encompassing docking scores and ligand properties, for subsequent analysis.

Molecular docking is a widely used technique to predict the binding interactions of small molecules and potential drug candidates with their protein targets, providing crucial insights into their affinity and activity. In our docking studies, it was observed that molecules like Flav-3-ene exhibit interactions with the enzyme across three distinct binding sites. The first interaction involves a backbone donor bond with Leu 83, while the second and third bonds are characterized by an arene-H interaction with Gln 85 and Val 18, respectively. These findings not only affirm Flav-3-ene as an enzyme inhibitor but also contribute valuable insights into the structure-function relationship of flavonoids in inhibiting protein kinase activity.

Keywords: Flav3ene, Protein Kinase, residue, Molecular docking; inhibition mechanism

References:

1. Thilakarathna, S.; Rupasinghe, H. Flavonoid Bioavailability and Attempts for Bioavailability Enhancement. *Nutrients* 2013, 5, 3367–3387.
2. Aleksandra Kozłowska, D.S.-W. Flavonoids-food sources and health benefits. *Rocz. Panstw. Zakl. Hig.* 2014, 65, 65.
3. Pandey, K.B.; Rizvi, S.I. Plant polyphenols as dietary antioxidants in human health and disease. *Oxid. Med. Cell Longev.* 2009, 2, 270–278.
4. Zhao, L.; Yuan, X.; Wang, J.; Feng, Y.; Ji, F.; Li, Z.; Bian, J. A review on flavones targeting serine/threonine protein kinases for potential anticancer drugs. *Bioorganic Med. Chem.* 2019, 27, 677–685.
5. Zhao, K.; Yuan, Y.; Lin, B.; Miao, Z.; Li, Z.; Guo, Q.; Lu, N. LW-215, a newly synthesized flavonoid, exhibits potent anti-angiogenic activity in vitro and in vivo. *Gene* 2018, 642, 533–541.
6. Camero, C.M.; Germanò, M.P.; Rapisarda, A.; D’Angelo, V.; Amira, S.; Benchikh, F.; Braca, A.; De Leo, M. Anti-angiogenic activity of iridoids from *Galium tunetanum*. *Rev. Bras. de Farmacogn.* 2018, 28, 374–377.

STRUCTURAL STUDY, UV/VIS AND EXCITED STATE OF BIOCERAMIC

Chams Edoha Labidi¹, Oum kelthom Kribaa¹, Rabie Djouama²

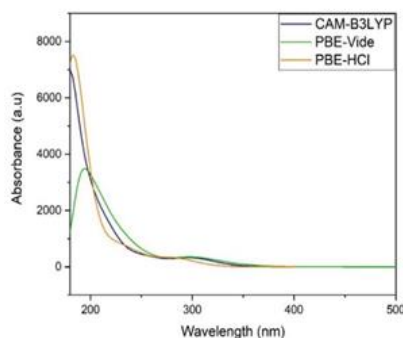
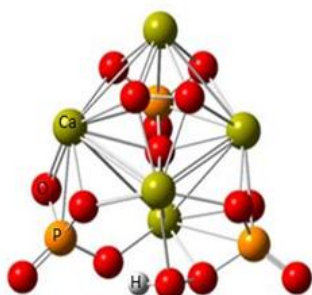
¹ University of Mohamed Khider, Biskra, Algeria

² University of Oran 1 Ahmed Ben Bella, Oran, Algeria.

Email: chamsedoha.labidi@univ-biskra.dz

Abstract

Hydroxyapatite $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ also known as (Hap), is a biomaterial with superior biocompatibility and bioactivity due to similarities with the mineral phase of bones and teeth (bioapatite) [1]. It is widely used in medical fields such as organ transplants, drug delivery systems, and implants to replace amputated bone in tissues. The geometry of the complex isolated using several density functional theory (DFT) method was optimized in open air and in various solvents. TD-DFT calculations were carried out in order to obtain The UV–visible absorption spectra of the complex and to determine the excitation energies and the associated oscillator forces of the studied complex, in order to deduce their electronic spectra. Theoretical absorption spectra were obtained using Gauss View software and the origin.



Keywords: DFT, TD-DFT, Absorption spectra, Hydroxyapatite, Biomaterial.

REFERENCES:

[1] M. Vallet-Regí, J.M. Gonzalez-Calbet. J. Prog. Solid State Chem. 32 (2004) 1-31.

**A COMPUTATIONAL STUDY OF THE MECHANISM AND SELECTIVITIES
CYCLOADDITION OF NITRONES TO INDOLYL-AND PYRROLYLACRYLATES**

CHIHEB Ahlam^{1,2}, YAHIA Wassila^{1,3}, ACHOURI Rahma^{1,2} *1Organic chemistry specialty
, Department of Chemistry, Faculty of Sciences , University of 20 August 1955 – Skikda - B.P. 26
street El-Hadaiek 21000 Skikda - Algeria.*

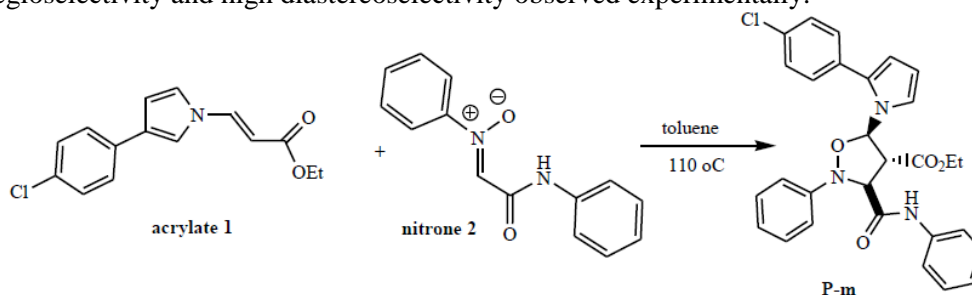
*2Physical chemistry laboratory of surfaces and interfaces -LRPCSI, University of 20 August 1955 –
Skikda- Algeria*

*3Organic Synthesis and Biocatalysis Laboratory, Department of Chemistry, Faculty of Sciences
, University Badji Mokhtar Annaba, BP 12 23000 Annaba, Algeria.*

E-mail: ahlamchiheb1997@gmail.com.

Abstract:

The B3LYP/6-311+ G(d,p) DFT method was used for the study of the mechanism and the regioselectivity and stereoselectivity of the [3+2] cycloaddition reaction between acrylate **1** with nitrone **2** (scheme). In gas phase and toluene, this [3+2] cycloaddition reaction is characterized by a completely meta regioselectivity and high diastereoselectivity. Analysis of thermodynamic characters indicates that by the inclusion of the experimental conditions, the reaction becomes endergonic and therefore under thermodynamic control favoring the formation of the most stable product observed experimentally. The analysis of the global electron density transfer (GEDT) at the transition states and bond order (BO) show that this reaction takes place via one-step synchronous and non-polar mechanism. While local Parr functions analysis allows us to explain the meta regioselectivity and high diastereoselectivity observed experimentally.



Scheme: 1,3-Dipolar cycloaddition of acrylate **1** and nitrone **2**

Key words: nitrones, acrylate, cycloaddition, Isoxazolidines, DFT, regioselectivity.

References:

1. Dmitriy D. Karcev , Mariia M. Efremova , Alexander P. Molchanov et al. Selective and Reversible 1,3-Dipolar Cycloaddition of 2-(2-Oxoindoline-3-ylidene)acetates with Nitrones in the Synthesis of Functionalized Spiroisoxazolidines. *Int. J. Mol. Sci.* (2022), 23, 12639.
2. Viktor A. Dmitriev , Mariia M. Efremova , Alexander S. Novikov , Vladimir V. Zarubaev , Alexander V. Slita , Anastasia V. Galochkina , et al. Highly efficient and stereoselective cycloaddition of nitrones to indolyl- and pyrrolylacrylates. *Tetrahedron Letters* (2018), 592327–2331.
3. Domingo, L.R.; Ríos-Gutiérrez, M.; Pérez, P. A molecular electron density theory study of the reactivity and selectivities in [3+ 2] cycloaddition reactions of C, N-dialkyl nitrones with ethylene derivatives. *J. Org. Chem.* (2018), 83, 2182–2197.



ANNONA MURICATA ALKALOID ANTIDEPRESSANT EFFECTS: MOLECULAR DOCKING AND DFT STUDY

Sabri Mecheri^{1*}, Hacene Nemdili², Mohamed Amine Zerizer^{1,2}, Bachir Zouchoune^{1,2}

¹Laboratoire de Chimie Appliquée et Technologie des Matériaux, Université Larbi Ben M'hidi Oum el Bouaghi, 04000 Oum El Bouaghi, Algeria.

²Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale, Université de Constantine-1 (Mentouri), 25000 Constantine, Algeria.

*e-mail : one-sabri@hotmail.fr

Abstract:

We have been choosing a several natural products of *Graviola* leaves named annonaine nornuciferine asimilobine for their anti-inflammatory, anticancer and the serotonergic 5-HT1A affinity. However, the density functional theory calculation and molecular docking analysis were carried out for these natural products to estimate their biological activities for the inhibition of 5-HT1A. The global and local chemical reactivity descriptors such as HOMO-LUMO gaps, chemical hardness, chemical potential, electrophilicity, dipole moment and Fukui functions were calculated and correlated to predict its biological activities against 5-HT1A receptor. The molecular docking results indicated evidently the binding of ligands to the 5-HT1A receptor, that strongly agrees with the molecular structures and the type of substituents.

Keywords: Annonaine nornuciferine asimilobine density functional, Fukui Functions, dipole moment, molecular docking

METALLIC COMPLEX BETWEEN N-METHYL THIO SEMICARBAZIDE SCHIFF BASE LIGAND AND CO(II): DFT/M06-2X AND DOCKING INVESTIGATIONS

Nour HASNI^{a,*}, Rayene KADRI^a, Mekki KADRI^a

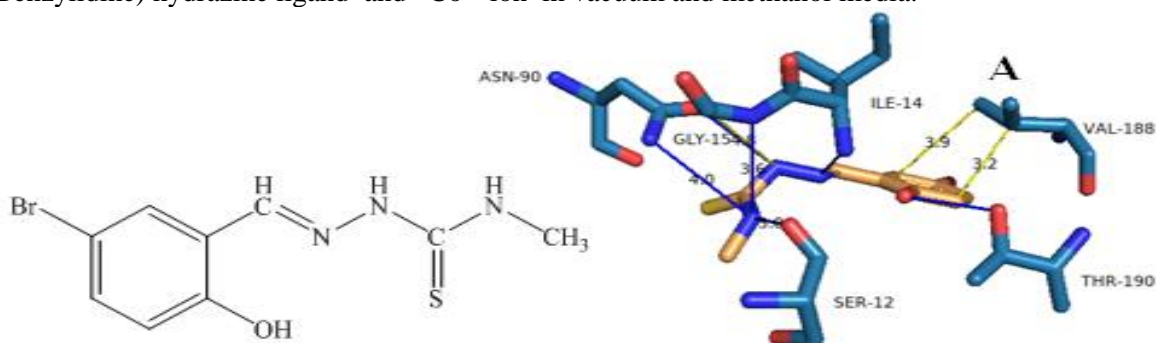
^a Laboratoire de Chimie Physique, Université 8 Mai 1945, 24000 Guelma, Algérie

*E-mail address: nourhsn234@gmail.com

Abstract

Metal complexes with Schiff base ligands have a wide range of biological applications in different fields as it contains azomethine linkage which provides an opportunity for biological activities [1]. Thiosemicarbazone derivatives proved to be more potent in various applications [2]. Thiosemicarbazone derivatives with salicylaldehyde possess excellent pharmacological activities like anti-inflammatory, anti-cancer, anti-microbial, anti-HIV and also pesticides and insecticidal activities” [3,4].

In this work the formation of resulting complexes between (2Z)-2-(2-Hydroxy-5-Bromo Benzylidene) hydrazine ligand and Co²⁺ ion in vacuum and methanol media.



The main findings performed at DFT/M06-2X/6.311++g(d,p) level, were obtained according to several calculations, in the two media, such as predictions of structural parameters, vibrational frequencies, Mulliken charge distribution, frontier orbitals and the global reactivity indexes. The non covalent interactions were investigated using the NBO and the QTAIM analyses. Additionally, docking calculations showed that the ligand and the corresponding exhibited significant anti-cancer affinities.

References

- [1] D.Guibedj, H.Bougherara, M.Kadri, H.Akkari, M.Berredjem, A. Khaled, , J. Mol. Struct. 1202(2020) 127191,
- [2] A.Khaled , R.Kadri , M. Kadri, M.Berredjem, , J.Mol.Struct.1263(2022) 133003,
- [3] A.Boughougal, R.Kadri, M. Kadri, J. B.Tommasino, G. Pilet, A. Messai , D. Luneau, J. Mol. Struct. 1282(2023) 135141
- [4] H.Bougherara ,R.Kadri,M.Kadri , M.Yekhlef , A.C. Boumaza, Mol. Struct. 1223 (2021) 128855,



**PHARMACOPHORE-BASED VIRTUEL SCREENING, MOLECULAR DOCKING, AND
MOLECULAR DYNAMICS STUDIES FOR THE DISCOVERY OF THE NOVEL FLT3
INHIBITORS**

Anede Nada¹, Ouassaf Mebarka¹

¹*Group of Computational and Medicinal Chemistry, LMCE Laboratory, University of Biskra,
Biskra, Algeria*

Abstract

FLT3 is considered a potential target of acute myeloid leukemia therapy. In this study, we applied a computer-aided methodology unifying molecular docking and pharmacophore screening to identify potent inhibitors against FLT3. To investigate the pharmacophore area and binding mechanism of FLT3, the reported co-crystallized Gilteritinib ligand was docked into the active site using Glide XP. Based on the docking results, we identified structure-based pharmacophore characteristics resistant to potent FLT3 inhibitors. The best hypothesis was corroborated using test and decoy sets, and the verified hypo was utilized to screen the chemical database. The hits from the pharmacophore-based screening were then screened again using a structure-based method that included molecular docking at various precisions; the selected molecules were further examined and refined using drug-like filter and ADMET analysis. Finally, two hits were picked out for molecular dynamic simulation. The results showed two hits were expected to have potent inhibitory activity and excellent ADMET characteristics, and they might be used as new leads in the development of FLT3 inhibitors.

Keywords: FLT3 inhibitors; Gilteritinib; E-pharmacophore; molecular docking; dynamic simulation.

SYNTHESIS AND MOLECULAR DOCKING STUDY IN TARGETING CARBONIC ANHYDRASE II FOR CANCER THERAPEUTICS

DEKIR Ali^{1*}, GRIB Ismahene¹, BERREDJEM Malika¹

¹ *Laboratory of Applied Organic Chemistry LCOA, Synthesis of biomolecules and molecular modelling Group, Badji-Mokhtar - Annaba University, Box 12, 23000 Annaba, Algeria.*

Sulfonamides are important therapeutic agents and have a diverse array of biological functions in biology and medicine. They are known as sulfa drugs and were the main source of therapy against bacterial infections before the introduction of penicillin in 1941 [1]. They are also known to inhibit the enzyme carbonic anhydrase (CA). Based on this strategy, a new series of amino acid ethyl ester – sulfonamide derivatives have been synthesized. These compounds were prepared by the reacting of carbamate of chlorosulfonyl 2 with different amino acid ethyl ester. Also, we docked our synthesized sulfonamides (Figure 1) against carbonic anhydrase II enzyme (CA II) to evaluate the affinity and the binding modes of these compounds within the active site of the enzyme using molecular docking study.

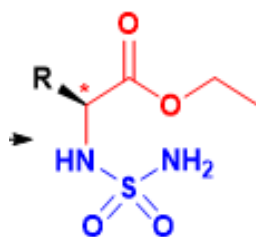


Figure 1. General structure of synthesized sulfonamides

Keywords: Sulfonamides, carbonic anhydrase, molecular docking

References

1. Patrick, G. In *An Introduction to Medicinal Chemistry 2nd ed.* Oxford university press; 2001; pg 3 387.
2. 3. Casini, A.; Scozzafava, A.; Mastrolorenzo, A.; Supuran, T. *Current Cancer Drug Targets* 2002, 2, 55-75. 4. Vullo, D.; Franchi, M.; Gallori, E.; Pastorek, J.; Scozzafava, A.; Pastorekova, S.; Supuran, C. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2003,13, 1005-1009

EFFECT OF DOPING C20 SMALL FULLERENE WITH SINGLE AND MULTI-GOLD ATOM: A DFT STUDY

REMOUGUI Chaima Basma 1, BOUDJAHM Ines1, NEMAMCHA Abdarrafiq1,
MOUMENI Hayet 2,3

1Group: Surfaces, Interfaces and Nanostructures, Laboratory of Industrial Analysis and
Materials Engineering, (LAIGM), University 8 Mai 1945 Guelma, 24000, Algeria.

2Group: Metallic materials: Energy and Environment, Laboratory of Industrial Analysis and
Materials Engineering, (LAIGM), University 8 Mai 1945 Guelma, 24000, Algeria.

3 Department of Matter Sciences, Faculty of Mathematics, Informatics and Matter Sciences,
University 8 Mai 1945 Guelma, Algeria.

Author E-mail: chaymaremougui23@gmail.com

ABSTRACT:

Doping carbon fullerenes with external metals is one of the more recent approaches for enhancing the performance and features of fullerene structures for a variety of applications [1], [2]. In this context, DFT calculations were performed for single and multi-gold doped C20 fullerene Aun ($n=1, 2, 3,$ and 4), using the B3LYP functional and 6-31G(d) basis in order to improve the optic and electronic properties of C20 fullerenes by doping (Fig.1). The Au_4C_{16} doped system, has the highest interaction energy and the lowest gap energy, demonstrating the conducting behaviour of this newly developed complex. For single Au doping, the gap energy is increased, but in all Aun ($n=2, 3,$ and 4)-doped cages, it is significantly decreased. A Mulliken charge investigation is performed to confirm the charge transfer from the metal to the cage. The total density of states (TDOS) spectra of the doped cages provides evidence that extra electrons in the complex surface involve new HOMO orbitals (new energy state). First hyperpolarizability is markedly raised when Au atoms are added with high concentrations during doping. The outcomes of this investigation offer recommendations for the development of thermodynamically stable, highly effective nanocages for optical and optoelectronic applications.

KEYWORDS: Density functional theory (DFT), Au, C20 Fullerene, doping, concentration effect
GRAPHICAL ABSTRACT

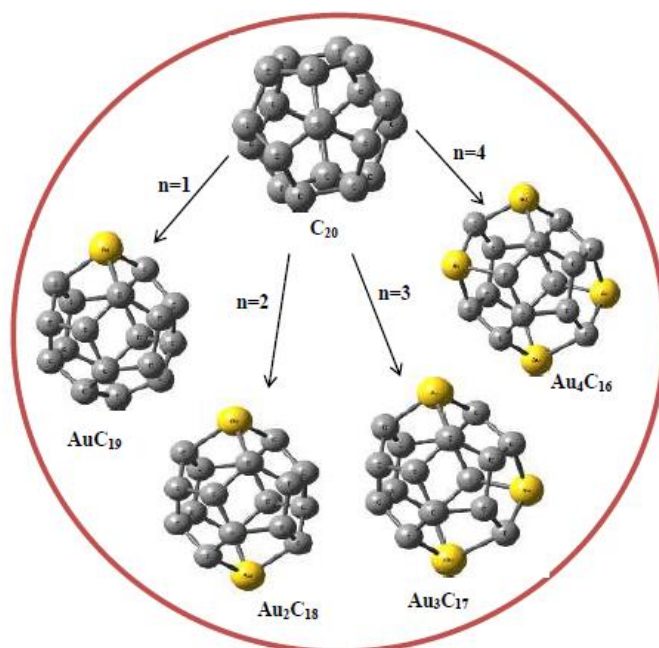


Figure 1. Doping C20 fullerene with single and multi-gold atoms $AunC_{20-n}$ ($n=1, 2, 3,$ and 4)



REFERENCES

- [1] N. Kosar, H. Tahir, K. Ayub, M. Amjad, M. Imran, and T. Mahmood, “Materials Science in Semiconductor Processing Remarkable nonlinear optical response of $M_n @ C_{20}$ ($M = Na \& K$ and $n = 1 - 6$); a DFT outcome,” *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 138, no. March 2021, p. 106269, 2022, doi: 10.1016/j.mssp.2021.106269.
- [2] M. Sadeghi, A. Yousefi Siavoshani, M. Bazargani, A. T. Jalil, M. Ramezani, and M. R. Poor Heravi, “Dichlorosilane adsorption on the Al, Ga, and Zn-doped fullerenes,” *Monatshefte für Chemie*, vol. 153, no. 5–6, pp. 427–434, 2022, doi: 10.1007/s00706-022-02926-8.

THEORICQAL STUDY OF MOLNOPIRAVIR ADSORPTION ON GOLD DOPED C20 FULLERENE

REMOUGUI Chaima Basma 1, BOUDJAHM Ines1, NEMAMCHA Abdarrafiq1,
MOUMENI Hayet2,3

1Group: Surfaces, Interfaces and Nanostructures, Laboratory of Industrial Analysis and Materials
Engineering,

(LAIGM), University 8 Mai 1945 Guelma, 24000, Algeria.

2Group: Metallic materials: Energy and Environment, Laboratory of Industrial Analysis and
Materials

Engineering, (LAIGM), University 8 Mai 1945 Guelma, 24000, Algeria.

3 Department of Matter Sciences, Faculty of Mathematics, Informatics and Matter Sciences,
University 8 Mai

1945 Guelma, Algeria.

Author email: chaymaremougui23@gmail.com.

ABSTRACT:

C20 small fullerene's outstanding biocompatibility and bioavailability have made it a highly sought-after nanomaterial for drug delivery (Baskar et al., 2021). Doping C20 small fullerene with gold atom enhances its reactivity for adsorbing various molecules. Molnopiravir (MNP) is regarded as a promising treatment for COVID-19 due to its high rate of recovery (Pari & Yousefi, 2022). In this context, this study primarily employs Density Functional Theory (DFT) calculations with the B3LYP functional and 6-31G (d) basis set in aqueous media to assess the potential of gold-doped C20 fullerene as a carrier for Molnopiravir. The study focuses on the adsorption energy of MNP on AuC19 fullerene nanomaterial, along with electronic properties such as Frontier Molecular Orbital (FMO) and Density of State (DOS), aiming to comprehend the nature and mechanics of the interaction. The findings suggest that doped fullerene presents several advantages, including controlled drug release at specific target sites, thereby minimizing generic accumulation in vivo and limiting side effects. Consequently, it emerges as a promising choice for a drug delivery nanostructure.

KEYWORDS: Density functional theory (DFT), AuC19, Adsorption, Drug delivery.

GRAPHICAL ABSTRACT

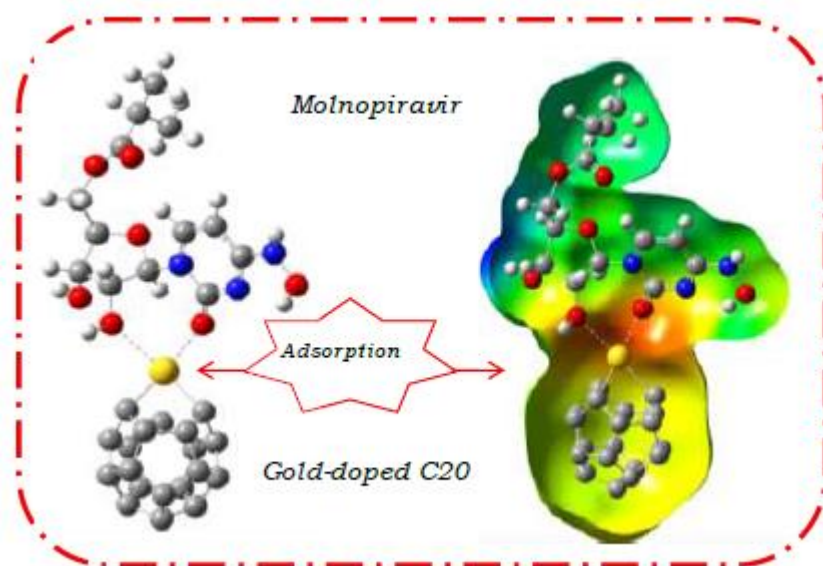


Figure 1. Adsorption of monlnopiravir drug on Gold doped C20 fullerene.



REFERENCES

- Baskar, A. V, Benzigar, M. R., Talapaneni, S. N., Singh, G., & Karakoti, A. S. (2021). *Self-Assembled Fullerene Nanostructures : Synthesis and Applications*. October, 2021.
- Pari, A. A., & Yousefi, M. (2022). Interactions between favipiravir and a BNC cage towards drug delivery applications. *Structural Chemistry*, 33(1), 159–167. <https://doi.org/10.1007/s11224-021-01833-8>



**ETUDE THEORIQUE PAR MODELISATION DE L'ACTIVITE ANTIOXYDANTE DES
CONFORMERES DE N-E-FERULOYL TYRAMINE ET DE LEURS ANALOGUES
SULFURES**

BAHLOUL Asma¹, BENHAYAHOU Ali², BOUAKKAZ Samia¹

¹ *Laboratoire de chimie appliquée (LCA), Université 08 Mai 45, Guelma, Algérie*

^{1,2} *Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyses Physico- Chimiques (CRAPC)*
bahloul.asma@univ-guelma.dz.

RESUME :

La N-E-féruloyl tyramine est un acide phénolique, il a été séparé pour la première fois par Trabelsi et al (1) de *L. guyonianum*, ils ont étudié Le pouvoir antioxydant de cette molécule par le test DPPH, la réduction de fer et l'inhibition de la décoloration du β -carotène.

La sélection des conformères est un aspect très important de la modélisation computationnelle des biomolécules. Dans note étude, nous avons suivi une procédure pour déterminer une série de cinq conformères de N-E Féruloyl tyramine, et pour mieux comprendre l'activité antioxydante de la N-E-Féruloyl tyramine (Ft), nous avons systématiquement calculé les surfaces d'énergie potentielle de rotation et l'énergie ponctuelle des conformères optimisés. Ensuite, on a étudié les mécanismes HAT, SPLET et SET-PT et les descripteurs physicochimiques caractérisant l'activité antioxydante globale de tous les modèles sélectionnés, y compris l'enthalpie de dissociation des liaisons (BDE), le potentiel d'ionisation adiabatique (AIP), l'enthalpie de dissociation des protons (PDE), l'affinité des protons (PA) et l'enthalpie de transfert d'électrons (ETE) pour tous les modèles en phase gazeuse, dans l'eau et dans le méthanol par le calcul DFT au niveau de théorie B3LYP/6-311G(d,p). De plus, nous avons étudié et discutées l'influence de la substitution des groupes mercapto aux cycles Ft sur l'activité antioxydante globale.

L'analyse conformationnelle de Ft par calculs DFT a montré que la molécule disposait de cinq conformations à faible énergie, incluant les conformères trans et cis. D'après des calculs de l'enthalpie de dissociation de liaison, les valeurs de BDE de tous les conformères de Ft choisis ne présentent aucune différence significative, ce qui indique que les tous conformères ont pratiquement contribué à la même manière à l'activité antioxydante du composé Ft.

Le mécanisme SET-PT détermine la capacité antioxydante par le un don d'électrons suivis d'une libération des protons. Les résultats de Potentiel d'ionisation adiabatique (AIP) montrent que les valeurs d'AIP sont très inférieures, qui sont en accord avec le test de réduction du fer effectué par Wales et al (02), avec un minimum de 158,58 kcal/mol pour le conformère Ft-4.

Un autre mécanisme pour déterminer le pouvoir antioxydant est le mécanisme SPLET, dont l'étude se fait en calculant l'affinité protonique (PA) et l'enthalpie de transfert d'électrons (ETE), les résultats des calculs d'Affinité des protons ont montré que le PA des modèles Ft possède une valeur plus faible avec le Ft-2 (346,32 kcal/mol) en position 4'-OH, et les valeurs ETE les plus faibles ont été trouvées pour Ft-1 et Ft-5 en position 4'-OH. D'après des valeurs BDE des analogues sulfurés, La BDE des conformères Ft sulfurés (dopage d'un groupe S-CH3) est supérieure à celle ses analogues hydroxylés de 5,68 à 6,33 kcal/mol, et le modèle sulfuré Ft-4 présente une valeur de BDE inférieure par rapport aux ses analogues hydroxylés, la contribution des modèles Ft dans l'activité antioxydante intervient uniquement avec le modèle sulfuré Ft-4.

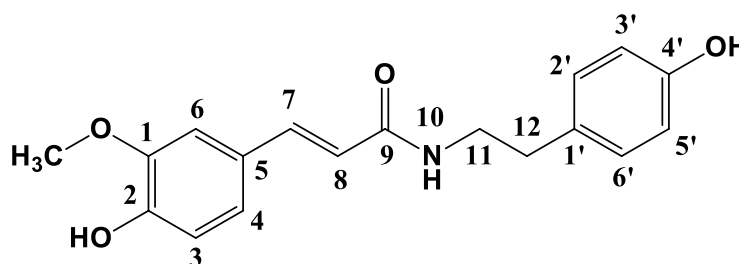


Figure 01 : Structure chimique de N-E- féruloyl tyramine

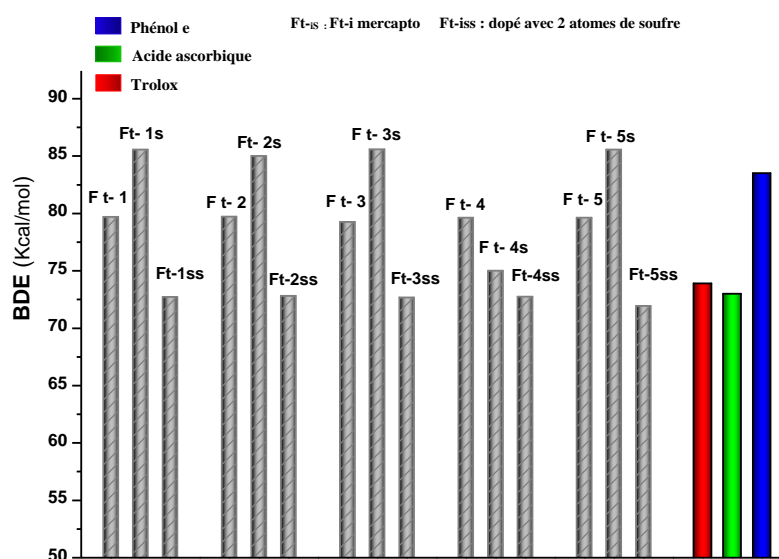


Figure 02 : les valeurs de l'enthalpie de dissociation des liaisons (kcal/mol) des conformères Ft et leurs analogues sulfurés Calculées en phase gazeuse.

Mots-clés : N-E-féruloyl tyramine, DFT, activité antioxydante, SET-PT, SPLET.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES :

- [1] Trabelsi, N., Oueslati, S., Ksouri, R., Nassra, M., Marchal, A., Krisa, S., Abdelly, C., Mérillon, J.M., Wafo-Téguo, P. (2014). The antioxidant properties of new dimer and two monomers of phenolic acid amides isolated from *Limoniastrum guyonianum*. *Food Chem*, 146, 466–471.
- [2] Wales, D.J., Bogdan, T.V. (2006). Potential energy and free energy landscapes. *J Phys Chem B*, 110, 20765–20776. <https://doi.org/10.1021/jp0680544>



HOST-GUEST INCLUSION COMPLEX OF B-CYCLODEXTRIN / PENAM: THEORETICAL APPROACH

Hanane MESSIAD ^{*1,2}, Tarek YOUSFI ^{1,3}, Fatima Hamamdia^{1,4}, Habiba Amira-Guebailia ^{1,4}

¹ Applied Chemistry Laboratory -LCA, University of 08 mai 1945 Guelma, BP 401, 24000, Algeria

² Department of Environmental Engineering, Faculty of Process Engineering, University of Salah Boubnider Constantine3, Algeria.

³ National Center for Biotechnology Research -CRBt, Constantine, Algeria.

⁴ Faculty of Mathematics, Computer Science and Sciences of Matter, University of 08 mai 1945 Guelma, 24000 - Algeria.

*Corresponding author E-mail: messiad_h@yahoo.fr.

ABSTRACT

In this work, we studied the complexation of molecules Pen with β -cyclodextrin with the stoichiometry of 1:1. We simulated the inclusion of Hes in the β -CD using the semi-empirical method PM6, DFT and ONIOM2 and NBO methods. The energies of complexation and interaction for both orientations considered are reported.

We found that the orientation (2) is more stable, statistical thermodynamics calculations at 1 atm and 298.15K have shown that in a vacuum, the process complexation is exothermic and enthalpically favorable. The calculated negative complexation energy suggests that inclusion complexes are stable. HOMO and LUMO orbital investigations confirm the better stability of orientation (2). Finally, natural bond orbital (NBO) was performed based on optimized complex ONIOM2 quantify the interactions between donor acceptor Pen and β -CD.

Keywords: β -cyclodextrin; Penam; complex; inclusion; DFT; docking.



DOUBLE IONIZATION CROSS SECTIONS OF THE HYDROGEN FLUORIDE MOLECULE BY ELECTRON IMPACT

R.Boumati*¹, D.Oubaziz¹ and C.Champion²

¹Physics, Mouloud Mammeri University of Tizi Ouzou, Electrical Engineering Laboratory, Algeria

²Physics, University of Bordeaux 1, Center for Intense Lasers and Applications UMR5107, France

*Corresponding author: ryma.boumati@ummto.dz

ABSTRACT

In this work, we present the theoretical Fivefold differential cross sections for the double ionization of the hydrogen fluoride molecule by electron impact. This type of reactions is important in various scientific and technological fields such as plasma physics or planetary atmospheres and radiobiology. Our theoretical method is based on the first approximation of a collisional system including an initial state composed of a charged particle and a target molecule (HF) written respectively by a plane wave and an accurate one-centre molecular wave function[1], and an adequate choice of the final state using the 2CWG model to describe the double continuum present in the final state which takes into account the electronic repulsion between the two ejected electrons coupled by a Gamow factor.

The results of fivefold différentiel cross sections were obtained for different orientations of the molecular target (HF) defined by the Euler angles. For this two orientations were taken $(\alpha, \beta, \gamma) = \{(0^\circ, 180^\circ, 0^\circ), (0^\circ, 90^\circ, 0^\circ)\}$, and this in the case of a Mixed process (case where the two ejected electrons come from two different molecular orbitals). And Finally We have highlighted the presence of the Shake-off mechanism (SO) and the two-step 1 mechanism (TS1).

Keywords: cross section; double ionization; orientation; collisions; Impact; hydrogen fluoride

REFERENCES:

[1] MOCCIA, Roberto. One-Center Basis Set SCF MO's. I. HF, CH₄, and SiH₄. The Journal of Chemical Physics, 1964, vol. 40, no 8, p. 2164-2176



CONTRIBUTION TO THE STUDY OF THE INCLUSION COMPLEX OF 3-AC @ B-CYCLODEXTRIN BY QUANTUM METHODS.

MERABET Nora^a, LAFIFI Ismahan^b, MADI Fatiha^b and NOUAR Leila^b

^aDepartment of Process Engineering, Faculty of science and technology,
Laobratory of computational chemistry and Nanostructure, University 8 Maï 1945, Guelma, Algeria.

^bDepartment of Materiel Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics and Materiel, University 8
Maï 1945, Guelma, Algeria.

Laobratory of computational chemistry and Nanostructure, University 8 Maï 1945, Guelma, Algeria.

Merabetnora@gmail.com.

Abstract

The complexation of 3-AC with β -cyclodextrin is studied theoretically with The DFT method with the functionals B3LYP and the base 6-31G (d) in Water. The calculated values of the complexation and interaction energies reflect the stability of the inclusion complexes studied. TD-DFT, FT-IR, NBO, MEP and NCI analyzes were performed to give more information about the nature of the intermolecular interactions between 3-AC and β -cyclodextrin. The results showed that the inclusion complexes are stabilized by hydrogen bonds and Van der Waals interactions.

Keywords: Inclusion complex, energies of complexation, electronic transitions, non-covalent interactions.



REACTIVITY AND INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN THE INCLUSION COMPLEX OF EUGENOL@ B-CYCLODEXTRIN

MERABET Nora^a, LAFIFI Ismahan^b, MADI Fatiha^b and NOUAR Leila^b

^aDepartment of Process Engineering, Faculty of science and technology,
Laobratory of computational chemistry and Nanostructure, University 8 Maï 1945, Guelma, Algeria.

^bDepartment of Materiel Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics and Materiel, University 8
Maï 1945, Guelma, Algeria.

Laobratory of computational chemistry and Nanostructure, University 8 Maï 1945, Guelma, Algeria.

Merabetnora@gmail.com.

Abstract

In this work, the eugenol @ β -Cyclodextrin inclusion complex was studied theoretically via the DFT method at the theoretical B3PW91/6-31G(d) level in gas phases.

Two orientations A and B of the introduction of eugenol inside the cavity of the β -CD are chosen to build the inclusion complexes C1 and C2 respectively.

Each orientation has been optimized and subjected to a succession of calculations, UV, FT-IR, NCI, MEP and NBO. The energy calculations showed:

- Complete inclusion of the guest molecule in the β -CD in both complexes.
- The C2 complex is the most energetically favorable.
- Inclusion complexes are stabilized by intermolecular hydrogen and Van-der-waals interactions.

Keywords: β -Cyclodextrin; Eugenol; B3PW91/6-31G (d); NBO; UV; NCI and FT



**A DFT STUDY OF THE STRUCTURAL, ELASTIC AND THERMODYNAMIC
PROPERTIES OF THE Rb_2TiBr_6
PEROVSKITE**

KSOURI Rabah^a, Ilhem Djaghout^b, Rafik Maizi^a, Abdel Ghani Boudjahem^a, Meryem Dardare^a

^aComputational Catalysis Group, Laboratory of Applied Chemistry, University of Guelma, Box 401, 24000, Guelma, Algeria.

^bLaboratoire d'analyses industrielles et génie des matériaux, Université du 8 Mai 1945 Guelma, B.P 401, 24000 Guelma, Algérie

*** Corresponding author:**

E-mail address: ksourira@hotmail.com

Abstract

We have investigated the structural, elastic and thermodynamic properties of the Rb_2TiBr_6 using the Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) method as implemented in the Quantum Espresso package. The structural properties such as lattice constant (a_0), bulk modulus (B), bulk modulus pressure derivative (B') were calculated and compared to the experimental data. The calculated lattice parameter for this material are in good agreement with the experimental value. The stability criteria calculated on the basis of the elastic constants of the compound Rb_2TiBr_6 show that the previous compound strictly obeys the stability criteria, therefore it is chemically stable. The calculated Pugh's and Poisson ratios revealed that the studied compound is a brittle material. The calculations of the thermodynamic parameters show also that the heat capacity (C_V) of the Rb_2TiBr_6 is 224 J/mol. K. The Debye temperature (T_D) and the thermal expansion (α) have also been calculated, and the values obtained were discussed in detail.

Key words: Rb_2TiBr_6 perovskite, stability, electronic and thermodynamic properties



ETUDE D'ELIMINATION D'UN PRODUIT PHARMACEUTIQUE PAR ADSORPTION

Khelifi Omar^{1,2,3}, Mechelfeg Bousmaha¹, Abderrahmane Boukoba¹, Merabti Mohammed Elamine^{1,3}, ZemaniNassima Djihane^{1,4}, Rezag Sarra^{1,4}, Laksaci Hamza^{1,4}, , Mouna Nacef², Mohamed Lyamine Chelaghmia², Abed Mohamed Affoune²

1Département d'hydrocarbures et énergies renouvelables. Faculté des sciences et de la technologie, Université Ahmed Draïa Adrar, 01000 Adrar, Algeria.

2Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux, Département de Génie des Procédés, Faculté des Sciences et de la Technologie, Université 8 Mai 1945 Guelma, Guelma 24000, Algeria.

3Laboratoire Matériaux Catalytiques et Procédés Industrielles (LMCPI), Faculté des sciences et de la technologie, Université Ahmed Draïa Adrar, 01000 Adrar, Algeria.

4Laboratoire Energie, Environnement et Systèmes d'information (LEESI), Faculté des sciences et de la technologie, Université Ahmed Draïa Adrar, 01000 Adrar, Algeria.

khelifi.omar@univ-adrar.edu.dz

Résumé:

Le but de cette étude est d'évaluer le potentiel du charbon actif préparé à partir des noyaux de fruits de Washingtonia pour l'adsorption d'un composé pharmaceutique (paracétamol) à partir des solutions aqueuses. Les propriétés physico-chimiques du charbon actif ont été déterminées. Des expériences d'adsorption ont été réalisées en fonction des différents paramètres opératoires. Les données expérimentales ont été analysées par différents modèles isothermes. Pour l'étude des isothermes, le modèle de Langmuir donne la meilleure représentation graphique ($R^2 = 0,9926$). L'étude cinétique a été discutée à l'aide de différents modèles cinétiques et les résultats ont montré que le modèle du pseudo-second ordre correspondait bien aux données cinétiques. Les paramètres thermodynamiques ont également été évalués. Les conditions optimales obtenues sont les suivantes : 50 mg.L⁻¹ pour paracétamol (PRC), dose d'adsorbant 2 g.L⁻¹, temps de contact 90 min et 25 °C et pH de 2. Dans des conditions optimales, la capacité d'adsorption maximale du paracétamol était de 21.74 mg.g⁻¹. Les résultats de cette étude indiquent que le charbon actif préparé à partir de noyaux de fruits de Washington peut être utilisé pour l'adsorption des produits pharmaceutiques à partir de solutions aqueuses.

Mots-clés : Adsorption, Charbon actif, Noyaux de Washingtonia, Paracétamol



INTERCALATION AND PRODUCTION OF POLYETHYLENE GLYCOL-KAOLINITE COMPOSITE

*Fatima Rouabhia*¹, *Abderrafik Nemamcha*¹, *Hayet Moumeni*¹, *Fethi Jomni*², *Abdessalem Ben Haj Amara*³

¹ Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux (LAIGM), Département Génie des Procédés, Faculté des Sciences et de la technologie, Université 08 Mai 1945 de Guelma, Algérie.

² Laboratoire des Matériaux Optimisation et Propriétés (LMOP), Faculté des sciences, EL Manar, Université de Tunis, Tunisie.

³ Laboratoire de Physique des Matériaux Lamellaires et Nanomatériaux Hybrides (LPMLNH), Faculté des Sciences de Bizerte, Université de Carthage, Tunisie.

Corresponding author: fatirouabhi@yahoo.fr, Fax: + 213 37 20 72 68

Abstract

Kaolinite clay and Polyethylene glycol (PEG) based nanocomposites can be considered as attractive multifunctional materials that have received much attention due to their interesting properties and their technological applications in different fields. Polyethylene glycol-kaolinite intercalation nanocomposites were prepared by making use of intercalation method. Thus crude kaolinite (K_0) was sequentially modified with dimethylsulfoxide (DMSO). In our study, we were interested in elucidating the role of the PEG molecular weight variation on the final product. The obtained results indicate a homogeneous mineralogical composition characterized by the

Fourier transform infrared (FTIR) analysis reports the presence of new PEG-related vibrational bands in the hybrids, this confirms the adsorption of PEG chains. We find that there is a consensus that HPEG8000 hybrids are more suitable in good conformity with the X-ray diffraction (XRD) were used to follow the inter-layer distance of the phases versus the molecular weight of PEG. The dielectric constant of the samples presents a phenomenon of dispersion which becomes more and more pronounced when the measurement temperature increases. The electrical conductivity, in alternating regime, increases linearly with the increase in the measurement temperature.

Keywords: PEG, kaolinite, nanocomposites, dielectric property



CHARGE TRANSFER COMPLEXATION OF THE POLYPHENOL RUTIN AS ELECTRON DONOR WITH TWO π -ACCEPTORS (DDQ AND TCNE)

Fatima Zahra Hamamdia^a, Hanene Messiad^b and Habiba Guebailia^a

^a Laboratoire de Chimie Appliquée -LCA, Université 8 Mai 1945 Guelma, BP 401, Guelma 24000, Algeria. ^b Université de Constantine 3, Algeria

fatimachimie82@gmail.com

messiad_h@yahoo.fr

amira_h_g@yahoo.co.uk

Abstract

Molecular charge transfer complexes play a key role as intermediate species in a wide range of organic reactions involving nucleophiles and electrophiles species. The charge transfer (CT) complexes formed from the reaction of electron acceptors with donors containing heteroatoms, such as nitrogen, sulfur or oxygen, have seen a growing importance in recent years [1]. They are currently of great importance since these materials can be used as organic semiconductors and photocatalysts. The charge transfer interaction plays an important role in biological systems like DNA binding [2]. Rutin is a biomolecule belong to polyphenols which are known for their biological activities. It is enriched with n electrons (coming from oxygen atoms) and π electrons which makes it among the best electron donor molecules. This comprehensive study aims at examining the interaction of rutin with two π -acceptors, DDQ and TCNE, in both liquid and solid phases, in liquid phase by using UV-VIS spectrophotometry. While in the solid phase, charge transfer complexes were prepared, then analyzed and characterized by FT-IR and NMR spectroscopy. The composition of the CT complexes were determined using molar ratio method and Benesi-Hildbrand equation was used to calculate the formation constants K_{CT} and the molar extinction coefficient ϵ_{CT} of the formed CT complexes. The [Rutin-TCNE] CT complex appears to be highly sensitive to the intrinsic properties of the solvent. Notably, the K_{CT} values of the [Rutin-DDQ] complex in ethanol exceeded those of its counterpart in methanol. Conversely, the K_{CT} values of the [Rutin-TCNE] complex synthesized in methanol exceeded those prepared in ethanol. In conclusion

These new CT complexes have high formation constant values (K_{CT}) indicating the high stability of them.

Keywords: Rutin, Biological activities, Charge transfer complexation, DDQ, TCNE.

References

- [1] H.S. Bazzi, A. Mostafa, S.Y. AlQaradawi, E.M. Nour, Synthesis and spectroscopic structural investigations of the charge-transfer complexes formed in the reaction of 2,6-diaminopyridine with π -acceptors TCNE, chloranil, and DDQ, J. Mol. Struct. 842 (2007) 1–5.
- [2] G. Suresh, N. Venkatesh, B. Naveen, V. Mahipal, M. Madhavi, T. Parthasarathy, D.N.A. Binding, DFT and spectroscopic studies of a charge transfer complex consisting of a bioactive donor 1-(2-Methylbenzyl)piperazine, J. Solut. Chem. 49 (2020) 777–797,



INHIBITION DE LA CORROSION DE L'ACIER PAR L'EXTRAIT DE FEUILLES D'OLIVIER EN MILIEU NaCl 3%

Rahmouni Halima^{1*}, Nigri Soraya², Hallaci Amani², Rezaiguia Youssra², et Oumeddour Rabah²

¹Laboratory of Applied Chemistry (LCA), university of 8 may 1945, Guelma, Algeria,

²Laboratory of Industrial Analysis and Materials Engineering (LAIGM), university of 8 may 1945, Guelma, Algeria.

Email address: Rahmounihalima45@gmail.com

Résumé :

Le but de ce travail est d'étudier l'action de l'extrait de feuilles d'olivier (EFO) en tant qu'inhibiteur vert contre la corrosion de l'acier dans le milieu NaCl 3%. L'analyse de la poudre de feuilles d'olivier par FTIR a prouvé la richesse de EFO en groupements fonctionnels hydroxyl, carbonyl... etc. Les résultats de la méthode de perte de masse et la technique des courbes de Tafel obtenus montrent que l'EFO inhibe efficacement la corrosion de l'acier et son efficacité peut atteindre 71% pour une concentration de 10%. Cet inhibiteur se comporte comme un inhibiteur mixte avec une prédominance anodique. L'EFO forme une monocouche sur la surface métallique et son adsorption suit l'isotherme de Langmuir. Les valeurs négatives de l'enthalpies libres confirment la spontanéité de l'adsorption des molécules inhibitrices sur la surface de l'acier et la stabilité du film formé.

Mots-clés : Corrosion, Inhibiteur vert, Extrait de feuilles d'olivier, Inhibiteur mixte, Adsorption, Isotherme de Langmuir.



**OPTIMISATION ET VALIDATION D'UNE METHODE DE DOSAGE D'UN MEDICAMENT
DE LA FAMILLE DES β - BLOQUANTS PAR CHROMATOGRAPHIE LIQUIDE À HAUTE
PERFORMANCE**

BOUCHAIR Nabila

*Département de Chimie, Faculté des Sciences Exactes et Informatique, Université Mohamed Seddik
Ben Yahia – Jijel Cité Ouled Aissa, B.P. 98 - Jijel 18000 - Algérie*

**Corresponding author nabila-bouchair@univ-jjel.dz*

Résumé:

Dans le domaine pharmaceutique, toute méthode analytique décrite dans le dossier d'autorisation de mise sur le marché (AMM) doit être accompagnée d'une validation complète. Dans ce cadre, le sujet traité concerne l'optimisation et la validation d'une méthode de dosage d'un médicament « métoprolol tartrate » par chromatographie liquide à haute performance (HPLC) couplée à un détecteur à barrette de diodes (DAD) en utilisant une colonne C₁₈. Ce médicament est un agent bêta-bloquant adrénergique, qui réduit la douleur thoracique et abaisse l'hypertension artérielle. Nous avons d'abord déterminé les paramètres optimaux permettant l'analyse du métoprolol tartrate par HPLC/DAD. Ensuite, nous avons procédé à la validation de la méthode de dosage selon les critères de validation décrits par l'ICH. La méthode de dosage adoptée est spécifique et linéaire entre 10 et 50 mg/l en principe actif. Les limites de détection et de quantification du métoprolol tartrate ont été calculées.

Mots clés : Optimisation, Validation, HPLC, Métoprolol tartrate.



EFFET DE LA ZONE GEOGRAPHIQUE SUR LES CARACTERISTIQUES CHIMIQUES ET SENSORIELLES D'HUILE D'OLIVE VIERGE.

MEZROUA El Yamine¹, DENDANI Nihed², LAOUABDIA-SELLAMI Nadjet³, SAIDIA Sana³,
ZEDADRA Nesrine³

¹ Laboratoire d'analyses industrielles et génie des matériaux, Université 8 Mai 1945 Guelma

² Laboratoire Ecologie, Eau et Santé, Université 8 Mai 1945 Guelma

³ Département de Biologie, Faculté SNVSTU, Université 8 Mai 1945 Guelma

lyamine_mezroua@yahoo.fr.

Résumé

L'huile d'olive vierge occupe parmi tous les corps gras alimentaires une place particulière en raison de son image et sa consommation à l'état vierge ; il s'agit d'un produit protecteur et contrôleur de l'équilibre de notre santé. La qualité de l'huile d'olive est contrôlée par de nombreux facteurs, notamment: les variétés d'olives, le climat, la saison et la méthode de récolte, la méthode d'extraction de l'huile, la zone géographique ainsi que la durée et les conditions de stockage. L'objectif de cette étude est d'étudier l'effet de zone géographique sur les caractéristiques chimiques et sensorielles de l'huile d'olive vierge. Pour ce faire, des échantillons sont collectés de deux zones géographiques différentes ROKNIA et OUED CHEHAM.

D'après les résultats obtenus, une différence significative est notée en ce qui concerne l'indice d'acide et l'indice de peroxydes ainsi l'indice de saponification d'huile d'olive vierge de deux régions ROKNIA et OUED CHEHAM, ce qui montre nettement l'effet de la zone géographique sur les caractéristiques chimiques. Par ailleurs, selon le test triangulaire des résultats des analyses sensorielles, il existe une différence hautement significative ($p < 0.001$) entre les deux produits des régions de ROKNIA et d'OUED CHEHAM, donc la zone géographique a un effet sur les caractéristiques sensorielles d'huile d'olive vierge. La région de ROKNIA présente une qualité meilleure d'huile d'olive vierge par rapport à la région d'OUED CHEHAM.

Mots-clé : Huile d'olive vierge, caractéristiques chimiques, ROKNIA, OUED CHEHAM, caractéristiques sensorielles.



PROPRIÉTÉS SOLVATOCHROMIQUES ET PARAMÈTRES IN SILICO D'ADMET DE NOUVEAUX DÉRIVÉS DE CHLOROÉTHYL-NITROSOURÉE PRÉSENTANT UNE ACTIVITÉ ANTICANCÉREUSE POTENTIELLE ET LEURS COMPLEXES AVEC LA β -CYCLODEXTRINE

Hassina Fisli^a, Andreas Hennig^b, Mohamed Lyamine Chelaghmia^c, Mohamed Abdaoui^a

^a Laboratoire de Chimie Appliquée, Université 8 Mai 1945 Guelma, Algérie

^b Institut de Chimie des Nouveaux Matériaux, Université d'Osnabrück, Allemagne

^c Laboratoire d'Analyse Industrielle et d'Ingénierie des Matériaux, Université 8 Mai 1945 Guelma, Algérie

Résumé : En vue de l'effet anticancéreux des nitrosourées, un ensemble de quatre nouveaux dérivés de N-(2-chloroéthyl)-N-nitrosourée (CENU) a été synthétisé. Une étude de prédiction in silico d'ADME/Tox a révélé que les dérivés de CENU satisfaisaient tous les critères nécessaires pour une administration par voie orale et les a présentés comme des candidats anticancéreux remarquables dans le système nerveux central. Une étude solvatochromique comparative incluant les modèles Kamlet-Taft, Catalán et Laurence a indiqué que le comportement solvatochromique des CENU dépendait à la fois des interactions solvant-soluté non spécifiques et spécifiques. En tant que stabilisateurs potentiels, des complexes d'inclusion des dérivés de CENU étudiés avec la β -cyclodextrine (β -CD) ont également été explorés. Les expériences d'hôtes-invités spectrofluorimétriques ont établi une stœchiométrie 1:1 entre la β -CD et les dérivés de CENU, ainsi que des affinités relativement élevées de la β -CD pour les dérivés de CENU étudiés.

Mots clés : Nitrosourée ADME/Tox Solvatochromisme LSER Spectrofluorimétrie β -cyclodextrine



CHEMICAL STUDY OF GROUNDWATER POLLUTION IN NORTHEASTERN ALGERIA

NEFLA Loubna², BERGAL Amira^{1*}, BOUMARAF Warda¹, BOUKSSIBA Charazed²

¹ *Laboratory SEAGROE. Faculty of Natural and Life Sciences, Department of Biology. University Chadli Bendjedid El Tarf, Algeria, BP 73, 36000, EL TARF, Algeria*

² *Faculty of Natural and Life Sciences, Department of Biology. University Chadli Bendjedid El Tarf, Algeria, BP 73, 36000, EL TARF, Algeria*

Email: corresponding-amourabergal@yahoo.fr.

Résumé:

Aquatic environments are subject to multiple pressures linked to human, agricultural, industrial and domestic activities. This situation leads to significant costs of prevention, protection and restoration, to ensure the sustainability of uses and, first of all, the production of water intended for human consumption.

To date, sales of phytosanitary products amount to tons of active substances. The latter are mainly intended for agricultural use. Other substances degrade water quality. Thus, volatile organic compounds, such as trichlorethylene, perchlorethylene or tetrachlorethylene, powerful solvents used by the chemical and mechanical industries and for dry cleaning of textiles, are, after nitrates and pesticides, the third source of degradation of underground waters.

Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs, benzene and its derivatives) are also among the substances that most degrade surface water. These products mainly come from combustion engine exhaust, leaching from road surfaces or wooden railway sleepers.

Monitoring the quality of surface water and groundwater highlights the presence of pesticides in most sub-basins. The highest levels concern areas of large-scale arboriculture and viticulture. Only mountainous areas or areas made up of less treated agricultural areas, such as permanent meadows, are spared from this contamination.

The question of the possible risk of emerging pollutants to groundwater is a subject currently being widely studied.

Like the far north-east of Algeria, human activities carried out in the adjacent valleys and plains obviously have significant repercussions on these balances. The study region constitutes an agricultural area and an important center of heavy industry and processing. Industrial pollution is caused by thermal, chemical and organic discharges via aquatic, terrestrial or atmospheric routes.

The objective of this work targets several aspects related to water quality. Firstly, the study focuses on the chemistry of water which is a function of the geological formations present.

Secondly, the vulnerability of the groundwater is approximated by calculating the purifying power to finally determine the quality of surface and groundwater. These results will be used to establish the relationship with the groundwater of the alluvial plain.

Keywords: Groundwater water, pollution physico-chemical quality, organic contamination



SYNTHESE ET CARACTERISATION DES COMPLEXES BASES DE SCHIFF DU MANGANESE.

Auteurs : Nedjoua CHEGHIB^a, Abdel-Ghani BOUDJAHM^a, Meryeme Dardare^a
Rafik Maizi^b, Wafa SOUDANI^c.

^aLaboratoire de chimie appliquée, université 08 Mai 1945- BP401- Guelma, Algérie

^bLaboratoire de physique des matériaux L2PM, Université du 8 Mai 1945 Guelma, B.P 401, 24000 Guelma, Algérie.

^cLaboratoire de Chimie Thérapeutique, Département de Pharmacie, Faculté de Médecine Annaba. Algérie.

Auteur Correspondant. e-mail. nedjoua11_c@yahoo.fr

Résumé :

Un grand nombre de complexes de métaux de transition ont été créés dans le but principal de développer des composés actifs contre les microorganismes, tout en minimisant leur toxicité et, par conséquent, leurs effets secondaires. La lutte contre les bactéries est essentielle pour préserver la santé humaine. Cependant, les bactéries évoluent constamment sur le plan génétique, ce qui leur permet de développer une résistance aux antibiotiques. Pour ces raisons, la recherche de nouveaux composés chimiques avec une activité antimicrobienne améliorée est aujourd'hui un domaine de recherche crucial [1,2]. Les recherches précédentes indiquent que les complexes de base de Schiff issus de la réaction entre le salicyaldéhyde et l'orthophénylènediamine ont démontré une activité antibactérienne et antioxydante significative [3,4].

Les études réalisées dans ce travail ont pour objectif la synthèse, l'étude spectrales, l'étude du mode de coordination vis-à-vis du Mn (II) et du Fe (II) d'une base de Schiff. Ces complexes ont été isolés à l'état solide et leurs modes de coordination, discutés à la lumière des résultats analytiques obtenus et de ceux de la littérature qui s'y rapportent.

Référence :

- [1]. M.A.T. Gilmartin, J.P. Hart, Analyst. 120 1029. (1995).
- [2]. MacDougall C, Polk RE, Clinical Microbiology Reviews, 18 638-656. (2005).
- [3]. D. Z. Obadovic, D. M. Petrovic, V. M. Levac. Caric. J.them.Anal, 36, 99-108. (1990).
- [4]. Gülnur Keser_Karaođlan, Journal of Molecular Structure, V 1256, 132534. (2022)



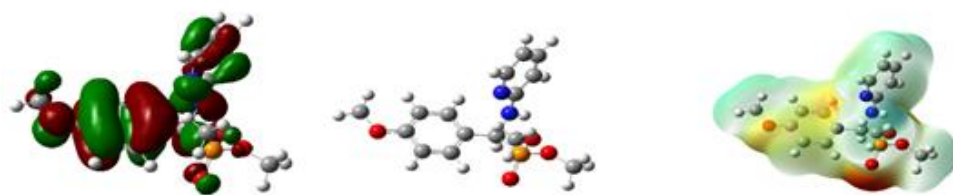
SYNTHÈSE, CARACTÉRISATION ET ÉTUDES THÉORIQUES D'UNE SÉRIE DE MOLECULES α -AMINOPHOSPHONATES

GRIB Ismahene, Bahadi Rania, DEKIR Ali, Malika Berredjem

Laboratoire de chimie organique appliquée, groupe de synthèse de Biomolécules & modélisation moléculaire

Université Badji-Mokhtar - Annaba, Box 12, 23000 Annaba, Algérie

Vu l'importance pharmacologique et chimique du motif aminophosphonate, et dans le but de synthétiser de nouvelles classes de molécules susceptibles d'avoir des différentes activités biologiques, nous avons développé la synthèse d'une nouvelle famille d' α -aminophosphonates qui sont connus comme analogues bioisostériques des acides aminés, via la réaction de Kabachnik Fields et sous irradiations ultrasonique pour économiser l'énergie et répondre aux critères de la chimie verte [1-2]. Les différentes méthodes spectroscopiques (RMN¹H, ¹³C, ³²P et IR) ont été mises à profit pour établir les caractéristiques structurales des composés synthétisés. Dans la deuxième étape on a utilisé l'outil informatique pour une évaluation théorique des propriétés structurales et électroniques, grâce au logiciel Gaussian 09 et par la théorie de la densité fonctionnelle (DFT) [3-5]. L'optimisation de la géométrie des molécules a été réalisée par la minimisation de l'énergie en utilisant la méthode hybride B3LYP/6-31G pour avoir l'effet de la substitution, par des groupements électro-donneur et électro-attracteur, sur la stabilité, la réactivité chimique et l'activité biologique de ces composés.



Keywords: α -Aminophosphonates, Modélisation moléculaire, Étude théorique DFT

References

[1] A. Bouzina, B. Belhani, N. E. Aouf, M. Berredjem, *RSC Adv.* **2015**, 5, 46272, [2] B. Belhani, K. Bechlem, I. Grib, H. Cheloufi, R. Bouasla, M.J. Berredjem, *Mater. Environ. Sci.* **2018**, 9, 613. [3] Becke, A. D., *J. Chem. Phys.* **1993**, 98, 5648-5652. [4] Lee, C.; Yang, W.; Parr, G. R. *Phys. Rev. B.* **1988**, 37, 785- 789. [5] Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; M.A. Robb, M. A.; J.R Cheeseman, J. R. Gaussian 09, Revision A. 02, Gaussian Inc Wallingford CT. **2009**, 34, Wallingford CT.



**APPLICATIONS DES LIGANDS DERIVES DE L'HISTAMINE : SYNTHÈSE,
CARACTERISATION ET POTENTIEL ANTIOXYDANT EN PHARMACOLOGIE ET
MEDECINE**

BELFILALI IMANE* et HAMIMED MOHAMMED YASSINE

Laboratoire de chimie inorganique et environnement (LCIE) BP 119, 13000 Tlemcen- Algérie

Email* : imanebelfilali@yahoo.fr

À la recherche de nouveaux composés bioactifs, cette étude se concentre sur la synthèse et la caractérisation de ligands dérivés de l'histamine, une amine biogène aux rôles physiologiques divers. Le processus de synthèse implique des modifications stratégiques de la structure de l'histamine pour créer de nouveaux ligands, chacun possédant des propriétés chimiques uniques. Des techniques de caractérisation complètes, notamment la spectroscopie et l'analyse élémentaire, ont été utilisées pour valider la synthèse réussie et évaluer la pureté du ligand.

De plus, le potentiel antioxydant de ces ligands dérivés de l'histamine a été évalué par des tests *in vitro* rigoureux. L'activité antioxydante est d'une importance capitale en raison de son association avec divers bienfaits pour la santé, notamment la possibilité de lutter contre les troubles liés au stress oxydatif. Les résultats préliminaires indiquent une activité antioxydante significative de nos ligands, soulignant leur potentiel en tant qu'agents thérapeutiques.

Cette enquête interdisciplinaire relie les domaines de la synthèse organique, de la caractérisation chimique et de l'évaluation de la bioactivité. Les résultats offrent des informations précieuses sur la conception et le développement de ligands dérivés de l'histamine ayant des applications potentielles en pharmacologie et en médecine. Ces recherches soulignent l'importance d'exploiter les composés naturels comme source d'inspiration pour le développement de nouvelles molécules bioactives.

Mots clés : Applications chimiques, Synthèse et caractérisation, Potentiel antioxydant, Composés bioactifs et Amine biogène.



EFFECT OF THE LEAVING GROUP ON THE ENZYMATIC ENANTIOSELECTIVITY DURING THE HYDROLYSIS REACTION OF RACEMIC ESTERS

Samra RAZI, Saoussen ZEROR, Mounia MERABET-KHELASSI.

Badji Mokhtar Annaba University Faculty of Science. Department of Chemistry L.C.A.E.

Ecocompatible Asymmetric Catalysis Laboratory

samrarazi23@gmail.com

Abstract:

The enzymatic kinetic resolution through hydrolysis is one of the most important, fundamental and practical pathways to access optically enriched bioactive compounds¹.

In this context, we report an efficient enantioselective cleavage of the acyl moiety of a set of α -phenylethyl esters with different chain lengths catalyzed by *Candida antarctica* lipase B (**CAL-B**) by comparing two approaches: anhydrous medium with sodium carbonates and micro-aqueous medium. The cleavage is carried out in an organic solvent, in the presence of Na₂CO₃ in the first case, and by adding a drop of water in the second one. A strong influence of the acyl donor leaving group was shown, with a significant difference in **CAL-B** reactivity and selectivity depending on the structure of the acyl group. The obtained results show the effectiveness of acyl cleavage in the presence of sodium carbonate, particularly for the fatty esters ($E \gg 200$). For the conventional hydrolysis in biphasic media, we optimized the minimum amount of water required, and demonstrated the limitations of micro-aqueous conditions for ester hydrolysis.

Thus, the alkaline enzymatic hydrolysis route remains the best alternative for the cleavage of long-chain aliphatic acyl esters, which can be very effective for the enantioselective hydrolysis of fatty esters. In Conversely, micro-aqueous conditions are less suitable and only compatible with esters having a short-chain leaving group.

Key words: *CAL-B* - Ethyl α -phenyl esters- Acyl cleavage - Anhydrous medium - Micro-aqueous medium

References:

1. Pavel RN Curr Opin Drug Disc Dev, Microbial/enzymatic synthesis of chiral pharmaceutical intermediates, Current Opinion in Drug Discovery & Development, 6(6):902-920 (2003)
b. Mcconnell O, Bach A, Balibar C, Enantiomeric Separation and Determination of Absolute Stereochemistry of Asymmetric Molecules in Drug Discovery—Building Chiral Technology Toolboxes. Chirality 19: 658–682, (2007)



ENANTIOSELECTIVE REDUCTION OF AROMATIC KETONES BY CATALYSIS WITH RUTHENIUM COMPLEXES

Samra RAZI, Saoussen ZEROR

*Badji Mokhtar Annaba University Faculty of Science. Department of Chemistry L.C.A.E.
Ecocompatible Asymmetric Catalysis Laboratory*

samrarazi23@gmail.com

Abstract:

Chiral secondary alcohols are basic intermediates in the synthesis of many target molecules, particularly in the preparation of biologically active products.¹The asymmetric transfer hydrogenation in water is an alternative method to perform reactions under mild conditions with high enantioselectivities and have been widely employed for the preparation of chiral alcohols. In this area,² various ligands for the ruthenium-catalyzed enantioselective reduction of ketones in water have been investigated. We have compared the the enantioselectivity of the catalytic system using the ruthenium coordinated by four ligands of different structures, three of amino acid type and proline amide for the enantioselective reduction of prochiral ketones in the water. Our results show that the Ru (II) - (L) -proline catalyst is particularly effective for the reduction of heterocyclic aromatic ketones. It is noted that the enantioselectivity of the reaction is variable; it depends on the nature of the ligand and the structure of the substrate to be reduced.

In conclusion, reduction catalyzed by ruthenium complexes in water provides an attractive approach to access chiral alcohols with excellent enantiomeric excess.

Keywords: asymmetric catalysis; hydride transfer; reduction; ruthenium, chiral alcohol.

References :

- ¹R. Mahrwald. (2004). Modern Aldol Reactions, Vol. 1: Enolates, Organocatalysis, Biocatalysis and Natural Product Synthesis. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim. 3-527-30714-1. a)
Raminelli, C., Comasseto, J. V., Andrade, L. H., & Porto, A. L. M. (2004). Kinetic resolution of propargylic and allylic alcohols by *Candida antarctica* lipase (Novozyme 435). *Tetrahedron Asymmetry*, 15(19), 3117–3122. <https://doi.org/10.1016/j.tetasy.2004.08.022>.

DESIGNE OF GOLD NANOPARTICLES BEARING THIOUREIDO-SUBSTUTED BENZENESULFONAMIDE

Maamar STITI^a Habiba BOUZIT^{a,b}, Abdel-Ghani BOUDJAHM^a

^aLaboratoire de Chimie Appliquée. Université 8 Mai 1945, BP 401, 24000 Guelma, Algérie.

^bResearch Centre in Analytical Chemistry and Physics (CRAPC), BP 248, Algiers RP, Algiers 16004, Algeria

E-mails: stiti.maamar@gmail.com ; Tel : 0697875281 ; Fax : 037 21 58 55

Abstract

This paper presents an efficient strategy for the immobilization of a thioureido- substituted benzenesulfonamide onto the surface of gold nanoparticles (AuNPs). The resulting stable nanoparticles with an average size of 3.5 nm have been achieved by a facile and high-yielding one phase method using dimethylsulfoxide (DMSO) as solvent and sodium tetrahydridoborate (NaBH₄) as the reducing agent.

Gold nanoparticles so-prepared were well characterized by transmission electron microscopy (TEM), powder X-ray diffraction measurements (XRD), and UV-visible spectrophotometry. Preliminary studies suggest that these (AuNPs) linked to thiouriedo-benzenesulfonamide ligand via hexanethiol spacer could act as potential biomedical applications for selective carbonic anhydrase inhibition.

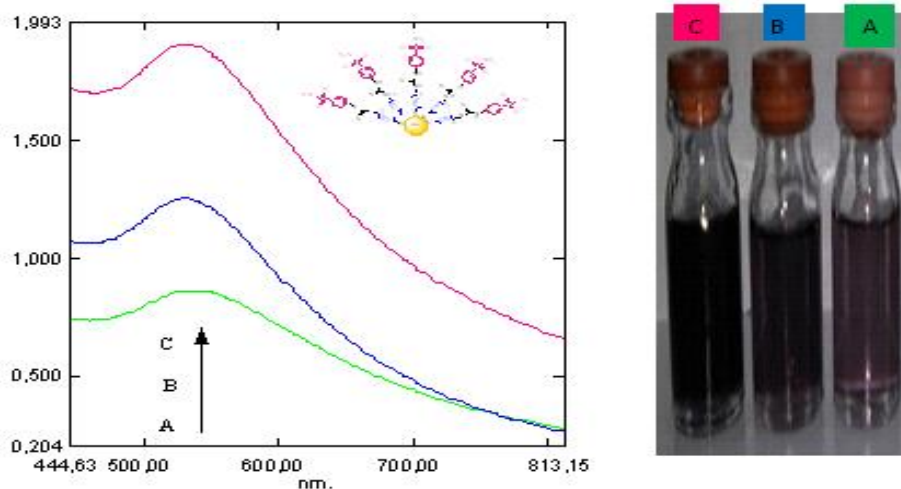


Figure 1. UV-visible spectrum of gold nanoparticles taken avarious concentrations:A, B, C

Keywords

Drug delivery, Gold nanoparticles, Thioureido-benzenesulfonamides, Selective inhibition, Human carbonic anhydrase isoform IX (hCA IX).

References

- [1] Remko M, Kozišek J, Semanova J, Gregan F, Synthesis, crystal and molecular structure of two biologically active aromatic sulfonamides and their hydrochloride salts. *J Mol Struct* 973, 18–26, 2010.
- [2] Jean-Yves Winuma, Fabrizio Carta b, Carol Ward c, Peter Mullen c, David Harrison d, Simon P. Langdon c, Alessandro Cecchi b, Andrea Scozzafava b, Ian Kunkler e, Claudiu T. Supuran Ureido-substituted sulfamates show potent carbonic anhydrase IX inhibitory and antiproliferative activities against breast cancer cell lines *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* 22 (2012) 4681–4685



- [3] L. A. Dykman¹, N. G. Khlebtsov Gold Nanoparticles in Biology and Medicine: Recent Advances and Prospects VOL. 3 N 2 (9) (34-55)2011 | ACTA NATURAE |
- [4] Dykman, L., Khlebtsov, N., 2012. Gold nanoparticles in biomedical applications: Recent advances and perspectives. Chem. Soc. Rev. 41 (6), 2256–2282.
- [5].Pacchiano F, Carta F, Vullo D, Scozzafava A, Supuran C T Bioorg Med Chem Lett (2011), 21 102–105.

SYNTHESE ET CARACTERISATION DE NOUVEAUX HETEROCYCLES AZOTES DE TYPE QUINOLEINES

Miloudi Yousra^{a,b}, **Kedjadja Allaoua**^{b,c}, **Sofiane IKHLEF**^a et **MERDES Rachid**^c

^a Laboratoire d'obtention de substances thérapeutique – LOST. Département de chimie, Faculté des Sciences exactes, Université constantine 1, Algérie.

^b Laboratoire de recherche sur la physico-chimie des surfaces et interfaces – LRPCSI, Département de chimie, Faculté des Sciences, Université 20 Aout 1955 Skikda 21000, Algérie

^c Laboratoire de chimie Appliquée. Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 08 Mai 1945 Guelma 24000, Algérie.

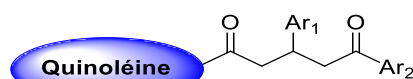
E-mail: yousrayoussi97@gmail.com, kedjadjaalla@yahoo.fr

Résumé :

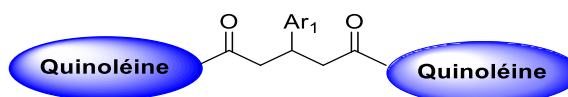
Les hétérocycles constituent le squelette de base pour une grande variété de composés d'intérêts chimique, biologique, pharmacologique et industriel. La quinoléine est un composé organique aromatique hétérocyclique. Il a pour formule C₉H₇N et a, d'abord, été obtenu à partir de goudron de houille en 1834 par Runge [1]. Le goudron de houille reste la principale source de quinoléine commerciale. La quinoléine et ses dérivés jouent un rôle important dans la synthèse de produits naturels et en tant qu'agents thérapeutiques. Ces dérivés présentent une classe importante pour le développement de nouveaux médicaments largement répandus [2]. Les dérivés de la quinoléine sont connus pour leur large spectre d'activité comme antipaludéens, anticancéreux, antibactériens, antifongiques, anti-tumoraux, antiviraux, antioxydants, anti-inflammatoires et inhibiteurs de corrosion [3-5].

Nombreux programmes de recherche ont été consacrés à la mise en place de nouvelles méthodes de synthèse de nouvelles molécules hétérocycliques quinoléiniques [6]. Dans ce contexte, nous présentons dans ce travail un protocole efficace et pratique pour la synthèse de nouveaux hétérocycliques quinoléiniques.

Une série de dérivés asymétriques/symétriques de 3-arylpentane-1,5-dicétone ont été synthétisés via l'addition directe de Michael de chalocones avec des arylméthylcétone. Les structures des composés préparés ont été confirmées par les méthodes spectroscopiques usuelles RMN-¹H, RMN-¹³C, IR et spectrales de masse.



Diones asymétriques



Diones symétriques

Mots Clés : Hétérocycles azoté, Quinoléine, addition de Michael

Références :

[1] F. Runge, *Quinoline. PoCs. Ann.* **1834**, p. 68-72.

[2] Y. Morimoto, F. Matsuda, H. Shirahama, *Synlett.*, **1991**, 03, 202-203.

[3] Y. Q. Hu, C. Gao, S. Zhang, L. Xu, Z. Xu, L. S. Feng, X. Wu, F. Zhao, *Eur. J. Med. Chem.*, **2017**, 139, 22-47.

[4] R. Musiol, J. Jampilek, V. Buchta, L. Silva, H. Niedbala, B. Podeszwa, A. Palka, K. Majerz-Maniecka, B. Oleksyn, J. Polanski, *Bioorg. Med. Chem.* **2006**, 14(10), 3592-3598.

[5] A. M. Fouda, *Med. Chem. Res.*, **2017**, 26, 302-313.

[6] a) A. Kedjadja, E. Kolli, A. Bouraiou, R. Merdes, and N. Haddour, *Molbank.*, **2015**, 2015(4), M868. b) A. Kedjadja, A. Bouraiou, and R. Merdes, *International Journal of Organic Chemistry*, **2018**, 8, 105-114.

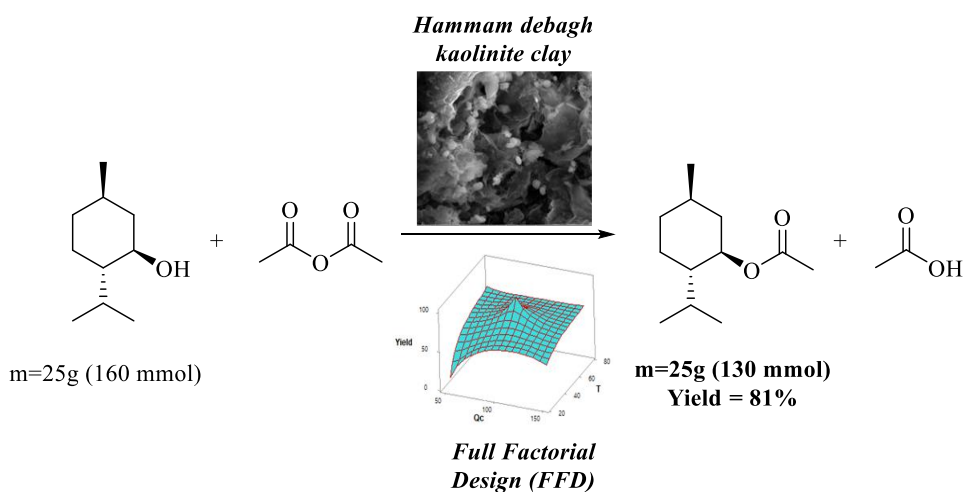
FULL FACTORIAL OPTIMISATION OF TERPENE ACYLATION WITH *HAMMAM DEBAGH* KAOLINITE CLAY.

Mourad Boukachabia¹, Hacene Bendjeffal², Mounia Merabet Khelassi¹
mourad_mgchimie@yahoo.fr

1 *Ecocompatible Asymmetric Catalysis Laboratory (LCAE), Badji Mokhtar Annaba-University, B.P. 12, 23000, Annaba, Algeria*

2 *Laboratory of Physical Chemistry and Biology of Materials, Higher Normal School of Technological Education (ENSET), Skikda, 21000, Algeria*

A statistical methodology was effectively employed to optimize the acylation process of *l*-menthol using natural kaolin as an environmentally friendly catalyst. The investigation focused on the primary variations of operational factors, such as solvent volume, acyl donor quantity, temperature, and the catalytic activity of kaolin. The study employed a full factorial design (FFD) to determine the optimal conditions for each parameter affecting the progression of *l*-menthol acylation. Continuous monitoring of the reaction's kinetic profile through gas chromatography (GC) revealed complete conversion within 30 minutes of reaction time. This environmentally sustainable process was further extended to other monoterpenic alcohols, resulting in acetate yields ranging from 45% to 90%.





STUDY OF THE ADSORPTION OF CADMIUM ON AN ACTIVATED CARBON FROM ALGAE

N. Bengourna^a, A.R. Nadji^b, I. Ghouafria^b, M. Hemida,

^a *Laboratoire des Silicates, Polymères et des Nanocomposites (LSPN).*

^b *Laboratoire d'analyse industrielle et de génie des matériaux - LAIGM*

Abstract

Heavy metals are present in nature and in all compartments of the environment, but often in very small quantities. However, the sums can be enhanced by accumulation under the influence of human activities, and thus constitute a major source of water pollution.

This work focuses on the ability of activated carbon prepared from *algae* to adsorb cadmium in an aqueous medium. A systematic study of various parameters (quantity of support, contact time, initial concentration, temperature, pH) was carried out. The results obtained showed that the cadmium ions are adsorbed quite quickly during the first minutes to reach a yield greater than 99% after 30 min of adsorbate-adsorbent contact. Kinetic modeling of Cd²⁺adsorption shows a better fit to the pseudo second order model.

Keywords: Adsorption, Kinetics, Isotherms, Cadmium, *algae*, Activated carbon.



ELABORATION OF ELECTROLYTIC DEPOSITS BASED ON NICKEL WITH AN ELECTRO-CATALYTIC EFFECT

Ilhem DJAGHOUT¹, Rabah KSOURI², Widad DRISSI¹, Mohamed Lyamine CHELAGHMIA¹,
Abed Mohamed Affoune¹

¹Laboratoire d'analyse industrielle et génie des matériaux, Université 8 Mai 1945 Guelma

²Laboratoire de chimie appliquée, Université 8 Mai 1945 Guelma

Faced with economic and environmental requirements, alongside the ever-increasing demand for energy, the search for new clean and advantageous sources, as a substitute for fossil fuels, is becoming essential and preponderant. Hence the interest in renewable, inexpensive and environmentally friendly sources of energy. Researchers have therefore turned to hydrogen as the element with the most energetic properties and favorable virtues for a powerful but clean industry. Our objective in this work is to investigate nickel electrodes with electro-catalytic effect from different baths. The results obtained showed that the electrodes from the bath of Watts + SDS at 3M NaOH and BND + SDS at 5 M NaOH give better results towards the hydrogen evolution reaction. The addition of SDS as a surfactant in nickel plating baths has a positive effect on the electrodes produced, reducing the density of the corrosive current, improving the morphological appearance and the kinetic properties of the deposit.

Keywords: Hydrogen Evolution Reaction, Nickel, Electrocatalyst, Cyclic Voltammetry.



ULTRAFAST SYNTHESIS OF METAL DIBORIDE USING ELECTRIC FIELD-ASSISTED PROCESSING TECHNIQUE

Ahmed Taibi¹, Eva Gil-González², Pedro E. Sánchez-Jiménez², Antonio Perejón², Luis A. Pérez-Maqueda².

¹*Department of Process Engineering, Faculty of Science and Technology, University of Guelma, 24000 Guelma, Algeria.*

²*Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, C. S. I. C.-Universidad de Sevilla, C. Américo Vespucio n° 49, 41092 Sevilla, Spain*

Abstract:

Ultra-high-temperature ceramics (UHTCs), especially metal diboride (MB_2) compounds, are an emerging class of materials that can be used in extreme environments. TMB_2 are generally defined as a compound with a melting point of more than 3.000°C , good thermal conductivity, relatively low electrical resistance, excellent thermochemical stability, and mechanical properties. MB_2 are often synthesized by conventional thermal reduction methods e.g. boro/carbothermal reduction (BCTR), mainly by reducing metal oxides with carbon and boron source at high temperatures. The main advantages of conventional thermal reduction methods are their simplicity, easy to handle reaction control, and cheap raw materials. However, these synthesis techniques require temperatures above 1500°C for a long period, making the process costly in terms of energy and time.

In recent years, Electric field assisted methods has become a rapid and energy-efficient method for materials processing and preparation, and recent attention has been paid to electric heating. The effectiveness during such processing is, however, highly dependent on the Joule heat generated by the current, enabling extremely fast heating and cooling rates of the sample. This research report an electric field assisted processing methodology for the instantaneous synthesis of phase-pure Zirconium diborides (ZrB_2). The advantages of this methodology are explained in detail and can be summarized as follows: highly efficient, it allows a considerable reduction in terms of energy and time; universal, several MB_2 can be prepared; and flexible, different experimental parameters can be set to obtain the desired phase.

Keywords: Ultra-high-temperature ceramics; Metal diborides; Boro/carbothermal reduction; Field-assisted processing; Joule heating.



CYCLIC VOLTAMMETRY ANALYSIS OF THE BRIGHTENING EFFECT OF *DAPHNE GNIDIUM L* ON NICKEL DEPOSITS

Hayet Belbah¹, Karima Belguidoum¹, Abed Mohamed Affoune², Habiba Amira-Guebailia¹

¹ Laboratoire de Chimie Appliquée, Université 8 Mai 1945 Guelma, BP 401, Guelma 24000, Algérie.

² Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux, Université 8 Mai 1945 Guelma, BP 401, Guelma 24000, Algérie.

Abstract

- ✓ Electrolytic nickel plating is an electrochemical process used to enhance the properties of specific metal surfaces. The luster of the plating is one of the most critical qualities, particularly in the context of decorative coatings.
- ✓ The objective of our work is to incorporate new natural brighteners into the nickel electroplating bath to enhance the appearance of the deposits. Such research is necessary to study the effects of specific electrolysis parameters that significantly influence the quality of the deposit, especially its brilliance. Initially, to achieve maximum brightness, the temperature should be maintained at 55-58 °C, the current density at 2-4 A/dm², and the pH level within the range of 3.5 to 4.5.
- ✓ The electrodeposition of nickel was investigated in the presence of *Daphne gnidium L.* (DGL), a plant known for its rich reserves of polyphenols, particularly coumarins, as a replacement for two synthetic primary and secondary brighteners, glycerol (Gly), and formaldehyde (FA).
- ✓ The kinetic study via cyclic voltammetry demonstrated that this plant has an inhibitory effect on the nickel reduction reaction comparable to that of glycerol and formaldehyde.
- ✓ Examination of gloss, morphology, and corrosion resistance revealed the possibility of obtaining nickel deposits as bright, uniform, and resistant in the presence of plant powder (DGLP), similar to those achieved with glycerol or formaldehyde.
- ✓ The fundamental concept of directly utilizing *Daphne gnidium L.* powder in the Watts bath as an additive significantly reduces the time and cost of nickel electrodeposition while providing an environmentally friendly substitute for harmful synthetic substances.

Keywords: Electrodeposition, Watts bath; *Daphne gnidium L.*, Brighteners, Cyclic Voltammetry



INVESTIGATION OF THE ANTIBIOLOGICAL PROPERTIES OF A SYNTHESIZED SCHIFF BASE

Manal CHETTIBI^{1*}, Saida SERIDI¹, Samah BOUKHAROUBA¹, Fatma MERABTI¹

Authors affiliation

¹ Laboratory of Physical Chemistry, University of 8 Mai 1945, BP 401, Guelma, Algeria

*Corresponding Author (only): email: chettibi.manal@univ-guelma.dz

Abstract

Schiff bases are highly valued in the fields of biochemistry and medicine due to their significant biological activities. These activities include anti-inflammatory, analgesic, antimicrobial, anticonvulsant, antitubercular, anticancer, antioxidant, anthelmintic, antiglycation, and antidepressant properties [1],[2].

In this study a Schiff base was successfully synthesized and characterized using the physicochemical methods such as ultraviolet and infrared. Our research has mainly focused on exploring the uses of this compound in the field of biology specifically his ability to combat microbial and fungal growth.

Keywords: Schiff base; antifungal; anti-microbial activity.

References

- [1] A. Kajal, S. Bala, S. Kamboj, N. Sharma, and V. Saini, 'Schiff Bases: A Versatile Pharmacophore', *Journal of Catalysts*, vol. 2013, pp. 1–14, Aug. 2013, doi: 10.1155/2013/893512.
- [2] O. A. El-Gammal, F. Sh. Mohamed, G. N. Rezk, and A. A. El-Bindary, 'Structural characterization and biological activity of a new metal complexes based of Schiff base', *Journal of Molecular Liquids*, vol. 330, p. 115522, May 2021, doi: 10.1016/j.molliq.2021.115522.