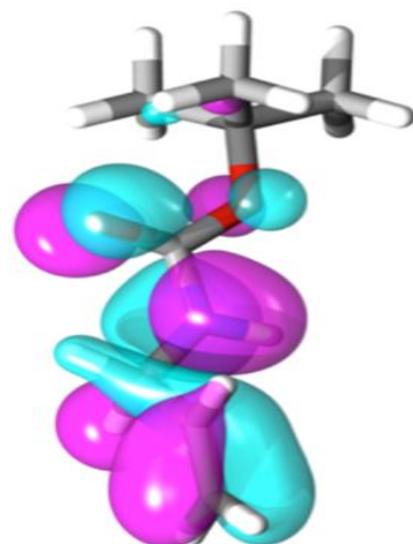
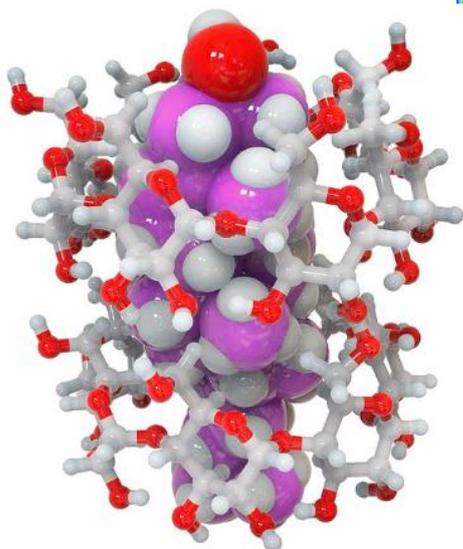


Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
Université 8 Mai 1945, Guelma  
Faculté de Mathématiques, Informatique et Sciences de la matière  
Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructures  
Laboratoire de Chimie Appliquée



# RECUEIL DES RESUMES



26 Septembre 2019  
Guelma



### PRESIDENTS D'HONNEUR

- Pr. Ellagoune S., Recteur de l'université
- Pr. Meddour A, Doyen de la faculté

### COMITE D'ORGANISATION

**Président :** Dr. Ksouri Rabah

- Pr. Merdes Rachid
- Pr. Nouar Leila
- Mr. Chelghoum Yacine
- Dr. Zekri Kamel
- Dr. Merabet Nora
- Mr. Athamni A/S
- Dr. Chaguetmi Salem
- Dr. Largate Leila
- Dr. Lafifi Ismahan
- Dr. Lachi Nadia
- M<sup>me</sup> Bouchemela Houria
- M<sup>me</sup> Boulouf Assia
- M<sup>elle</sup> Araar Nacira
- M<sup>elle</sup> Belaz Amira

L'organisation du 1<sup>er</sup> Séminaire National sur la chimie Appliquée et la Modélisation Moléculaire 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.

### COMITE SCIENTIFIQUE

**Présidente :** Pr. Madi Fatiha

- Pr. Merdes Rachid, Université de Guelma
- Pr. Nouar Leila, Université de Guelma
- Pr. Liacha Messaoud, Université d'Annaba
- Pr. Gheid Abdelhak, Université de souk Ahras
- Pr. Nigri Soraya, Université de Guelma
- Pr. Boudjahem Abdelghani, Université de Guelma
- Pr. Berredjem Yamina, Université de souk Ahras
- Dr. Fisli Hassina, Université de Guelma
- Pr. Guebailia Habiba, Université de Guelma
- Pr. Bendjedou Amel, Université de souk Ahras
- Dr. Djemil Rayenne, Université de Guelma
- Pr. Belkheri Lotfi, Université de Constantine
- Pr. Affoune Abed Mohamed, Université de Guelma
- Pr. Oumeddour Rabah, Université de Guelma
- Dr. Ksouri Rabah, Université de Guelma
- Dr. Bouhadiba Abdelaziz, Université de Skikda
- Dr. Guendouzi Abdelkrim, Université de Saida
- Dr. Chaguetmi Salem, Université de Guelma
- Dr. Brahim Houari, Université de Saida



1<sup>er</sup> Séminaire sur la Chimie Appliquée &  
la Modélisation Moléculaire  
Guelma, 26 septembre 2019



## SOMMAIRE

**THEMES**

**PAGES**

CHIMIE APPLIQUEE ..... 3

MODELISATION MOLECULAIRE..... 44

sncamm'2019  
Université 8 Mai 1945, Guelma B.P. 401,24000, Algérie  
[www.univ-guelma.dz](http://www.univ-guelma.dz)



## CHIMIE APPLIQUEE

3-hydroxy-5,6-epoxy-ionone et dehydrovomifoliol, deux monoterpènes isolés de l'espèce centaurea omphalotricha	E. Kolli	6
Réaction one-pot : synthèse de nouvelles molécules à visée thérapeutique du type 6-amino-2-pyridones quinoléique	A. Kedjadja	7
Design, synthesis and antibacterial activity against MDR GRAM-negative bacteria of N-[(Phenyl) Sulfonyl] Perhydro-1,3-Oxazin-2-One	M. Nessaib	8
Etude expérimentale et modélisation théorique des inhibiteurs de corrosion	I.Saifi	9
Synthèse des nouveaux composés hétérocycliques "pyrazolidine et isoxazolidine" et leurs activités antimicrobiennes	T.Yousfi	10
Spectroscopic, in silico pharmacokinetic investigations and molecular docking analysis of 2-oxo-N-Phenyl-3-Oxazolidinesulfonamide	B. Bendif	11
Photodegradation of 2-MBT using NCP as heterogeneous photocatalyst (characterization, kinetics and mechanism study)	R.S. Zakaria	12
Caractérisations (XPS-RRX-FTIR-ATD) de la baryte naturel région de wilaya de Khenchela -Algérie	K.Abdellaoui	13
Etude de l'adsorption d'une molécule thérapeutique à l'interface d'une pseudo-membrane moléculaire à base de tensioactif non- ionique (Triton -RX100)	R. Aribi	14
Comparative study of "juniperus phoenicea" essential oils antibacterial activity	H.Beddiar	15
Etude de l'activité anti-oxydante du Rhizome d'épice	M.Benmabrouk	16
Réutilisation des nanomatériaux pour la fabrication des cellules solaires organiques	Y.Berredjem	17
Optimisation de la production de biodiesel à partir des huiles alimentaire usagées	C. Bezazi	18
Synthèse et étude structurale de nouveaux diazaphospholidine par cyclisation intermoléculaire	F. Bouchareb	19



Optimisation des paramètres de déposition des couches minces Ni-Mo obtenues par électrodéposition en utilisant la méthode de Taguchi	H.Boudjehem	20
Removal of a cationic dye from aqueous solution by local natural clay	M.Boulahbal	21
Synthèse et réactivité d'une série de sulfonamides couples à l'acide lipoïque	H.Bouzit	22
la détermination du taux de migration globale : cas d'emballages destinés au conditionnement d'eau minérale le polyéthylène téréphtalate (emballage dans l'industrie alimentaire)	W.Cheddadi	23
Activité antioxydante de l'huile d'olive	L.Chekatti	24
Photodégradation d'un colorant textile	S.Cherif	25
Synthèse et caractérisation des N-(N-BOC, N-(2-Chloroéthyl)-Sulfamoyl)-Aminoester de <i>Tertbutyle</i>	N.Cheghib	26
Etude de l'influence des paramètres d'électrolyses sur la qualité des dépôts de chrome	T.Derabla	27
Characterization and reactivity of Ni-Ag/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> nanoparticles prepared by chemical method	M.Derdare	28
Electrodeposition and properties of nickel composite coatings Ni-SiO <sub>2</sub>	I. Djaghout	29
Etude physicochimique des complexes de l'antithyroïdien de synthèse carbimazole avec une cyclodextrine modifiée	H. Fisli	30
Effet de l'emballage en plastique sur la qualité de l'huile d'olive algérienne	S. Nigri	31
Traitement d'un polluant organique en milieu aqueux par un procédé d'oxydation catalytique	M. Grabsi	32
Characterizations of matrix resin TRM6 and CFRP composite by DMA and impedance spectroscopy at different cure temperature	R. Ksouri	33
Caractérisation et minéralisation de la barytine gisement d'Ain Mimoun Khenchela	D.Lekmine	34
Simultaneous sorption of malachite green and Rhodamine b on a new granules based on surfactant-modified pillared-clay and gluten	A. Louadj	35



UPLC-DAD analysis, antioxidant capacity and the correlation with phenolic compounds, content in the root methanolic extract of asphodelus microcarpus	N. Mayouf	36
Etude des propriétés électroniques, structurales et de la relation structure-activité des dérivés de thiazolidine-2,4-dione par la modélisation moléculaire	S.Medjahed	37
A new analytic method completed for the diacetyl assay in milk and dairy products	A . Meribai	38
Etude théorique et expérimentale de la complexation de l'acide lipoïque avec le Cu(II)	M.Stiti	39
Structural behavior of electrodeposited Ni-Fe thin films using fractional factorial design method	A.Talbi	40
Etude des propriétés physico-chimique interfaciales d'une pseudo-membrane moléculaire à base de tensioactif zwitterionique sulfobetaine (Sb3-12) en présence d'une molécule thérapeutique	F.Yssaad	41
Nonlinear regression method for adsorption isotherm of organic dyes by activated carbon of vegetable origin : Comparison of error analysis criteria	H. Zeghache	42
Analyse par fluorescence X de l'eau potable de la ville de Constantine après préconcentration	S.Zeroual	43

## 3-hydroxy-5,6-époxy-ionone et déhydrovomifoliol, deux monoterpènes isolés de l'espèce *centaurea omphalotricha*

Elhadj KOLLI<sup>a,d</sup>, Allaoua KEDJADJA<sup>b</sup>, Nadjoua CHEGHIB<sup>c</sup>, Samir BENAYACHE<sup>d</sup>  
et Fadila BENAYACHE<sup>d</sup>.

<sup>a)</sup> *Laboratoire des silicates, polymères et des nanocomposites (LSPN), faculté des sciences et de la technologie, Université 08 Mai 1945 Guelma 24000, Algérie.*

<sup>b)</sup> *Laboratoire de chimie Appliquée (LCA). Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 08 Mai 1945 Guelma 24000, Algérie.*

<sup>c)</sup> *Laboratoire de Chimie Physique (LCP), Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 8 Mai 1945 Guelma 24000, Algérie.*

<sup>d)</sup> *Unité de recherche Valorisation des Ressources Naturelles, Molécules Bioactives et Analyses Physicochimiques et Biologiques (VARENBIOMOL), Département de Chimie, Faculté des Sciences Exactes, Université Constantine 1, 25000 Constantine, Algérie.*

### Résumé :

Les centaurees sont des plantes herbacées annuelles, bisannuelles ou vivaces, à feuilles alternes, les fleurs sont toutes tubulées, multiflores homomorphes ou dimorphes, de couleur varie entre le rose, le pourpre, le violet et le jaune [1]. De nombreuses espèces du genre *Centaurea* sont utilisées dans la médecine populaire pour soigner certaines maladies comme le diabète, le rhumatisme, la malaria et l'hypertension [2].

*Centaurea omphalotricha* est parmi les espèces de la famille des Astéracées, c'est une plante saharienne endémique pour l'Algérie et la Tunisie, elle a fait l'objet peu de travaux scientifiques [3]. A cet effet nous avons voulu d'étudier les parties aériennes de cette plante en coté phytochimique. L'investigation phytochimique de la fraction chloroformique de cette plante nous a permis d'isoler et d'identifier plusieurs produits à l'état pur et natif, entre autres, deux monoterpènes, 3-hydroxy-5,6-époxy-ionone **1** et déhydrovomifoliol **2** dont la structure est élucidée ci-après :

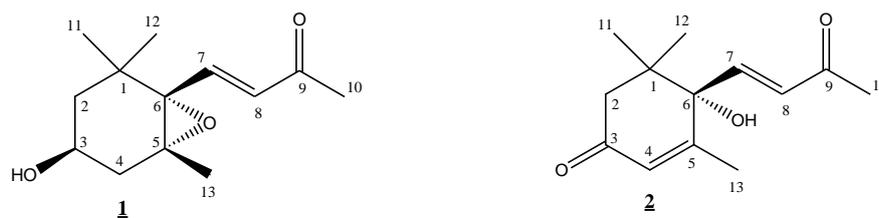


Schéma 1 : Structure finale des composés **1** et **2**.

**Mots clés:** Astéracées, *Centaurea*, *Centaurea omphalotricha*, monoterpènes.

## Réaction one-pot : synthèse de nouvelles molécules à visée thérapeutique du type 6-amino-2-pyridones quinoléique

\* Allaoua KEDJADJA<sup>a</sup>, Elhadj KOLLI<sup>b</sup> et Rachid MERDES<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire des silicates, polymères et des nanocomposites, Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 08 Mai 45 Guelma 24000, Algérie*

<sup>b</sup> *Laboratoire de chimie Appliquée. Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 08 Mai 45 Guelma 24000, Algérie*

\* E-mail: [kedjadjaalla@yahoo.fr](mailto:kedjadjaalla@yahoo.fr)

### RESUME

Ces dernières années, la chimie des hétérocycles a connu un grand essor grâce notamment à la mise au point de méthodologies de synthèse nouvelles, ou à l'adaptation et/ou la modification de procédures classiques avec l'utilisation de milieux réactionnels inédits, de nouveaux catalyseurs et surtout sont devenues plus performantes et moins coûteuses.

La dihydropyridine (DHP) est un motif structural appartenant aux hétérocycles à six chaînons dont l'atome d'azote occupe l'un de ses sommets. C'est une substance synthétique qui a trouvé des applications dans divers domaines notamment en biologie et en médecine. Les études pharmacologiques ont montré que la dihydropyridine et ses dérivés sont utilisés comme des agents anti-amnésiques, anti-convulsants, antidiabétiques, anti-inflammatoires [1]. En plus de leur importance biologique, ils sont considérés comme des partenaires clés en synthèse organique, on les retrouve aussi comme intermédiaires dans plusieurs réactions d'oxydation, de réduction, d'alkylation [2],...etc.

La stratégie globale de ce travail est basée fondamentalement sur l'utilisation de réactions adéquates, simples et efficaces de mise en œuvre facile dans la préparation de composés hybrides quinoléine-pyridinone. Une étude spectroscopique détaillée (IR, RMN<sup>1</sup>H, RMN<sup>13</sup>C et RX) a été réalisée afin d'identifier les structures proposées et qui seront mis à disposition des biologistes pour faire l'objet d'évaluations et d'une étude de la relation structure-activité.

L'ensemble de ces travaux préliminaires est résumé dans le schéma synthétique général qui suit:

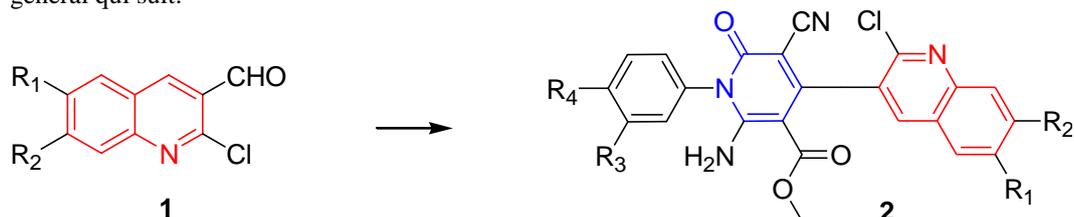


Schéma 1: Synthèse nouvelle gamme du type 6-amino-2-pyridone quinoléique

**Mots-clés:** réaction one-pot, quinoléine, pyridone, hétérocycle



## Design, synthesis and antibacterial activity against MDR GRAM – negative bacteria of N-[(Phenyl) Sulfonyl] Perhydro- 1,3-Oxazin-2-One

NESSAIB Mounir <sup>a, b, \*</sup>, MELIANI saida<sup>c</sup>, BENSOUILAH Nadjia <sup>d, e</sup>, BENDIF  
Basma<sup>e</sup>, CHERAIET Zinelaabidine<sup>a, b</sup>, DJAHOUDI Abdelghani <sup>c</sup>, BOUKHARI  
Abbas<sup>b</sup> and ABDAOUI Mohamed <sup>e</sup>

<sup>a</sup> Higher School of Industrial Technologies of Annaba, Cité Saf-saf, Annaba-Algeria.

<sup>b</sup> Laboratory of Organic Synthesis, Modelling and Optimization of Chemical Processes,  
Faculty of Sciences, Badji Mokhtar University, Annaba, Algeria

<sup>c</sup> Microbiology Laboratory, Faculty of Medicine, Badji Mokhtar University, Annaba, Algeria

<sup>d</sup> Laboratory of applied organic chemistry, faculty of chemistry (LAOC), University of  
Sciences and Technology Houari Boumediene, USTHB, El-Alia, Bab-Ezzouar, Algeria

<sup>e</sup> Laboratory of applied chemistry (LAC), University of May 8th, 1945, Guelma, Algeria

### ABSTRACT:

Infections in intensive care units (ICUs) are becoming not only recurrent but also increasingly complicated. They cause high morbidity and mortality over the world. These infections are usually caused by multi-drug resistant bacteria (MDR), especially Gram negative-bacilli (GNB), where their prevalence in Algeria and all over the world increases in a worrying way and represents a serious public health problem and There are only a limited number of antibacterial agents available to treat these highly resistant organisms, most of which have significant toxicity. Therefore, there is an urgent need of new classes and broad-spectrum Gram-negative antibiotics.

As part of our ongoing research efforts to develop new antibacterial agents acting on novel molecular targets, we have reported In our previous work, the design, the synthesis and antibacterial activity of title compound against three pathogenic strains [6]. In the present work, The antibacterial activity in vitro of title molecule was investigated against eight (08) standard and clinical MDR Gram-negative strains applying the method of dilution and minimal inhibition concentration (MIC) methods. The titled compound exhibited significant activity, against carbapenem-resistant *P. aeruginosa* with a MIC value of 2-4 µg/mL. this (NF-GNB) stain is one of the dominant Metallo-β-lactamase in North Africa and all over the world.

**Key words:** Gram-negative bacilli, Metallo-β-lactamases, MDR, sulfonamide, perhydro-1,3-oxazinone.



---

## Étude expérimentale et modélisation théorique des inhibiteurs de corrosion

*Saifi issaadi et Tahar Douadi*

*Email : issaadi-s@univ-setif.dz*

*Laboratoire d'électrochimie des matériaux moléculaire et complexe (LEMMC)  
Département de chimie, Université de Sétif -1 Algerie*

### **Résumé**

L'objectif de notre travail concerne en premier lieu la synthèse de nouveaux composés, ces composés présentent un certain nombre de caractéristiques, notamment la présence des électrons  $\pi$  délocalisés du cycle aromatique et des hétéros atomes tels que l'atome d'azote et d'oxygène, la caractérisation par les différentes techniques physico chimiques, par la suite, ces composés sont testés dans l'inhibition de la corrosion de cuivre en utilisant des mesures potentiodynamique (courbes de polarisation et impédance électrochimique), et afin de donner plus d'interprétations aux résultats expérimentaux, des calculs théoriques ont été réalisés à l'aide de la méthode DFT (Density Functional Theory) au niveau B3LYP avec la base 6-31G (d,p), en utilisant le logiciel Gaussian 03.



## Synthèse des nouveaux composés hétérocycliques "pyrazolidine et isoxazolidine" et leurs activités antimicrobiennes

Tarek Yousfi<sup>1,2</sup>, Messiad Hanane<sup>3</sup>, Alysha Elliott<sup>4</sup>, Rachid Merdes<sup>2</sup> and Albert Moyano<sup>5</sup>

1. Division de Biotechnologie Industrielle, Centre National de Recherche en Biotechnologie, Ali Mendjli Nouvelle Ville, UV 03 BP E73, Constantine 25000, Algérie; t.yousfi@crbt.dz

2. Laboratoire de Chimie Appliquée, Département de Chimie, Université 8 Mai 1945—Guelma, BP 401, Guelma 24000, Algeria; merdesra@yahoo.fr

3. Département de Génie de l'Environnement, Faculté de Génie des Procédés, Université de Constantine 3, Ali Mendjli Nouvelle Ville, BP72, Constantine 25000, Algeria; messiad\_h@yahoo.fr

4. Institute for Molecular Biosciences, The University of Queensland, St. Lucia QLD 4072, Australia; a.elliott@imb.uq.edu.au

5. Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Facultat de Química, Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, Barcelona 08028, Catalonia, Spain

**Résumé :** La portée de ce travail couvre les modèles synthétiques de la pyrazolidine et de l'isoxazolidine et crée une image d'une zone émergente d'organocatalytique. La voie réactionnelle est proposée pour la formation d'intermédiaires d'ions iminium à partir de la réaction de Michael/Aza-Michael entre les amines et  $\alpha$ -enals substitués comme des accepteurs de Michael originaux. Nous avons étudié l'utilisation d'aldéhydes insaturés ramifiés en position  $\alpha$  avec des chaînes aliphatiques et aromatiques comme des accepteurs nucléophiles de Michael pour 1-Boc-2- (4-nitrobenzènesulfonyl) hydrazine ou 1, 2-bis (p-toluènesulfonyl) hydrazine (2b) et N-Cbz-hydroxylamine, respectivement pour obtenir des dérivés de pyrazolidine et d'isoxazolidine. Nous avons constaté que la réaction de Michael entre les  $\alpha$ -enals substitués, tels que la méthacroléine, le 2-benzylpropenal et le 2-(n-hexyl)propenal avec les hydrazines actives a lieu avec de très bons rendements (83%-99,6%) en conditions très douces, en présence de la pyrrolidine / acide benzoïque pour donner des pyrazolidine-3-ol 4-substitués (sous forme de mélanges de diastéréomères), l'oxydation ultérieure avec le pyridinium chlorochromate (PCC) donne la 3-pyrazolidinone 4-substituée correspondante avec des rendements essentiellement quantitatifs. De manière similaire, des isoxazolidinones 4-substituées sont obtenues avec des rendements excellents de 87% au 93 % en présence de N-Cbz-hydroxylamine comme réactif nucléophile. En synthèse asymétrique, l'utilisation d'éthers triméthylsilyliques de diarylprolinol chiral comme catalyseur permet la synthèse de plusieurs de ces composés optiquement actifs, dans certains cas avec une énantiosélectivité excellente arrive jusqu'à (96: 4 er). Ces dérivés de la pyrazolidine et de l'isoxazolidine ayant une utilité réelle dans la chimie médicinale, en relation avec leur activité antimicrobienne performante.

**Mots clés :** *Pyrazolidine, Isoxazolidine, Réactions de Michael/Aza-Michael, Synthèse Asymétrique, Molécules Chirales*



## Spectroscopic, in silico pharmacokinetic investigations and molecular docking analysis of 2-oxo-N-Phenyl-3-Oxazolidinesulfonamide

B. Bendif,<sup>1,2\*</sup> N.Bensouilah<sup>2</sup>, D. Khatmi<sup>3</sup>, M.NESSAIB<sup>4</sup> and M. Abdaoui<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratory of applied chemistry (LAC), University of May 8th, 1945, Guelma, Algeria

<sup>2</sup>Laboratory of applied organic chemistry, faculty of chemistry (LAOC), University of Sciences and Technology Houari Boumediene, USTHB, El-Alia, Bab-Ezzouar, Algeria

<sup>4</sup>Laboratoire de chimie computationnelle et nanostructure, Université 8 Mai 1945, Guelma, Algérie

<sup>5</sup>Laboratory of Organic Synthesis, Modelling and Optimization of Chemical Processes, Faculty of Sciences, Badji Mokhtar University, Annaba, Algeria

### ABSTRACT

The diversity and continued growth of infectious disease becomes more and more disturbing. The immoderate and inappropriate prescription of antibiotics has resulted in serious bacterial resistance and consequently a dangerous therapeutic inefficiency in addition to side effects. This has necessitated the development of new therapeutic strategies based in particular on the search for new and more powerful molecules. In order to design a new drug, our research group have synthesized and characterized a hybrid prototype that we subsequently complexed with  $\beta$ -cyclodextrin. In this work, we study an in silico biological activity investigation based on the prediction of the metabolism of this new molecule, which brings together two different antibacterial groups (considered bioactive by anticipation) with as the first therapeutic target the enzyme Dihydropteroate Synthase (DHPS) Organisms responsible for the synthesis of folic acid as well as the ribosome as second target. The theoretical study was mainly based on the prediction of activity by exploring the main site of metabolism with the use of molecular docking method which takes into account both the reactivity of the different functional groups of the substrate (Prototype) and the lateral residues of the active site of the enzyme

**Keywords:** Molecular docking; DFT; ADMET; linezolid; SulfaDrug.



## Photodégradation of 2-MBT using NCP as heterogeneous photocatalyst (characterization, kinetics and mechanism study)

Zakaria REDOUANE-SALAH\*<sup>a,b</sup>, Mouna BOULAHBAL<sup>a</sup>, Moulay Abderrahman MALOUKI<sup>a</sup>, Badis KHENNAOUI<sup>b</sup> J.A. Santaballa<sup>c</sup> and M. Canle<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Centre Universitaire Amine Elokkel El Hadj Moussa Eg Akhamouk-Tamanrasset, 11000, Algeria

<sup>b</sup>Laboratoire des techniques innovantes de préservation de l'environnement

<sup>c</sup>Chemical Reactivity & Photoreactivity Group, Department of Chemistry, Faculty of Sciences & CICA, University of A Coruña, E-15071 A Coruña, Spain

\*Corresponding author: z.rsalah@umc.edu.dz

### Abstract

This study investigate the potential efficiency of local natural clay powder (NCP) as a cost-free photocatalyst in heterogenous photo-Fenton process for the degradation of a persistent organic pollutant 2-mercaptobenzothiazole (2-MBT). Experiments were conducted at natural pH with a bath reactor equipped with a medium-pressure Hg lamp emitting mainly at 366 nm. The natural clay was characterized by SEM-EDS, UV-Vis diffuse reflectance spectroscopy, XRF and XRD analysis. The specific BET surface area measured for the clay was 30.22 m<sup>2</sup>·g<sup>-1</sup>. The photodegradation of 2-MBT follows first order (for direct photolysis) or pseudo-first order kinetics (for photocatalysis). Direct photolysis of MBT showed a negligible effect both upon 254 and 365 nm irradiation, while 42.5% and 62% of 2-MBT was eliminated in 3 h under 310 nm irradiation in the presence of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> under sunlight irradiation (using NCP), respectively. Kinetic runs carried out with 5.0·10<sup>-5</sup>M 2-MBT and 0.5g·L<sup>-1</sup>clay showed higher 2-MBT conversion and photodegradation rate at basic pH and in oxygenated media. The photodegradation of MBT is mainly attributed to reaction with HO<sup>•</sup>, leading to different intermediates that have been identified by HPLC-MS. A reaction mechanism is proposed. The highest TOC removals were obtained using UVA at pHs, in the absence of O<sub>2</sub> with 68% and 65% TOC removal respectively. The presence of oxalic acid and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> significantly enhanced 2-MBT photodegradation. The obtained results support the use of natural clay rich in iron oxides as inexpensive, clean and efficient photocatalysts for water pollutants abatement.

**Keywords:** 2-mercaptobenzothiazole, photo-Fenton process, photodegradation.



## Caractérisations (XPS-RRX-FTIR-ATD) de la baryte naturel région de wilaya de Khenchela –Algérie

K. ABDELLAOUI<sup>a\*</sup>, A. BOUMAZA<sup>a</sup> I. Kashif<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Structures, Propriétés et Interactions InterAtomiques (LASPI2A), Faculté des Sciences et Technologies, Université d'Abbes Laghrour, Khenchela 40000, Algérie.

<sup>b</sup>physics department, faculty of science, Al-Azhar university, Nasr city, Cairo, Egypt

\* Auteur correspondant: ABDELLAOUI Khedidja

Adresse e-mail: maher2009@hotmail.fr (K. ABDELLAOUI).

e-mail :charif\_boumaza@yahoo.com (A. BOUMAZA)

### Résumé

Dans ce recherche nous nous intéressons à les caractéristiques physique et chimique de la barytine crue de Ain mimoun située a la région de la wilaya de khenchela -Algérie.

La barytine est un sulfate de baryum naturel ( $BaSO_4$ ), Ce minéral est utilisé largement dans diverses industries pour ses propriétés particulières: haute densité environ de 4.48, neutralité chimique, blancheur et absence d'abrasif. , elle correspond à la composition suivante: BaO (65,70%),  $SO_3$  (34,30%). La barytine apparaît dans divers environnements géologiques seuls ou en association avec plusieurs minéraux tels que la fluorite, la Célestine, le quartz, la sphalérite ou la galène. Ce minéral est largement respecté et exploite également des mines à ciel ouvert. Notre travail a pour but de caractériser la barytine de l'état d' Ain Mimoun - Khenchela en Algérie, pendant de Observations macrographiques et analyse EDX, l'analyse DRX réalisée avec un diffractomètre PANalytical X'Pert ProMRD avec un rayonnement  $CuK\alpha$  ( $(\lambda(K\alpha1) = 0,15406$  nm,  $\lambda(K\alpha2) = 0,15444$  nm)). Les données sont recueillies avec des étapes de  $0,021^\circ$  ( $2\theta$ ), Analyse FTIR en utilisant un spectromètre Perkin-Elmer à la résolution de  $8$   $cm^{-1}$ . La technique infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) est utilisée dans le mode de transmission dans la gamme  $400 - 4000$   $cm^{-1}$ . Analyse XPS a été utilisé pour vérifier qualitativement et quantitativement la composition des différents composés en poudre. Les spectres ont été traités en utilisant le logiciel Advantage thermique V5.27. Les photoélectrons sont excités à l'aide d'un rayonnement monochromatique Al  $K\alpha$  comme source d'excitation, recueillis à  $\theta = 0^\circ$ , et aussi l'analyse thermique différentielle (ATD), analyse thermogravimétrique (ATG).

**Mots clés:** barytine Analyse XPS; Analyse FTIR; Analyse TG-ATD; Gisement Ain Mimoun.



## Etude de l'adsorption d'une molécule thérapeutique à l'interface d'une pseudo-membrane moléculaire à base de tensioactif non- ionique (Triton –RX100)

R.Aribi ; T.Fergoug ; Y.Bouhadda ; F.Yssaad ; A.Kadiri

*Laboratoire de Chimie physique des Macromolécules et interfaces biologiques, Université de Mascara, 29000, Algérie*

### Résumé

La description détaillée à l'échelle moléculaire du mécanisme par lequel l'incorporation d'un principe actif au sein de la bicouche phospholipidique n'est pas encore bien claire. Afin de modéliser cette incorporation un modèle simple se basant sur la structure chimique de la membrane est adopté. la pseudo-membrane choisie dans notre modèle est composé d'un surfactant non ionique le tritonX-100. Ce travail s'intéresse à l'adsorption de la tétracaine au niveau de cette pseudo-membrane en présence et en absence d'une molécule encapsulante la  $\beta$ -cyclodextrine. Les résultats acquis montrent qu'effectivement l'anesthésique local, sous sa forme libre et complexé, s'incorporent au sein de la pseudo-membrane.

**Mots- clés :** *Pseudo-membrane, bicouche, tensioactif non-ionique, TritonX-100, anesthésique local, encapsulation, tetracaine*



---

## Comparative study of “*Juniperus phoenicea*” essential oils antibacterial activity

Hatem Beddiar<sup>1</sup>, Boudiba Sameh<sup>1</sup>, Nacer Mohemed<sup>1,2</sup>, Karima Hanini<sup>2</sup>, Ratiba Bouakaz<sup>2</sup>, Merzoug Benahmed<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratory of Organic Materials and Heterochemistry, University of Tébessa, Algeria

<sup>2</sup>Laboratory of Bioactive Molecules and Applications, University of Tébessa, Algeria

### Abstract

The essential oils of *Juniperus phoenicea*'s aerial parts (leaves and berries) have been passed through antibacterial activity tests. the plant was harvested from the area of Tébessa (north east of Algeria) during its flowering season, the essential oils were obtained by hydrodistillation. a comparative study was made on antibacterial activity on two different ATCC bacterial strains, *Pseudomonas aeruginosa* and *Staphylococcus*. in two different years 2016 and 2019. The results showed a remarkable change on how powerful the essential oil are against the studied bacteria, to evaluate the bacterial evolution against antibacterial powers of the essential oils through time.

**Keywords:** *Juniperus phoenicea*; Essential oil; hydrodistillation



## Etude de l'activité anti-oxydante du Rhizome d'épice

Marwa Benmabrouk<sup>1</sup>, Saida Seridi<sup>1</sup>, Amira Nedjar, Khaoula Youssefi.

<sup>1</sup>Laboratoire de Chimie Physique, Université 08 Mai 1945, BP401, Guelma 24000, Algeria.  
\* E-mail : [benmabrouk.marwa@univ-guelma.dz](mailto:benmabrouk.marwa@univ-guelma.dz)

### Résumé

Depuis la nuit des temps, la première préoccupation de l'homme fut de satisfaire ses besoins alimentaires, puis il dut lutter contre les maladies ou le mal être qui touchait son corps et son esprit. Par l'intuition, l'observation, l'expérimentation sur eux-mêmes ou sur des animaux, les hommes sélectionnèrent les végétaux utiles, ceux qui nourrissent et ceux qui soignent. De nos jours, nous comprenons de plus en plus, que les principes actifs des plantes médicinales sont souvent liés aux produits des métabolites secondaires, qui sont largement utilisés en thérapeutique, comme anti-inflammatoires, antimicrobien, antiseptiques, mais essentiellement antioxydant qui défendent contre le stress oxydatif. Désormais, de nouvelles sources végétales d'antioxydants naturels sont recherchées. En effet, les polyphénols sont des composés naturels, qui ont une importance croissante notamment grâce à leurs effets bénéfiques sur la santé.

L'objectif de la présente étude était d'évaluer l'activité antioxydante d'extrait méthanolique de la partie rhizome de l'épice *Curcuma* par spectrophotométrie en utilisant les méthodes de piégeage des radicaux libres (DPPH•) et de réduction de fer FRAP. Une macération méthanolique de la partie rhizome de la plante a été effectuée. L'extrait sec recueilli a été redissout dans de l'eau puis fractionné en utilisant successivement du chloroforme, d'acétate d'éthyle et le n-butanol. La teneur en polyphénols totaux a été déterminée en utilisant la méthode de bleu de Prusse. La méthode de FRAP montre que l'extrait méthanolique a une bonne capacité de réduction du fer. D'autre part, la méthode du piégeage du radical libre DPPH• a indiqué que l'extrait méthanolique a montré une bonne efficacité antioxydante.

**Mot clé :** *Curcuma long*, rhizome, activité antioxydante, FRAP, DPPH.



## Réutilisation des nanomatériaux pour la fabrication des cellules solaires organiques

Y. BERREDJEM<sup>1,2,3</sup>, Z.HATTAB<sup>3</sup>, W.BESSASHIA<sup>1,2</sup>, A. BOULMOKH<sup>3</sup>,  
AEK. GHEID<sup>1,2</sup>,

<sup>1</sup> Université Mohammed Chérif Mesaadia de Souk-Ahras

<sup>2</sup> Laboratoire des sciences et technologies de l'eau et l'environnement, Université Souk Ahras

<sup>3</sup> Laboratoire de traitement des eaux et valorisation des déchets industriels (L.T.E.V.D).

Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar 23000 Annaba, Algérie.

E-mail : [y\\_berredjem@yahoo.fr](mailto:y_berredjem@yahoo.fr)

### Résumé

La disponibilité pour les citoyens du monde entier d'une quantité suffisante d'énergie propre et renouvelable est une nécessité pour l'avenir de nos sociétés. Une énergie propre pour faire face aux graves problèmes de pollution atmosphérique, qui détériore la santé des citoyens et de réchauffement de la planète (effet de serre...). Une énergie renouvelable car les réserves d'énergies fossiles sont limitées et leur utilisation doit progressivement diminuer sous peine d'un rapide épuisement. Ce travail porte sur la réutilisation de l'oxyde transparent conducteur (oxyde d'indium dopé par l'étain (ITO), pour l'élaboration des cellules solaires photovoltaïques basées sur l'empilement de deux matériaux organiques en sandwich, le premier est un donneur d'électron le deuxième est accepteur d'électrons.

En effet, de nombreuses techniques ont été utilisées, telles que la microscopie électronique à balayage (MEB), le microscope à effet de forces atomiques (AFM), la spectroscopie de photoélectrons, la transmission optique afin de caractériser les différentes couches minces qui constituent les cellules solaires.

**Mots clés :** Nanomatériaux organiques, ITO, cellules solaires organiques, caractérisation, couches minces, énergies renouvelables



## Optimisation de la production de biodiesel à partir des huiles alimentaire usagées

BEZAZI Chayma<sup>1</sup>, SELAIMIA Radia<sup>2</sup>, OUMEDDOUR Rabah<sup>2</sup>, NIGRI Soraya<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Département SM, faculté MISM, Université 8 Mai 1945 Guelma.

<sup>2</sup> Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux (LAIGM), Université 8 Mai 1945 Guelma.

E-mail : [selaimia.radia@univ-guelma.dz](mailto:selaimia.radia@univ-guelma.dz)

### Résumé :

Les problèmes environnementaux et les problèmes énergétiques sont étroitement liés, chaque production d'énergie ayant un impact sur l'environnement. Cependant les biocarburants visent à remplacer le carburant issu du pétrole. Ils sont une alternative durable aux énergies fossiles puisqu'ils sont renouvelables et moins toxiques pour l'environnement.

Ce travail est consacré à la synthèse du biodiesel par transestérification homogène à partir de deux marques d'huile de friture usagée et l'étude de l'influence des différents paramètres affectant la synthèse tels que; la température T (°C), le temps et le rapport (alcool/huile). Une caractérisation physico-chimique a été effectuée également pour les huiles et les biodiesels synthétisés, les résultats obtenus après la comparaison avec la norme Européenne a montré que nos biodiesels sont partiellement conformes avec cette dernière.

**Mots clés :** transestérification, huiles de friture usagée, biodiesel.



## Synthèse et étude structurale de nouveaux diazaphospholidine par cyclisation intermoléculaire

BOUCHAREB Fouzia<sup>a,b,\*</sup>, BERREDJEM Malika<sup>a</sup> et AOUF Nour-Eddine<sup>a</sup>.

<sup>a</sup>Laboratoire de Chimie Organique Appliquée (LCOA). Groupe de Synthèse de biomolécules et modélisation moléculaire. Département de chimie. Faculté des sciences. Université Badji Mokhtar. BP.12.23000 Annaba-Algérie.

<sup>b</sup>Département de chimie. Faculté des sciences et de la technologie. Université Chadli Bendjedid EL Taref. BP: 73, El Tarf 36000 Algérie.

\*Corresponding author: adres E-mail: [boucharebfouzia@yahoo.fr](mailto:boucharebfouzia@yahoo.fr)

### Résumé :

Les diazaphospholidines ont trouvé une application large en catalyse asymétrique comme ligands pour les métaux de transition [1] ou comme catalyseurs [2]. La synthèse de ces hétérocycles phosphorylés représente un nouveau domaine des composés d'intérêt biologique divers ; des inhibiteurs des enzymes bactériennes [3], des antibiotiques, des analogues récepteurs du VIH-1 [4], anticancéreux [5] et anti-inflammatoire [6]. L'interface chimie-biochimie, où l'on s'intéresse à la modélisation et à la synthèse stéréosélective d'hétérocycles phosphorés non toxiques de types phospholidines ou diazaphospholidines d'intérêt biologique capables de complexer le métal [7] plus efficacement que les substances naturelles présentant dans le compartiment sanguin telles que le citrates phosphates transferrine albumines et autres protéines. Le complexe ligand-métal formé *in vivo* doit ensuite être éliminé de l'organisme par la barrière rénale ou hépatique. Ce travail repose essentiellement sur la synthèse d'une nouvelle famille des diazaphospholidines modifiés à partir des composés linéaires « phosphoramidates »; ces derniers ont été préparés en deux étapes par la réaction d'amine primaire et d'aminoester avec le phényl dichlorophosphonique. Les phosphoramidates synthétisés présentent deux sites nucléophiles, nous les avons utilisés comme précurseurs dans la synthèse des diazaphospholidines par cyclisation intermoléculaire en utilisant le dibromoéthane. Les méthodes spectroscopiques : RMN: <sup>1</sup>H, <sup>31</sup>P et <sup>13</sup>C, ont été mises à profit pour établir les caractéristiques structurales propres à ces composés.

**Mots-clés:** phényl dichlorophosphonique, diazaphospholidine, phosphoramidates, cyclisation intermoléculaire.



## Optimisation des paramètres de dépôt des couches minces Ni-Mo obtenues par électrodéposition en utilisant la méthode de Taguchi

Houda Boudjehem, Hayet Moumeni and Abderrafik Nemamcha

[boudjehem.houda@univ-guelma.dz](mailto:boudjehem.houda@univ-guelma.dz)

### Résumé

Les matériaux métalliques à base de Ni attirent une attention particulière en raison de leurs propriétés mécaniques, physico-chimiques et électrocatalytiques très intéressantes. L'utilisation de la méthode de Taguchi pour la détermination de l'effet des conditions d'élaboration sur les propriétés des matériaux métalliques est une conception statistique qui a connu un développement considérable au cours des dernières années.

Dans cette étude, une matrice orthogonale de Taguchi L9 ( $3^3$ ) a été utilisée pour déterminer les conditions expérimentales optimales permettant l'obtention, par électrodéposition, des couches minces Ni-Mo avec une meilleure microdureté. Cette conception nécessite neuf expériences avec trois paramètres à trois niveaux. Les paramètres étudiés notés (A), (B) et (C) correspondent respectivement à la densité de courant appliquée, au rapport molaire (Mo/Ni) et à la concentration du PVP. Les résultats obtenus montrent que la performance optimale de la microdureté est obtenue à une densité de courant de  $35 \text{ mA/cm}^2$  (niveau 3), un rapport molaire de 5% (niveau 1) et une concentration de  $10^{-4}$  MPVP (niveau 3). Le dépôt obtenu dans ces conditions a été caractérisé par des techniques expérimentales complémentaires: la Microscopie Electronique à Balayage (MEB) associée à la microanalyse par énergie Dispersive des rayons X (EDX) et la diffraction des RX (DRX). Les résultats obtenus par MEB montrent que le revêtement Ni-Mo obtenu présente une bonne qualité de surface et une morphologie relativement homogène. Les analyses par EDX montrent la présence du Ni et du Mo dans le dépôt obtenu. Les résultats de la DRX révèlent le caractère amorphe du dépôt. L'effet des différents paramètres opératoires (A), (B) et (C) sur la fonction réponse (Microdureté) sera discuté.

**Mots clés :** Electrodéposition, couches minces Ni-Mo, Taguchi L9, DRX, EDX, MEB.



## Removal of a cationic dye from aqueous solution by local natural clay

Mouna BOULAHBAL<sup>ab\*</sup>, Moulay Abderrahman MALOUKI<sup>a</sup>, Zakaria REDOUANE SALAH<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Centre Universitaire Amine Elokhal El Hadj Moussa Eg Akhamouk-Tamanrasset, 11000, Algeria

<sup>b</sup> Research laboratory in energies and materials

\*Corresponding author: nonamm15@gmail.com

### Abstract

In the present work, we investigated the adsorption of crystal violet dye from aqueous solution by natural clay (NC) originated from tamanrasset region (south Algeria), as an adsorbent natural support. The clay was characterized by various techniques: XRD, XRF, FTIR,  $S_{BET}$ . CEC and pH<sub>pzc</sub> were used to study the physico-chemical properties of the clay. Different adsorption tests concerning the contact time (5-120 min), the initial dye concentration (5-20 mg.l<sup>-1</sup>) and the pH (2-12) were investigated by conducting a series of batch adsorption experiments. The adsorption study reveals that crystal violet has the affinity to get adsorbed on to the surface of NC. Langmuir and Freundlich isotherms described the isotherm data with high-correlation coefficients. The results of the present study substantiate that NC material is promising adsorbent for the removal of the cationic dye Crystal violet.

**Keywords:** Natural clay, crystal violet, characterization, Adsorption.

## Synthèse et réactivité d'une série de sulfonamides couples à l'acide lipoïque

Habiba BOUZIT <sup>a, b</sup>, Maamar STITI <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Chimie Appliquée. Université 8 Mai 1945, BP 401, 24000 Guelma, Algérie.

<sup>b</sup> Research Centre in Analytical Chemistry and Physics (CRAPC), BP 248, Algiers RP, Algiers 16004, Algeria

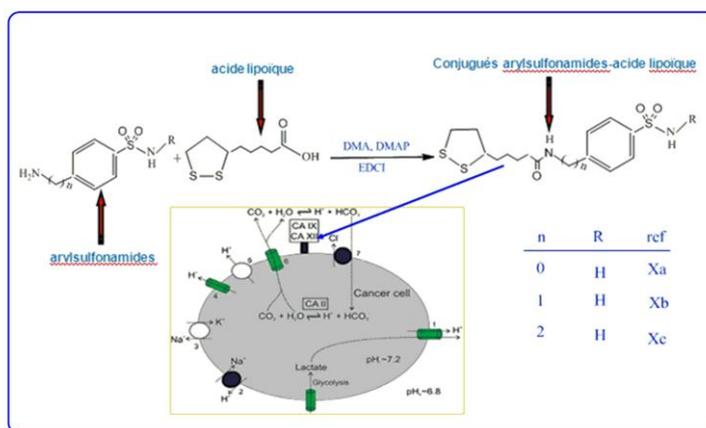
E-mail: [bouzit.habiba@gmail.com](mailto:bouzit.habiba@gmail.com)

### Résumé

Ces dernières années, divers composés, inhibiteurs potentiels de l'Anhydrase Carbonique IX appartenant à diverses familles chimiques telles que les sulfonamides, les coumarines, les phénols, les polyamines et les anticorps ont été conçus et synthétisés. Certains de ces inhibiteurs peuvent avoir des constantes d'inhibition ( $K_i$ ) de l'ordre du nanomolaire.

Le développement d'inhibiteurs plus sélectifs constitue un grand challenge pour l'obtention de nouveaux types d'inhibiteurs plus sélectifs.

De notre part, nous rapportons la synthèse et la caractérisation aux moyen des méthodes spectroscopiques usuelles ( $^1\text{H}$  RMN,  $^{13}\text{C}$  RMN, MS-ESI) d'une série de quatre conjugués: sulfonamides-acide lipoïque candidats potentiels pour l'inhibition sélective de l'Anhydrase Carbonique ACIX.



**Schéma.1:** Accès aux conjugués: sulfonamides -acide lipoïque inhibiteurs de l'ACIX

### Mots-clés

Sulfonamides, Acide Lipoïque, Anhydrase Carbonique IX, d'inhibiteurs sélectifs, méthodes spectroscopiques usuelles ( $^1\text{H}$  RMN,  $^{13}\text{C}$  RMN, MS-ESI)



## La détermination du taux de migration globale : Cas d'emballages destinés au conditionnement d'eau minérale Le polyéthylène téréphtalate (Emballage dans l'industrie alimentaire)

Wafa Cheddadi<sup>1</sup>, Abdelhak Gheid<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Sciences de Matière et Technologiques, Sciences de Matière, Laboratoire des Sciences et Techniques de l'Eau et Environnement / Université Mohammed chérif Messaadia, souk ahras, algerie , BP 1553 UNIV Souk Ahras tel : 0670403838*

<sup>2</sup> *Sciences de Matière et Technologiques, Sciences de Matière, Laboratoire des Sciences et Techniques de l'Eau et Environnement / Université Mohammed chérif Messaadia, souk ahras, algerie, BP 1553 UNIV Souk Ahras , [w.cheddadi@univ-soukahras.dz](mailto:w.cheddadi@univ-soukahras.dz)*

### Résumé:

Le polyéthylène téréphtalate est largement utilisé comme emballage dans l'industrie alimentaire, plus spécialement pour les conditionnements des eaux. Les eaux conditionnées se répartissent en deux catégories : les eaux minérales naturelles et de source. Ces deux types d'eau sont d'origine souterraine. Cependant, les eaux minérales se distinguent des eaux de source par leur teneur en certains constituants minéraux, la stabilité de leur composition et leur pureté originelle qui leur confèrent des effets bénéfiques pour la santé. Depuis le début des années 80, le PET a progressivement remplacé d'autres matériaux (le verre) utilisés pour le conditionnement des eaux dans la grande distribution. L'utilisation de ce polymère a été privilégiée compte tenu de ses propriétés physiques comme la transparence, l'étanchéité au gaz et sa faculté de recyclage. L'évaluation de l'inertie des matières plastiques au contact des denrées alimentaires, comme le PET, est régie par une réglementation complète et spécifique qui permet d'assurer la sécurité sanitaire du matériau. Il est paru nécessaire d'obtenir des informations plus comparables et fiables en reliant la composition des mélanges chimiques présents dans l'eau à l'issue de la migration de l'emballage PET et de potentiels effets toxicologiques, afin de conclure à une évaluation des risques sur la santé humaine. fait donc l'objet du présent travail, afin de préciser les facteurs d'influence de la migration, la composition des migrants et le potentiel toxique de ceux-ci. L'objectif est également d'anticiper sur les questions de sécurité sanitaire qui émergent régulièrement à l'occasion de la publication d'articles aux données inquiétantes.

**Mots-clés:** polymère, PET ,eau minérale , pollution, emballage.



---

## Activité antioxydante de l'huile d'olive

Chekatti Leyla , Oumeddour Rabah,

*Département des sciences de la matière, Faculté des Mathématiques et d'Informatique et des Sciences de la Matière ;  
Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux, Université 08 mai 1945 Guelma, Guelma 24000, Algeria. E-mail : Oumeddour.rabah@univ-guelma.dz;  
Chekatti.leyla@gmail.com*

### **Résumé:**

L'huile d'olive représente une source typique de lipides du régime méditerranéen. L'effet bénéfique de l'huile d'olive sur la santé humaine est attribué, entre autres, à sa contenance en composés phénoliques. Ces derniers ne cessent de prendre une importance croissante dans le cadre de santé.

Leur pouvoir antioxydant naturel suscite plus d'intérêt pour la prévention et le traitement du cancer, des maladies inflammatoires et cardiovasculaires. Plusieurs études ont démontré la capacité antioxydante des polyphénols de l'huile d'olive les composés phénoliques piègent les radicaux libres et par conséquent protègent le corps humain.

Le contenu phénolique des huiles d'olive varie en fonction du climat, du type de récolte, du degré de maturité des olives, des techniques de production et des méthodes de conservation.

L'objectif de notre étude est consacrée à la détermination de la teneur en composés phénoliques, ainsi qu'à l'évaluation de l'activité antioxydante de l'huile d'olive vierge, trois variétés (*Blanquette de Guelma, Chemlal et Takesrit*) ont été étudiées.

**Mots clés:** Huile d'olive, composés phénoliques, variété, maturation, activité antioxydante,



## Photodégradation d'un colorant textile

S. CHERIF<sup>1</sup>, H. REZZAZ-YAZID<sup>1</sup>, G. REKHILA<sup>2</sup>, Z. SADAOU<sup>1</sup>, M. TRARI<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Génie de la Réaction, Faculté de Génie Mécanique et Génie des Procédés, Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, BP 32 El Alia, Bab Ezzouar, 16111 Alger, Algérie.

<sup>2</sup> Laboratoire de Stockage et Valorisation des Energies Renouvelables, Faculté de Chimie, USTHB, 16111 Alger, Algérie.

Email : [Cherif14sonia@hotmail.com](mailto:Cherif14sonia@hotmail.com)

### Résumé :

Un colorant doit posséder, outre sa couleur propre, la propriété de teindre. Cette propriété résultant d'une affinité particulière entre le colorant et la fibre est à l'origine des principales difficultés rencontrées lors des traitements. En effet, selon le type d'application et d'utilisation, les colorants synthétiques doivent répondre à un certain nombre de critères: résistance à l'abrasion, stabilité photolytique des couleurs, résistance à l'oxydation chimique (notamment aux détergents) et aux attaques microbiennes, ces caractéristiques propres aux colorants organiques accroissent leur persistance dans l'environnement et les rendent peu disposés à la biodégradation.

Le traitement par photocatalyse est une alternative prometteuse pour l'élimination de ces composés organiques solubles. Il peut conduire à la minéralisation complète de ces composés en gaz carbonique, eau et acides minéraux dans des conditions douces de pression et de température. Contrairement aux procédés physiques (la coagulation floculation ou l'adsorption) qui consistent simplement en un transfert de polluants du milieu aqueux à un autre milieu, la photocatalyse hétérogène les élimine donc totalement. Dans un processus photocatalytique, la génération d'une espèce fortement oxydante telle que les radicaux hydroxyles via l'activation de semi-conducteurs en présence d'une source de lumière provoque une destruction des polluants et production ultérieure de composés inoffensifs. Ce travail a pour objectif de tester l'efficacité de photodégradation du colorant textile rouge Basique 46 présent dans une solution aqueuse C=10 mg/l en présence d'un semi-conducteur ZnO synthétisé au laboratoire. Les résultats obtenus montrent que la quantité de catalyseur ajoutée influe sur la cinétique de dégradation du rouge basique 46. Par ailleurs une élimination totale du colorant (100%) est obtenue, ce qui confirme l'efficacité du procédé photocatalytique pour l'élimination de ce colorant.

**Mots clés :** semi-conducteur, photocatalyse, polluant, dégradation



## Synthèse et caractérisation des N-(N-BOC, N-(2-Chloroéthyl)-Sulfamoyl)-Aminoester de Tertbutyle

Nedjoua CHEGHIB<sup>a</sup>, Jean-Louis KRAUS<sup>b</sup>, Wafa SOUDANI<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Chimie Physique; Université 08 Mai 1945- BP401 – Guelma, Algérie.

<sup>b</sup>Laboratoire de Chimie Biomoléculaire, CNRS, Marseille, France.

<sup>c</sup>Laboratoire de Chimie Thérapeutique, Département de Pharmacie, Faculté de Médecine Annaba.

e-mail: [nedjoua11\\_c@yahoo.fr](mailto:nedjoua11_c@yahoo.fr)

### Résumé:

Les sulfamides représentent une importante classe de composés pharmacologiques utilisés dans le domaine thérapeutique. Ils ont été les premiers médicaments antibactériens à large spectre et ont permis d'élaborer des méthodes rationnelles pour le traitement des maladies infectieuses. Les sulfamides se révélèrent efficaces dans le traitement d'autres infections streptococciques, comme l'érysipèle, les fièvres puerpérales. L'introduction du motif sulfamide (NH-SO<sub>2</sub>-NH) dans les dérivés de synthèse peut générer d'intéressantes propriétés chimiques et pharmacologiques.

Sur le plan pharmacologique, les sulfamides linéaires jouent un rôle essentiel dans la chimie médicinale, ils ont été décrits dans la littérature comme anti convulsant<sup>1</sup>, antiépileptique<sup>2</sup>, inhibiteur de l'anhydrase carbonique<sup>3-4</sup> et des agents antimétaboliques utilisés en chimiothérapie anti tumorale<sup>5-6</sup>.

Sur le plan chimique, les sulfamides linéaires jouent un rôle essentiel dans la synthèse de molécules spécifiques qui peuvent avoir des propriétés importantes. Dans ce travail, nous avons décrit la synthèse d'une nouvelle série de composés renfermant le motif sulfamide dérivés d'acides aminés (L proline et L alanine). La synthèse a été réalisée à partir d'acide amino et l'isocyanate de chlorosulfonyle dans une réaction de carbamoylation et sulfamoylation pour accéder aux carboxylsulfamides suivi par une chloroéthylation régiospécifique dans les conditions de la réaction de Mitsunobu utilisant le chloroéthanol pour conduire aux sulfamides trisubstitués.

Toutes les structures des molécules synthétisées au cours de ce travail ont été confirmées par les méthodes spectroscopiques (IR et RMN <sup>1</sup> H).

**Mot clés :** Isocyanate de chlorosulfonyle, L-acides aminés, carboxylsulfamides, antibactériens.



## Etude de l'influence des paramètres d'électrolyses sur la qualité des dépôts de chrome

*Tahar Derabla, Abed Mohamed Affoune, Mohamed Lyamine Chelaghmia et  
Ilhem Djaghout*

Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux (LAIGM), Département de Génie des Procédés, Université 8 Mai 1945 Guelma

[youcefderablatahar@yahoo.fr](mailto:youcefderablatahar@yahoo.fr)

### Résumé

L'utilisation des revêtements électrolytiques de chrome issus des bains renfermant le chrome hexavalent a été limitée par plusieurs pays en raison de ses effets néfastes sur l'environnement et sa cancérogénicité intenses envers la santé humaine. A ce propos, nous avons opté pour le remplacer par des bains contenant les ions de chrome trivalent qui présente un peu de soucis environnementaux dus à sa toxicité inférieure. Dans ce travail nous avons élaboré des dépôts de chrome à partir d'un bain de chrome trivalent contenant le chlorure de chrome ( $\text{CrCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) comme source d'ion de chrome. Nous avons étudié l'influence des paramètres d'électrolyse sur l'épaisseur et la microdureté des dépôts de chrome. Les résultats obtenus montrent que les dépôts de chrome élaborés dans des conditions optimales sont uniformément étalés sur toute la surface, d'un aspect peu brillant, d'une épaisseur de la couche de chrome allant jusqu'à  $25 \mu\text{m}$  et d'une microdureté de 1241 HV.

L'étude par voltampérométrie cyclique montre que la complexation par le mélange d'urée et d'acide formique inhibe la réaction de réduction des ions de chrome. Ceci peut expliquer la bonne qualité des dépôts de chrome obtenu à partir du bain du mélange des deux complexants. Les tests de corrosion montrent que les dépôts de chrome issus des bains de chrome trivalent résistent mieux à la corrosion que ceux issus des bains de chrome hexavalent dans la solution de NaCl à 3,5 %.

**Mots-clés :** *Electrodéposition de Chrome, voltampérométrie cyclique, microdureté, corrosion*



## Characterization and reactivity of Ni-Ag/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles prepared by chemical method

Meryem. Dardare<sup>1</sup>, Mouhssin. Boulbazine<sup>1</sup>, Abdel-Ghani. Boudjahem<sup>1</sup>

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

E-mail: meryemderdare30@gmail.com

### ABSTRACT

In this work, the Ni-Ag/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 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/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanocatalysts are found active in decomposition of N<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 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/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles and the metal dispersion on the surface of the catalysts.

**KEY WORDS:** Nanoparticles, nickel, silver, polyol, N<sub>2</sub>H<sub>4</sub> decomposition, catalytic activity.



## Electrodeposition and properties of nickel composite coatings Ni-SiO<sub>2</sub>

Ilhem DJAGHOUT<sup>a,b</sup>, Rabah KSOURI<sup>c</sup>, Abed Mohamed AFFOUNE<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux, Université 8 Mai 1945 Guelma, BP 401, Guelma 24000, Algérie.

<sup>b</sup>Département de génie des procédés, faculté des sciences et de la technologie, Université Mohamed Chérif Messaadia, Souk Ahras, Algérie.

<sup>c</sup>Laboratoire de Chimie Appliquée, Université 8 Mai 1945 Guelma, Guelma 24000, Algérie.  
[i.djaghout@univ-soukahras.dz](mailto:i.djaghout@univ-soukahras.dz)

### Abstract

Nickel-SiO<sub>2</sub> composite coatings were obtained from conventional Watts bath containing silica particles by direct current (DC) plating. The effects of codeposition parameters on the corrosion current density of nickel electrodeposits were investigated using a design of experiments (DOE) approach. The corrosion behavior of composite coatings was studied by polarization measurements in 3.5 % NaCl solution. Current density, temperature, concentration of polyninylperrolidone surfactant and concentration of silica were the four factors considered in the Box-Benkhen design. ANOVA regression equation gives a determination coefficient  $R^2 = 0.899$ , indicating the precision of the predicted model. The DOE results indicate that the current density of the plating solution exhibited the greatest importance on the corrosion current density. The concentration of silica showed the second strongest on the corrosion current density, followed by the concentration of polyninylperrolidone. While the temperature did not appear to affect the corrosion current density.

**Key words :** Electrodeposition, Composite coating, nickel, Box-Benkhen design, corrosion current density.



## Étude physicochimique des complexes de l'antithyroïdien de synthèse carbimazole avec une cyclodextrine modifiée

FISLI Hassina<sup>a</sup>, BENSOUILAH Nadjia<sup>b</sup>, BENDIF Besma<sup>a</sup>, TRAD Nadia<sup>a</sup>,  
MOUHAMEDI Massaouda<sup>a</sup>, BOUTEKRI Hadjer ; SEBBAK Sarah

<sup>a</sup> *Laboratoire de Chimie Appliquée, Université 8 Mai 1945 Guelma - Guelma*

<sup>b</sup> *Laboratoire de Chimie Organique Appliquée, Université Houari Boumediene - Alger*

**Résumé :** Le carbimazole est un antithyroïdien de synthèse utilisé pour le traitement des troubles liés à l'hyperthyroïdie. Présentant une hydrosolubilité faible et une bonne perméabilité à travers les membranes lipidiques, ce qui peut provoquer une biodisponibilité variée. Nous avons envisagé la préparation et la caractérisation des complexes d'inclusion entre le carbimazole et l'hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrine (HP $\beta$ -CD) en vue de l'amélioration de son hydrosolubilité et par suite son efficacité thérapeutique. Les interactions d'inclusion entre le carbimazole et l'HP $\beta$ -CD ont été étudiées par plusieurs techniques. La caractérisation des complexes a été établie et montre que l'inclusion dans l'HP $\beta$ -CD apparaît comme un mode de formulation prometteur pour ce type de médicaments.

**Mots clés :** Carbimazole - HP $\beta$ -CD - Complexe d'inclusion – Hydrosolubilité des médicaments.



## Effet de l'emballage en plastique sur la qualité de l'huile d'olive algérienne

NIGRI Soraya, DRICI Salah Eddine, DRICI Adel, OUMEDDOUR Rabah  
*Département des sciences de la matière*  
*Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux (LAIGM)*  
*Université 8 Mai 1945 Guelma, Algérie*  
Email : [nigri.soraya@univ-guelma.dz](mailto:nigri.soraya@univ-guelma.dz); [nigri\\_s@yahoo.fr](mailto:nigri_s@yahoo.fr)

### RÉSUMÉ:

Cette étude a été l'occasion d'étudier les effets de l'exposition à la lumière et le type d'emballage et les modifications qu'ils entraînent sur l'huile extra vierge au cours de l'exposition de celle-ci sur route dans des bouteilles en plastique. L'intérêt d'une telle étude est de diffuser une culture des bonnes pratiques de conservation de l'huile d'olive.

L'altération de l'huile utilisée a été suivie par la détermination de certains paramètres de qualité chimique (l'indice d'acide, l'indice de peroxyde, l'indice de saponification, l'indice d'iode) et de qualité physique (absorbance dans l'ultraviolet : des extinctions spécifiques à 232 et à 270 nm, et les teneurs en chlorophylles, caroténoïdes et polyphénols). Le suivi de la qualité de l'huile a été réalisé par Infrarouge à transformée de Fourier.

Les résultats obtenus ont montré que l'huile d'olive stockée dans une bouteille en plastique PET exposée à la lumière favorise et accélère : la formation des acides gras libres, la formation des produits de première d'oxydation (hydroperoxydes) de 15.5% à 20%, la formation des produits secondaires d'oxydation à 53%, la décomposition des chaînes des acides gras et la dégradation des composés anti-oxydants (des carotènes, chlorophylles et des polyphénols).

Conserver l'huile d'olive dans un emballage en verre à l'abri de la lumière et la chaleur ou réduire la disponibilité de l'oxygène s'avèrent être des moyens efficaces pour lutter contre son oxydation.

**MOTS CLES :** Stabilité oxydative, Huile d'olive extra vierge, paramètres de qualité, lumière, PET, anti-oxydants, carotènes, chlorophylles, polyphénols, acide gras.



## Traitement d'un polluant organique en milieu aqueux par un procédé d'oxydation catalytique

Grabsi Mohammed, Zabat Nacéra\*

*Laboratoire de Synthèse Organique ; Modélisation et Optimisation des Procédés Chimiques.  
Department of Process Engineering, Badji Mokhtar-Annaba University P.O. Box 12 ,23000  
Annaba, Algeria.*

*E-mail: zabatnassira@yahoo.fr*

### Résumé:

Les eaux de rejet des industries textile contenant les colorants posent un problème de pollution très grave (odeur, couleur... etc). Ces colorants, sont très toxiques à la santé de l'homme et à l'environnement. Ils réduisent la pénétration de la lumière du soleil dans les eaux du milieu récepteur, retardent la photosynthèse, détériorent lentement la santé des organismes vivants. Les procédés de traitement classique sont inefficaces face à certains colorants récalcitrants et solubles. Le recours aux procédés d'oxydation catalytique, est actuellement l'une des meilleures solutions pour traiter et éliminer les colorants contenus dans les eaux de rejet du textile.

A ce propos, nous nous sommes intéressées au traitement d'une eau polluée par l'indigo carmine, colorant très dangereux et très toxique. Ce traitement repose sur l'application d'un procédé d'oxydation catalytique, en présence du système ( $\text{KMnO}_4 / \text{P}_2\text{W}_{17}\text{O}_{61}\text{Co}$ ) basé sur l'utilisation d'un polyoxométallate de type Dawson ( $\alpha_2\text{P}_2\text{W}_{17}\text{Co}$ )<sup>8-</sup> qui constitue un catalyseur très efficace en phase homogène.

L'influence des paramètres contrôlant cette réaction d'oxydation tel que : pH initial de la solution à traiter; concentration de l'oxydant ; masse de catalyseur ; concentration du colorant; Effet de la température et effet des ions inorganiques ont été étudiés.

Les résultats obtenus ont permis d'obtenir un taux de décoloration pouvant atteindre 65% de l'indigo carmine.

**Keywords:** colorants indigoïdes,  $\text{KMnO}_4$ , polyoxométallates, procédés d'oxydation, pollution des eaux.



## Characterizations of matrix resin RTM6 and CFRP composite by DMA and impedance spectroscopy at different cure temperature

Rabah KSOURI<sup>1</sup>, Ilhem DJAGOUT<sup>2</sup>, Michelle SALVIA<sup>3</sup>, Rachid MERDES<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Chimie Appliquée, Université 8 Mai 1945 Guelma, Algérie

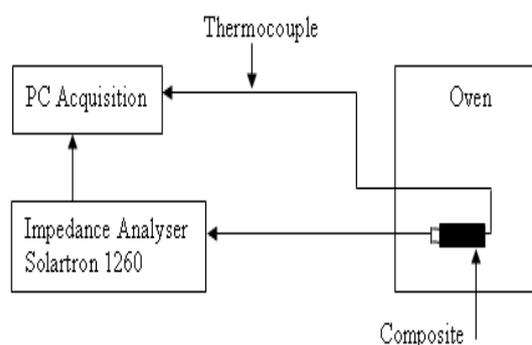
<sup>2</sup>Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux, BP 410, 24000 Guelma, Algérie

<sup>3</sup>Laboratoire de Tribologie et Dynamique des Systèmes, ECL, BP 163, 69131 Ecully Cedex, France

<sup>1</sup>ksourira@hotmail.com

### Abstract

Impedance spectroscopy in the frequency domain ( $10^{-1} - 10^6$  Hz) was employed to investigate progress of the curing reaction of system used matrix as epoxy resin RTM6 and fibre carbon as reinforcement. Impedance properties are measured as a function of frequency and cure time at different cure temperature. On the other hand, dynamic mechanical analysis (DMA) was employed to investigate progress of the curing reaction of these materials. Several interesting results were obtained and discussed for this composite. A six order polynomials relation exists between the imaginary impedance and the cure time and a linear relation between  $Z''$  and frequency.



**Key word:** Impedance spectroscopy, RTM6, Cure monitoring, CFRP

## Caractérisation et minéralisation de la barytine gisement d'Ain Mimoun Khenchela

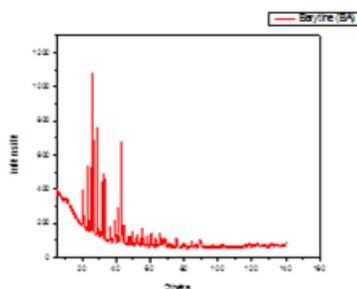
(A). LEKMINE DALALE, (B). BENALI-CHERIF N, (C). BOUTALEB A

(A) *Laboratoire de Structures, Propriétés et Interactions Inter Atomiques (LASPI2A)*, E-mail : [lekminedalal@hotmail.com](mailto:lekminedalal@hotmail.com)

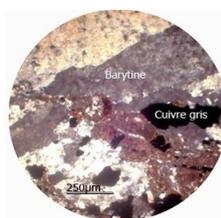
(B) *Ecole Nationale Polytechnique, département de Génie des Matériaux, Constantine*,  
E-mail : [benalicherif@hotmail.com](mailto:benalicherif@hotmail.com)

(C) *Laboratoire de géologie minière (USTHB)*. E-mail : [abdelhak\\_boutaleb@yahoo.fr](mailto:abdelhak_boutaleb@yahoo.fr)

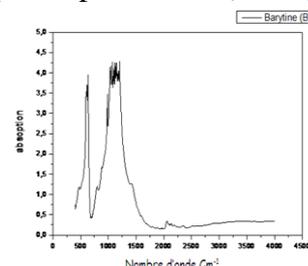
**Résumé :** L'objectif de ce travail est d'étudier la caractérisation physico-chimique de la barytine, dolomie, cuivre gris, chalcopryrite, galène, qui se trouve dans la région d'Ain Mimoun. Après un travail d'élaboration d'échantillon barytine sous forme de poudre, lames minces et des sections polis, nous avons mis en œuvre différentes techniques d'analyses pour mieux cerner leurs propriétés. La diffraction des rayons X sur poudre et la spectroscopie Infra rouge, La microscopie optique a décelé dans la barytine les minéraux qui les constituent et donne des informations sur la microstructure de la barytine, à cet effet, on prépare des lames minces dont l'épaisseur ne dépasse pas 0.03 mm sous cette très faible épaisseur, la plupart des minéraux sont transparents et on peut identifier chacun d'entre eux grâce à ses propriétés optiques. La barytine (sulfate de baryum) est un minéral d'origine hydrothermale assez commun, qu'on trouve dans des filons minéralisés, en association avec des minéraux d'argent, de plomb, de cuivre, de cobalt, de manganèse et d'antimoine qui cristallise dans le groupe d'espace N°62 (Pnma)



**Figure 1 :** Diffratogramme de l'échantillon BA (Barytine-Ain Mimoun)



**Figure 2 :** microphotographie de lame mince montrant l'association de barytine et cuivre gris - lumière naturelle analysée



**Figure 3:** spectre infrarouge de l'échantillon BA (barytine-Ain Mimoun).

du système orthorhombique avec les paramètres de maille suivants:  $a = 8.8500 \text{ \AA}$   $b = 5.4400 \text{ \AA}$   $c = 7.1300 \text{ \AA}$  avec  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

La minéralisation d'Ain Mimoun a une paragenèse polymétallique à Cu-Pb-Zn-Ba. Elle est caractérisé par une association minérale composée principalement de barytine, galène, accompagnées localement par du cuivre gris, de la chalcopryrite, de la pyrite et divers produit d'oxydation.

**Mots clés :** Barytine – Minéralisation – lames minces – DRX.



## Simultaneous sorption of malachite green and rhodamine B on a new granules based on surfactant-modified pillared-clay and gluten

Amel Louadj<sup>a</sup>, Omar Bouras<sup>a</sup>, Benamer Cheknane<sup>a</sup>, Faiza Zermane<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire Eau Environnement et Développement Durable, Faculté de Technologie,  
Université Saad Dahlab-Blida 1, BP 270, 09000 Blida (Algérie)

Email: [louadjamel1@gmail.com](mailto:louadjamel1@gmail.com)

### Abstract

New generations of adsorbent granules for the adsorption removal of water-soluble hazardous pollutants are prepared by mixing a montmorillonite with pillars of iron polycations and co-modified with cetyl trimethyl (Fe-SMPM) with gluten as binder by granulation by compaction. The sorption of malachite green (MG) and Rhodamine B (RB) on these sorbents was studied in both single and binary component systems from aqueous solutions using batch tests. Results showed the efficiency of these composite sorbents with respect to the two cationic dyes. In single-component systems, the MG and RB sorption isotherms as a function of pH were analyzed with the Freundlich equation, whose statistical interpretation was also developed. Sorption capacities sharply increased when the solution pH value was raised from 3 to 6. In binary-component systems, the fit between measured and predicted simultaneous sorption capacities of both MG and RB indicated that the Sheindorf–Rebhun–Sheintuch model, an extended Freundlich model, is fully applicable. The RB unfavorably influences the sorption of MG. The antagonist effect between these two dyes has been confirmed by the values of competition coefficients.

**Keywords:** Granulation, Pillared clay, Rhodamine B, Malachite Green, Adsorption, Competition.



## UPLC-DAD analysis, antioxidant capacity and the correlation with phenolic compounds, content in the root methanolic extract of *asphodelus microcarpus*

Nozha Mayouf, and Lekhmici Arrar

Laboratory of Applied Biochemistry, Faculty of Nature and Life Sciences, University Ferhat Abbas Setif 1, Algeria.

Email : [www.nozhabiolegie@hotmail.com](mailto:www.nozhabiolegie@hotmail.com)

### Abstract

Antioxidants such as flavonoids, tannins, coumarins, and curcumanoids, phenolic are found in various plant parts (e.g. fruits, leaves, seeds and oils) and have been reported to have multiple biological effects including antioxidant activity. For this reason, there is growing interest in separating these plant antioxidants and using them as natural antioxidant. An ultra - performance liquid chromatographic method equipped with diode-array detection was used to identify the major phenolic compounds (Gallic, vanillic, ruti, and quercetin) in *Asphodelus microcarpus* root methanolic extract (RME). The objective of this study was to assess the activity of the root methanolic extract (RME) of *A. microcarpus* on antioxidant activity and to identify and quantify its phenolic compounds by UPLC. Chromatographic separation was performed on a Hypersil column (1.9 $\mu$ m\* 3nm\* 50mm). The flow rate was kept constant throughout the analysis at 0.6 ml/min and the injection volume was 20  $\mu$ l. The operating condition were a follows: mobile phase water (A) and acetonitrile (B): gradient 5% B from 0 to 1 min, 5%-21% B from 1 to 5 min, 21%-50% B from 5 to 7 min, 50%-100% B from 7 to 10min, 5% B from 10 to 13 min. The column was maintained at 30° and UV detection was recorded in the range 165 nm- 365 nm. The peak identification in samples was also based on comparisons of the retention times (tR) of the isolated phytochemical standards. *A.microcarpus* (RME) contains a high amount of phenolic compounds and flavonoids: 377  $\pm$  0.030 mg gallic acid equivalents and 15.37  $\pm$  0.006mg rutin equivalent/g of dried weigh, respectively . The RME showed a high antioxidant activity using DPPH with an IC<sub>50</sub> value of 1.39  $\pm$  0.023 mg/mL. In this assay the hydroxyl radical-scavenging effect of the RME showed significant inhibition of hydroxyl r with adica ls an IC<sub>50</sub> value of 0.944  $\pm$  0.146 mg/mL. Results showed a high correlation between the DPPH scavenging activity of extracts and their polyphenols and flavonoids contents ( $R^2=0.96$  and  $0.93p < 0.001$ respectively). The result indicated that the total flavonoids contents are important contributors to the hydroxyl radical-scavenging effect of the methanol extract (Pearson's correlation coefficient, ( $R^2=0.92$  and  $0.86 p < 0.001$ respectively). The result showed that *RME* extract contain various phenolic acid and flavonoids such Naringénine, Kaempférol 3-*O*-rhamnocide, lutéoline 7-*O*-glucoside, lutéoline, férulique acid, Flavan-3-ol.

**Keywords:** UPLC- DAD, DPPH, polyphenols, flavonoids.



## Etude des propriétés électroniques, structurales et de la relation structure-activité des dérivés de thiazolidine-2,4-dione par la modélisation moléculaire

S.Medjahed,<sup>a,b</sup> F.Soualmia,<sup>a</sup> Z.Sebaa,<sup>a</sup> S.Belaidi,<sup>b</sup> N.Tchouar,<sup>a</sup> K. Bentayeb,<sup>a</sup> T.Salah<sup>b</sup>.

<sup>a</sup>Laboratoire de Modélisation et Optimisation des Systèmes Industriels, Université des Sciences et Technologies d'Oran-Mohamed Boudiaf (USTO-MB) 31036, Algérie.

<sup>b</sup>Équipe de chimie informatique et pharmaceutique, laboratoire de chimie moléculaire et environnement, université de Biskra, 07000, Algérie

e-mail : [medjahed\\_sihem@hotmail.com](mailto:medjahed_sihem@hotmail.com)

Thiazolidine-2,4-dione est un composé hétérocyclique appartient aux dérivés de la thiazolidinedione[1]. Ce composé forme une classe de médicament : anti-hyperglycémique, aldose réductase inhibitrice, anti-cancer, anti-inflammatoire, anti-arthritique, anti-microbien, un potentiel pharmacologique et médicinal[2, 3]. Le principal objectif de ce travail est l'application de différentes méthodes de la modélisation moléculaire pour déterminer les caractéristiques structurales, électroniques, effet de substitutions sur Thiazolidine-2,4-dione et de prédire l'activité biologique d'une série des molécules bioactives. L'étude QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships) est une corrélation basée sur un calcul statistique, de paramètres physico-chimiques avec l'activité biologique [4]. La comparaison structurale (longueurs et angles de valence) de noyau de base Thiazolidine-2,4-dione présente des résultats similaires entre les résultats expérimentaux et les méthodes de calculs utilisées. L'influence de la substitution sur le noyau de base (thiazolidine-2,4-dione) montre que le composé (B3) 3,5-dichloro-thiazolidine-2,4-dione est le plus actif chimiquement ; il présente le plus faible gap HOMO-LUMO (0,2104)

**Mots clés :** Thiazolidine-2,4-dione, activité biologique, hétérocyclique, QSAR, log P.



## A new analytic method completed for the diacetyl assay in milk and dairy products

Meribai<sup>1,2</sup> A, A. <sup>1</sup>Bahloul and A. <sup>2</sup>Bensoltane

1. Laboratoire : Caractérisation et Valorisation des Ressources Naturelles (L.C.V.R.N)  
Sis au : Département des sciences Agronomiques- Faculté SNV-STU- Université de Bordj Bou Arreridj (34000) Algérie.
  2. Laboratoire de Microbiologie Alimentaire et industrielle Université Oran 1 Es'Senia  
Oran 31000- Algerie
1. Auteur communicant Email Adresse [hic.mer71@gmail.com](mailto:hic.mer71@gmail.com). Com- Département des sciences agronomiques - Faculté SNV- STU Univ. de Bordj Bou Arreridj (34000)- Algerie

### Abstract

Background: Diacetyl and Acetaldehyde aroma compounds present in yoghurts, divers fermented beverages, produced by lactic Acid bacteria from lactose, pyruvate and citrate. However, biosynthetic pathways and their regulation in thermophilic lactic strains are not well elucidated. Study aimed to select thermophilic lactic wild strains, to explore their stability at cold storage (for 21days). Isolation, characterization of strains, from raw camel milk, on selective media M17 (*Streptococcus thermophilus* at 42°C) and MRS medium for Lactobacilli at 44°C. Cryopreservation impact on the starter stability during 21 days, directed by check, upstream and downstream, conservation, of five physico-chemical tests (pH, viscosity, conductivity, density and lactate production). Acidifying profiles, by monitoring the kinetics of acidification of reconstituted skim milk, and flavoring by double test: Voges Proskauer method then by polarography. The *In vitro* antagonism of lactic strains active crude supernatant (SBA), directed against targets strains: prokaryotes and eucaryotes. Results gave thermophilic strains, *Streptococcus thermophilus* on M17, and homofermentary *Lactobacillus sp.*, on MRS. Acidification (in°D) allowed the selection of six strains *Lactobacillus sp* (DL4; 51.09, DL1; 49.5, DL2, 47.70, DL3, 47.52, DS3; 42.62, and DL5; 32.23) °D and six isolates *Streptococcus thermophilus* (TL5, 103.18, TL1, 88.09, TS2; 67.15, TL3; 47.52, TS3; 45.7645.76, and TL4; 36.96) °D. The flavoring, by Voges Proskauer test revealed two very intense flavoring strains, four strains intensely positive, one strain moderately positive and nine moderately intense strains. These results were confirmed on polarography against established standard of pure diacetyl. The results of antagonism gave inhibitory zones, varying between (21 and 10) mm, against targets Gram positive strains, between (25 and 09mm) against Gram negative and between (15 and 09mm) against eucaryotes.

Conclusion: The study led to development of a wild thermophilic lactic strain's collection (thermophilic levain) for dairy technology used, having acidifying, flavoring profiles and bactériocinogène effect.

**Key words:** Wild Strains, Selection, Acidification, Diacetyl, Bacteriocin.

## Etude théorique et expérimentale de la complexation de l'acide lipoïque avec le Cu(II)

Maamar STITI<sup>a</sup>, Habiba BOUZIT<sup>a, b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Chimie Appliquée. Université 8 Mai 1945, BP 401, 24000 Guelma, Algérie.

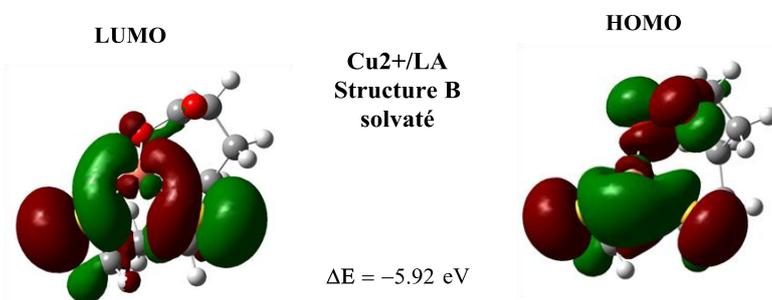
<sup>b</sup> Research Centre in Analytical Chemistry and Physics (CRAPC), BP 248, Algiers RP, Algiers 16004, Algeria

E-mail: [stiti.maamar@gmail.com](mailto:stiti.maamar@gmail.com)

### Résumé

Dans le but d'améliorer la stabilité et la biodisponibilité de l'acide lipoïque (LA), et afin d'avoir un effet de synergie et d'amplifier une éventuelle activité thérapeutique anti-oxydante de cette biomolécule, nous l'avons complexé avec les ions Cu (II) qui sont eux même des anti-oxydants très reconnus.

En utilisant les méthodes spectroscopiques IR et UV-visible, nous avons pu mettre en évidence la formation de ce complexe (Cu<sup>2+</sup>/LA) à l'état solide et en solution. Ensuite, une étude en solution alcaline (NaOH) suivie par spectroscopie UV-Visible, nous a permis de déterminer sa stœchiométrie et sa constante de stabilité ( $K_s = 1,030 \times 10^3 (\text{mol/L})^{-1}$ ). Par ailleurs, nous avons mené une investigation théorique au moyen de la modélisation moléculaire sur le complexe de stœchiométrie 1:1 dans le vide et en solution. En effet, l'utilisation des méthodes théoriques telle que la méthode HF(LanL2DZ) et la méthode DFT(LanL2DZ), nous ont permis d'analyser deux structures hypothétiques A et B du complexe organométallique (Cu<sup>2+</sup>/LA). Les investigations théoriques par les orbitales frontières HOMO, LUMO et les résultats de l'analyse par spectroscopie IR, s'accordent bien et montrent que le complexe B dans lequel il y a une coordination entre l'ion métallique Cu(II) et les deux atomes de soufre d'une part et le groupement carboxylate d'autre part s'est montré plus stable et par conséquent plus favorisée par rapport au complexe A.



**Figure.I.** Représentation des orbitales frontières HOMO et LUMO du complexe (Cu<sup>2+</sup>/LA) en solution



## Structural behavior of electrodeposited Ni-Fe thin films using fractional factorial design method

*Adila TALBI<sup>\*1</sup>, Abderrafik NEMAMCHA<sup>1</sup>, Hayet MOUMENI<sup>1,2</sup> and Jean Luc REHSPRINGER<sup>3</sup>*

*<sup>1</sup>[talbi.adila@univ-guelma.dz](mailto:talbi.adila@univ-guelma.dz), <sup>1</sup>[nemamcha.abderrafik@univ-guelma.dz](mailto:nemamcha.abderrafik@univ-guelma.dz), <sup>1</sup>[moumeni.hayet@univ-guelma.dz](mailto:moumeni.hayet@univ-guelma.dz), <sup>1,2</sup>*

*[jean-luc.rehspringer@ipcms.unistra.fr](mailto:jean-luc.rehspringer@ipcms.unistra.fr)<sup>3</sup>*

### ABSTRACT

In this work, experimental design strategy through the fractional factorial design (FFD) and response surface methodology has been used for the statistical analysis of the electrodeposited Ni-Fe alloys. A series of 16 experiments obtained from  $2^{5-1}$  (FFD) was successfully prepared via electrodeposition method. The main and interaction effects of several electroplating variables, including Fe/Ni molar ratio (Fe/Ni), current density (I), pH of the plating solution, deposition time (t) and stirring rate (stirr) on the chemical composition and the structural properties were evaluated on the basis of Atomic absorption spectroscopy (AAS) and X-Ray diffraction (XRD) techniques. The combined results of chemical composition and the corresponding structural behavior was discussed. The obtained results revealed the presence of three distinct structural regions, fcc, mixed fcc and bcc, and bcc phases as Fe content was increased. The obtained statistical results show that all factors exhibit an important effect on the studied properties. The optimization analysis showed that the deposits prepared under the following conditions: Fe/Ni=0.2, I=30 mA/cm<sup>2</sup>, pH=3.5, t=39 min, stirr =500 rpm can be considered to have the best suitable properties.

**KEYWORDS:** Electrodeposition, Ni-Fe thin films, Structure, Experimental design.



## Etude des propriétés physico-chimique interfaciales d'une pseudo-membrane moléculaire à base de tensioactif zwitterionique sulfobetaine (SB3-12) en présence d'une molécule thérapeutique

E.Yssaad ; T.Fergoug ; Y.Bouhadda ; R.Aribi ; A.Kadiri

*Laboratoire de Chimie physique des Macromolécules et interfaces biologiques, Université de Mascara,  
Mascara 29000, Algérie*

### Résumé :

L'effet analgésique de l'anesthésique local AL tetracaine hydrochloride (TTAC·HCl), une drogue (anesthésiante) résulte du blocage de l'influx nerveux le long de la fibre nerveuse. Le mécanisme d'accès au site réactionnel (les récepteurs) est possible par diffusion à travers la bicouche phospholipidique en entraînant des modifications conformationnelles de la matrice lipoprotéique. Afin de modéliser cette incorporation un modèle simple se basant sur la structure chimique de la membrane est adopté. Etant donné que la membrane biologique est constituée de phospholipides zwitterioniques et afin de ressembler au mieux au cas réel la pseudo-membrane choisie dans notre modèle est composé d'un surfactant zwitterionique (le SB3-12). Dans ce travail l'adsorption de la tetracaine hydrochloride encapsulée par la  $\beta$ -cyclodextrine ( $\beta$ -CD) a été étudiée par différentes méthodes comme la tensiometrie et la viscosimetrie.

**Mots clés :**  $\beta$ -cyclodextrine, Tetracaine hydrochloride, surfactant zwitterionique, complexe, Tensiometrie, Viscosimetrie ,



## Nonlinear regression method for adsorption isotherm of organic dyes by activated carbon of vegetable origin: Comparison of error analysis criteria

Hadjer zeghache<sup>(1)</sup>, Said hafsi<sup>(2)</sup>

<sup>(1,2)</sup> *Laboratory of Applied Chemistry and Material Technology (LCATM), Material Structure Departement. Larbi Ben M'Hidi University. Oum El Bouaghi. 04000. Algeria.*  
E-Mail :zeghache\_hadjer@hotmail.fr

### Abstract:

The industrial wastewater usually contains a variety of organic compounds and toxic substances, which are harmful to human health and other aquatic life. It is well known that textile industries and dyestuff manufacturing discharge highly colored wastewaters, which have provoked serious environmental concerns all over the world because color impedes light penetration, retards photosynthetic activity, inhibits the growth of biota etc. The main purpose of this study is to exploring the performance of activated carbon of vegetable origin for adsorptive removal of three dyes (acid bleu 74, basic green 1, acid red 51) from aqueous solution. The adsorption process was studied in a batch system by investigating the effects of different factors such as initial dye concentration, adsorbent dose and temperature. Adsorption equilibrium data were employed with nonlinear regression isotherm equations of langmuir, freundlich, and liu models. In order to determine the best fit isotherm model, three nonlinear error function such as correlation coefficient ( $R^2$ ), standard deviation (SD) and Chi-squared ( $\chi_{red}^2$ ) were used to evaluate the data. Furthermore, the fit of the kinetic data to common kinetic models such as the pseudo first-order, pseudo second-order and intraparticle diffusion models was tested to elucidate the adsorption mechanism.

**Keywords:** Adsorption, dyes, activated carbon, isotherm, nonlinear regression, kinetic.



## Analyse par fluorescence X de l'eau potable de la ville de Constantine après préconcentration

Somia ZEROUAL, Brahim KEBABI et Hassina BOUGHERARA

*Laboratoire Pollution et Traitement des Eaux, Département de Chimie, Faculté des Sciences Exactes, Université Frères Mentouri Constantine 1, Constantine, Algérie.*

### Résumé

La préconcentration est utilisée lorsque la concentration de l'élément à analyser est inférieure à la limite nécessaire pour que la méthode d'analyse instrumentale utilisée soit suffisamment sensible ou sélective. La préconcentration peut se faire par électrodéposition, extraction liquide-liquide, adsorption, précipitation, échange ionique... Il faut trouver la bonne combinaison entre les procédures de préconcentration et l'instrumentation que nous utilisons pour l'analyse. L'évaporation à température fixe sans ébullition du solvant est une technique simple de préconcentration. L'arrêt de l'évaporation peut se faire lorsque le seuil de détection des éléments à analyser est atteint ou par évaporation complète du solvant. Dans ce cas, il faut disposer d'une technique permettant de réaliser l'analyse du solide résiduel. La fluorescence X est bien adaptée à cela. Elle permet l'analyse de tous les éléments du tableau périodique sauf l'hydrogène, l'hélium et le lithium. L'analyse du béryllium, du bore, du carbone, de l'azote et de l'oxygène est délicate. La préconcentration des éléments présents dans l'eau du robinet de la ville de Constantine a été réalisée par évaporation totale à 50°C. Le résidu sec a été récupéré et conditionné sous forme de pastille pour être analysé par un spectromètre de fluorescence X de marque Panalytical Epsilon 3.

Nous avons réalisé des spectres de fluorescence X sous différentes conditions. La combinaison des résultats des différents spectres de fluorescence X nous a permis d'identifier, grâce à la position des pics sur les spectres les éléments suivants : Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ca, Ti, Mn, Fe, Cu, Zn, As, Se, Br, Sr, Zr, Pd, Cd, Ba, Lu, Tl et Pb. La hauteur d'un pic sur un spectre de fluorescence est proportionnelle à la concentration de l'élément dans l'échantillon étudié. Cette propriété nous a permis de quantifier le pourcentage des éléments précédents dans le résidu sec. Le résidu sec contient une très forte concentration en calcium.



## MODELISATION MOLECULAIRE

IPP: Inclusion Phenomena Program.	A. Guendouzi	48
Negative activation energies and the addition reactant complex	B. Messaoudi	49
Etude théorique du mécanisme réactionnelle de la réoxydation d'un catalyseur hexamolybdate réduit par l'oxygène moléculaire	M. Almi	50
Etude théorique de la complexation de la lidocaïne par $\beta$ -cyclodextrine	A. Mansour	51
Theoretical and experimental studies of polyphenols and flavonoids of propolis: antioxydant activity	N. EH. Bensiradj	52
Etude théorique des propriétés structurales et électroniques d'une molécule bioactive (base de schiff)	S. Hadjar	53
Etude de l'efficacité inhibitrice de molécules organométalliques sur la corrosion du cuivre par technique de monte carlo	F. Mouissa	54
Etude théorique et structurale par RX d'un nouveau composé hybride riche en liaisons hydrogène	F. Allouche	55
Ligand-based pharmacophore searching and molecular docking for the discovery of novel cytotoxic agents targeting human glutathione-S-transferases	I. Almi	56
Prédiction de l'activité antitopoisomérase d'une famille des benzo[C] phenanthridines (BZPS) in silico	K. Amirat	57
Simulation of docking trans polydatin with beta cyclodextrin and derivatives : A molecular modeling approach	S. Amirat	58
Structural and vibrational properties of 4-amino-n-pyrimidin-2-yl-benzene sulfonamide: A computational study	S. Amrani	59
Qualitative and quantitative structure-tubulin inhibitors activities relationship of 1.3.4-thiadiazole derivatives	N. Aoumeur	60
DFT investigation of charge transfer complex formation between p-phenylenediamine and 3,5-dinitrosalicylic acid	S/A. Athmani	61



---

Etude Ab initio de la structure de bande électronique du nanotube de carbone spiralé monoparoi de type zigzag (n,0)	L.Bechohra Lina	62
The physicochemical properties of Asgen (n=1-10) nanoclusters: A DFT study	M. Benaida	63
Etude par docking moléculaire de l'inhibition des CYP3A4 par le jus de pamplemousse	B. Bencheikh	64
Etude théorique de l'inclusion du pyrazol dans la bêta-cyclodextrine	H.Bouchemella	65
Etude par DFT et TD-DFT de la structure et des propriétés optiques des nouveaux composés à base de schiff	K.Bouchemella	66
Molecular modeling study of simazine by $\beta$ -cyclodextrin	A.Bouhadiba	67
Stability and electronic properties of copper doped nickel nanoclusters : A DFT investigation	M.Boulbazine	68
DFT study of nanotubes as the drug delivery vehicles of montelukast	W.Bououden	69
Vibrational spectra, optical properties, NBO and HOMO–LUMO analysis of para-phenylenediammonium: DFT calculations	F.Boursas	70
A DFT study of inclusion complexes between lidocaine and $\beta$ -cyclodextrin in vacuum and in water	I.Djellala	71
Etude théorique de l'oxydation atmosphérique de la butadiène	R.Djemil	72
Encapsulation of flavonoid fisetin with - $\beta$ -cyclodextrin: spectral and molecular modeling studies	F. Djebiha	73
Computational study of the complexation of vitamine-A in the beta-cyclodextrin	F.Yahia Cherif	74
Détermination des interactions intermoléculaires dans le complexe d'inclusion : vanilline/Bêta-cyclodextrine	M.Gharibi	75
Etude des relations quantitatives structure–activité des composés chimiques à l'aide des descripteurs moléculaires (modélisation QSAR)	N.EH.Hammoudi	76
The accurate acid dissociation constant of some drugs: a quantitative structure–property relationships (QSPR) study	A.Hendi	77



Molecular docking study of ARN2508 as COXS and TAAH inhibitors	N. Lachi	78
Characterization theoretical study of the isomeric configuration of (z/e)-endoxifen by FT-IR, NMR and UV	L.Largate	79
QSAR and MBO study of coumarin derivatives	F.Lehraki	80
La méthylation de l'ADN : Approche théorique	I. Lafifi	81
Host- guest complex of an antipsychotic drug with 2-o-methyl-beta-cyclodextrin: DFT-D study, NBO and QTAIM analysis	K.Mansouri	82
Etude quantique de la géométrie et la spectroscopie du 3,5-dibromo-4-methylpyridine	M.Medjani	83
Etude théorique de complexe de transfert de charge N, N'-bis- L-phénylalaninate de méthyle sulfone-DDQ	M. Mohamdi	84
DFT investigation of magnetic and structural properties of transition metal mono carbides, nitrides	R. Moussouni	85
Etude de la stabilité du complexe de la Curcumine-Béta-Cyclodextrine	Y. Mezari	86
Curcumin and its Biological Application	Y. Mezari	87
Computational investigations on geometric structures of rhenium(i) complex of new bis-coumarins-1, 2, 3-triazole based ligands	Z. Ourdjini	88
Etude par les méthodes quantiques la stabilité des complexes d'inclusions taxifoline avec les cyclodextrines naturels	M. Rahim	89
Etude du mécanisme réactionnel de l'oxydation de l'acide linoléique par les méthodes de docking moléculaire	H.Rahmouni	90
Chiral separation and molecular modeling of some antibiotics pharmaceutical formulation on different polysaccharides chiral stationary phases	M.N. Rebizi	91
Etude spectrales par modélisation moléculaire d'un nouveau ligand organique de type base de schiff	A.Reghioua	92
Molecular modeling study the charge transfer interactions of an analgesic with $\pi$ acceptors	S.Soltani	93
Contribution théorique des bastadines : molécules d'intérêt biologique	N.Taib	94



1<sup>er</sup> Séminaire sur la Chimie Appliquée &  
la Modélisation Moléculaire  
Guelma, 26 septembre 2019



---

Relation structures propriétés quantitatives pour les composés organiques	S.Touam	95
Study of the effect of sulfur on the conformational and electronic properties of 1,4-diformylpiperazine	F.Yahia Chérif	96
Etude quantique du complexe de transfert de charge entre 2-(2-methyl-5-nitroimidazol-1-yl) éthanol et DDQ: analyses NBO et QTAIM	K.Yahiaoui	99
Etude computationnelle spectroscopique d'un triazacyclohexane	A.Zaboub	98



## IPP : Inclusion Phenomena Program

Guendouzi Oukacha<sup>a</sup>, Guendouzi Abdelkrim<sup>b</sup>, El-Keurti Mohammed<sup>a</sup>.

<sup>a</sup>Département de Physique, Faculté des Sciences, Université M. TAHAR B.P.138,  
Saïda 20000, Algeria.

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

### Résumé :

Dans ce travail, on propose un code fortran développer pour générer les configurations possibles X@CDs des complexes Host-Guest dans l'objectif d'étudier la stabilité des complexes mises en œuvre entre la Bêta-Cyclodextrine (choisi comme exemple) et des composés organiques utilisées dans le domaine pharmaceutique.

## Negative activation energies and the addition reactant complex

Boulanouar MESSAOUDI\*

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

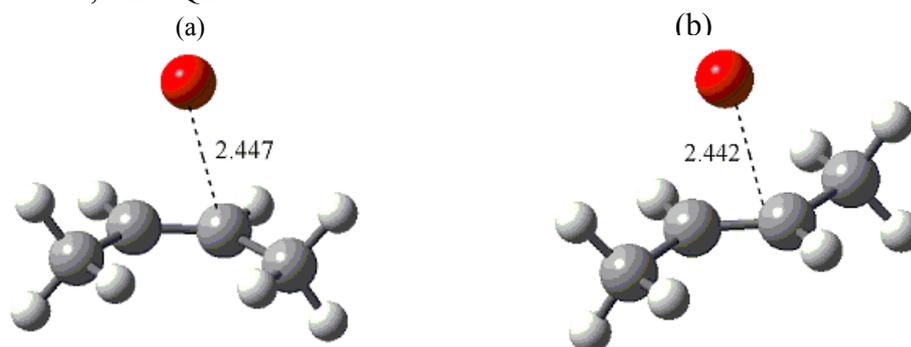
messaoudiboulanouar@gmail.com

### Abstract

The reactions of  $O(^3P)$  with alkenes are of great importance in a variety of areas such as atmospheric chemistry [1] due to their crucial role in understanding combustion processes and oxidation mechanisms [2].

Most reactions possess experimental Arrhenius plots that exhibit negative slopes, which indicates that their Arrhenius activation energies are positive quantities and that, as a consequence, their rate constants increase with temperature. This is not the case for a significant number of reactions for which negative activation energies have been reported experimentally [3]. For instance, the addition of  $O(^3P)$  to substituted alkenes such as, cis- and trans-2-butene, is also an example of reactions presenting an anti-Arrhenius kinetic behaviour. A variety of ways have been given to explain this fact among which the reactant complex [4].

**Keywords:** Atmospheric reactions,  $O(^3P)$ , O-addition, cis-2-butene, trans-2-butene, CBS-QB3.



**Figure.** The addition reactant complex for the  $O(^3P)$  reaction with a) cis- and b) trans-2-butene at CBS-QB3 level of theory.



## Etude théorique du mécanisme réactionnelle de la réoxydation d'un catalyseur hexamolybdate réduit par l'oxygène moléculaire

Meriem ALMI<sup>a</sup> Saal Amar,<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> *laboratoire Chimie Théorique Computationnelle et Photonique, Bab Ezzouar 16111, Alger*

<sup>b</sup> *Département de Chimie, UMMTO, 15000, Tizi-Ouzou.*

*e-mail : [almeriem92@gmail.com](mailto:almeriem92@gmail.com)*

*Corresponding Author: [amarsaal@yahoo.fr](mailto:amarsaal@yahoo.fr)*

### Résumé :

La réactivité du polyoxométalate (hexamolybdate)  $[\text{IMo}_6\text{O}_{24}]^{5-}$  [1] et de ses analogues en tant qu'oxydant de transfert d'électrons et de transfert d'électrons-transferts d'oxygène a été étudiée de manière approfondie dans le passé et s'est révélée utile dans de nombreuses transformations. [2] Une des caractéristiques de cet oxydant est la possibilité de sa réoxydation avec de l'oxygène moléculaire, permettant ainsi des cycles catalytiques aérobie. [3] Bien que la réaction de réoxydation soit connue, la cinétique et le mécanisme de cette réaction n'ont pas été étudiés en détail. Les réactions sont du premier ordre dans le polyoxométalate et l'oxygène. Notre travail a pour but dans un premier temps, de définir un mécanisme réactionnel de la ré-oxydation du POM à l'aide des calculs computationnels

**Mots-clés :** *polyoxométalate, réoxydation, réactivité, Anderson-Evans.*



## Etude théorique de la complexation de la lidocaïne par $\beta$ -cyclodextrine

Mansour Azayez, Teffaha Fergoug, Youcef Bouhadda et Nouredine Meddah-araïbi

*Laboratoire de chimie physique des macromoléculaires et interface biologiques (LCPMIB),  
Faculté des Sciences, University of Mascara Mustapha Stambouli, BP 305, rue de Mamounia  
Mascara, 29000 Algérie*

**Résumé :** Dans le domaine pharmaceutique, les substances bioactives sont souvent des molécules hydrophobes à biodisponibilité limitée et à faible stabilité. Pour améliorer leur bioactivité et leur qualité, l'utilisation des cyclodextrines (CDs) en tant que molécules protectrices et porteuses représente l'une des meilleures alternatives [1,2]. De nombreux travaux expérimentaux ont été réalisés pour étudier la formation du complexe entre la lidocaïne et la  $\beta$ -CD [3-5], mais ces études ne sont pas arrivés au même résultat de complexation.

Dans cette étude, des calculs de chimie quantique ont été effectués pour étudier la réaction de complexation impliquant la lidocaïne et la  $\beta$ -CD en phase gazeuse. La méthode semi-empirique PM3 a été choisie pour optimiser les structures de la lidocaïne libre et de la  $\beta$ -CD libre et pour suivre le processus d'inclusion de la lidocaïne dans la cavité du  $\beta$ -CD. Afin d'affiner les résultats, nous avons procédé à une optimisation en utilisant la méthode ONIOM en combinant la théorie de la densité fonctionnelle (DFT), avec deux fonctionnelles d'échange et de corrélation (b3lyp et wb97xd), et la méthode semi-empirique PM3. Compte tenu du profil énergétique, la configuration des complexes formés indique que la lidocaïne peut être incluse dans la cavité de cette CD soit par son noyau benzénique, soit par le groupement  $-N(C_2H_5)_2$ , avec une légère priorité de ce dernier mécanisme. Les paramètres thermodynamiques montrent que les complexes lidocaïne/ $\beta$ -CD sont enthalpiquement favorable. L'analyse théorique de la théorie de la liaison naturelle (NBO) indique que les complexes lidocaïne/ $\beta$ -CD sont stabilisés par des forces de Van der Waals.



## Theoretical and experimental studies of polyphenols and flavonoids of propolis: antioxidant activity

Nour El Houda BENSIRADJ<sup>1\*</sup>, Nafila ZOUAGHI<sup>2</sup>, Marwa BOUZELIFA<sup>1</sup>, Khadija SALHI<sup>1</sup>  
and Ourida OUAMERALI<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de chimie théorique, computationnelle et photonique Faculté de Chimie USTHB, BP 32 El Alia, Alger, Algeria

<sup>2</sup>Laboratoire d'étude et de développement des techniques de traitement et d'épuration des eaux et de gestion environnementale. Ecole Normale Supérieure, Kouba, Algeria.

\*Email of corresponding author: [nourelhouda.bensiradj@gmail.com](mailto:nourelhouda.bensiradj@gmail.com)

### Abstract

In the context of the valorization of propolis (vegetable resin collected by bees), which is an important source of phenolic compounds, especially flavonoids, we are interested in an experimental and theoretical study of the chemical composition of this material.

Antioxidants are molecules that have the ability to donate a hydrogen atom to free radicals to limit their harmful effects. They have been described as having a large number of biological properties, anti-inflammatory, antiallergic, anti-diabetes and anti-cancer.

The first part of this work focuses on the study of the antioxidant activity of the ethalonic extracts of propolis (Algeria) by the DPPH method. The antioxidant activity will be evaluated as a percentage inhibition of DPPH by measuring the spectrophotometric absorbance.

The second part consists of the theoretical study of the structures of the main propolis compounds, as well as the determination of their chemical reactivity. Antioxidant potency will also be calculated theoretically using the HAT mechanism. All calculations are performed by density functional theory (DFT) using Gaussian 09 software and are compared with existing experimental data.

**Key words:** Propolis, antioxidant activity, polyphenols and flavonoids, DFT, chemical reactivity.



## Etude théorique des propriétés structurales et électroniques d'une molécule bioactive (base de schiff)

Fahima SNOUCI <sup>1</sup>, Samah HADJAR <sup>1,2</sup>

1. Université Larbi Tebessi, TEBESSA.
2. Laboratoire de chimie computationnelle et nanostructure, université 08 Mai 1948, GUELMA. Email : [hadjar.sameh@gmail.com](mailto:hadjar.sameh@gmail.com)

### Résumé

Les molécules organiques bioactives comme les bases de Schiff connues par leurs intérêts biologiques et thérapeutiques. La diversité des caractéristiques physico chimiques de ces molécules y donnent des propriétés thérapeutiques différentes. Notre travail est consacré à l'étude d'une molécule bioactive (azométhine). L'étude théorique qui a été effectuée par la DFT en utilisant la méthode B3LYP/6-31G (d,p) donne une aperçu sur les propriétés structurales et électroniques de la molécule. On a décrit son model tri dimensionnelle. Sa géométrie, sa stabilité et sa réactivité. On a examiné deux conformations différentes (azo1 et azo2). On a trouvé que l'azo2 est plus stable que l'azo1 ( $\Delta E=7.07$  kcal/mol). L'établissement des liaisons hydrogène entre la fonction azo et les deux hydroxyl jouent un rôle important à la stabilité de la molécule. Les orbitales frontières HOMO et LUMO sont calculés, les valeurs sont respectivement -6.24 ev et -2.77 ev. On a calculé aussi les descripteurs de réactivité tels que l'affinité électronique et le potentiel d'ionisation. On a investigué aussi leur propriétés électroniques, on a réalisé une étude spectroscopique d'absorption par UV/VIS, avec la méthode TD-DFT dans le but de savoir l'effet de solvant. En effet, le changement de polarité de milieu modifie le caractère électronique de la molécule qui a devenu plus intense avec le milieu apolaire. On a aussi montré par une analyse NBO la contribution de la liaison hydrogène et la conjugaison (entre les cycles aromatiques et les différents groupes substitués) à la stabilité de la molécule. On a conclu que le caractère hydrophobe de l'azométhine est le facteur principal qui permet l'interaction intramoléculaire avec les cyclodextrines ou les récepteurs biologiques.

**Mots clés** : azométhine, DFT, TD-DFT, spectre d'absorption, analyse NBO.



## Etude De L'Efficacité Inhibitrice De Molécules Organométalliques Sur La corrosion Du Cuivre Par Technique De Monte Carlo

Mouissa Fadila<sup>1</sup>, Benyahia Azzedine<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Ville, société, environnement et développement durable, Département de Chimie- Faculté des Sciences-Université Mohamed Boudiaf - M'sila

### **Résumé :**

La modélisation et la simulation atomique jouent un rôle important dans le domaine de l'inhibition de la corrosion. Dans notre étude, nous avons utilisé le logiciel **Materials Studio (v7.0)**. Cette technique, incorporant la mécanique et la dynamique moléculaires, a été employée pour simuler l'adsorption de quatre inhibiteurs : un inhibiteur commercial qui est le Bromure de tétrabutylammonium Br-TBA, les trois autres inhibiteurs ont été synthétisés au laboratoire, il s'agit du thiocyanate de zinc ( $Zn(SCN)_2$ ), du dithiocyanatedianiline- zinc(II)  $Zn(SCN)_2(An)_2$  et du dithiocyanatedithiourée-zinc(II) ( $Zn(SCN)_2(Tu)_2$ ). Les inhibiteurs ont été étudiés afin de suivre leur efficacité inhibitrice vis-à-vis de la corrosion surfacique du cuivre par la détermination des sites d'adsorption à basse énergie. Le calcul de l'énergie d'adsorption a permis de déduire que le Br-TBA est le plus efficace avec une énergie d'adsorption minimale (-691.04kcal/mol).

### **Mots clé :**

Simulation, Monte Carlo, Cuivre, Inhibiteurs organométalliques, Adsorption

## Etude théorique et structurale par RX d'un nouveau composé hybride riche en liaisons hydrogène

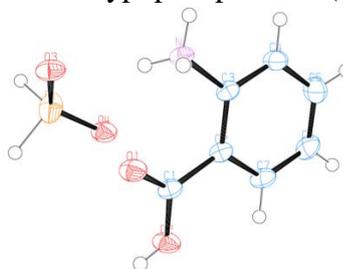
Fatima ALLOUCHE<sup>1</sup>, Samiha ARROUDJ<sup>2</sup> et Tahar BENLECHEB<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Capteurs, Instrumentations et Procédés (LCIP), Université Khenchela.

<sup>2</sup>Laboratoire de Structures, Propriété et interaction Inter Atomique (LASPI2A), Université Khenchela

[allouche\\_f@yahoo.fr](mailto:allouche_f@yahoo.fr)

**Résumé :** Dans notre travail nous nous sommes intéressés à l'étude théorique par DFT et par diffraction des RX, de composés hybrides formés de matrice organique cationiques et d'anions minéraux. Les investigations sur les matériaux hybrides "organique inorganique" visent à produire des propriétés et des fonctionnalités souhaitables, mettre en évidence ou optimiser les caractéristiques optiques [1], électrochimique, magnétique [2] ou électrique [3] et en même temps réduire ou supprimer complètement des effets indésirables. La combinaison de la matrice organique (acide anthranilique) et des anions minéraux nous a permis d'obtenir des structures originales présentant des liaisons hydrogènes fortes, moyennes et faibles. Plusieurs cristaux ont été déjà isolés dans ce système [4-5-6-7-8]. Le nouveau composé original à base de l'acide anthranilique et de l'anion minéral [8] a été synthétisé par protonation de l'acide anthranilique par l'acides hypophosphoreux (Figure 01)



**Figure 01:** ORTEP de l'unité asymétrique du  $\text{COOH-C}_6\text{H}_4\text{-NH}_3^+ \cdot \text{H}_2\text{PO}_2^-$

Ce composé est stabilisé par un réseau tridimensionnel des liaisons hydrogènes. Trois types d'interactions (anion-anion cation-cation et cation-anion) assurent la cohésion et la stabilité de la structure. L'étude théorique des propriétés structurales et spectroscopiques (IR et RAMAN) du nouveau composé hybride 2-carboxyanilinium hypophosphite étant effectués sur la base de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Une étude comparative était faite afin d'en tirer les conclusions nécessaires.

**Mots clés :** composés hybrides, diffraction des RX, liaisons hydrogène, DFT.



## Ligand-based pharmacophore searching and molecular docking for the discovery of novel cytotoxic agents targeting human glutathione-S-transferases

Almi Imane<sup>1</sup>, Melkemi Nadjib<sup>1</sup>, Salah Toufik<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Group of Computational and Pharmaceutical Chemistry, LMCE Laboratory, University of Biskra, BP 145 Biskra 07000, Algeria  
E-mail: [imaneelmi@gmail.com](mailto:imaneelmi@gmail.com).

### Abstract :

In silico methods have been used more and more in the new drug development process, to reduce time and cost by increasing the number of analyzed molecules, in addition, to predict the biological activity by chemical structure [1, 2]. The term ‘virtual screening’, which was coined in the late 1990s, describes the use of computational algorithms and models for the identification of novel bioactive molecules [3]. Virtual screening is a computational approach for the knowledge-based identification of compounds with a defined biological activity. These methods are broadly classified as either structure-based or ligand-based methods [4]. In the present investigation, we successfully used pharmacophore modeling, database screening, and molecular docking approaches to identify potential leads with antitumor activities. Pharmacophore is defined as an arrangement of molecular features or structural elements related to biological activity. Ligand-based pharmacophore modeling was used to identify the chemical features responsible for inhibiting Glutathione-S-Transferase (GST p1-1), A pharmacophore feature could be composed of functional groups. A set of 40 compounds was used to generate hypothetical pharmacophores. After validation, the best model was used as a 3D structural search query to screen the database witch containing more than 200000 and to find new classes of compounds from Specs database. The hit compounds were subsequently subjected to filtering by Lipinski’s and veber’s rules and molecular docking. Finally, four compounds were identified as potential leads against GST p1-1 enzyme, showing lowest energies (MolDockScore) and strong interactions to the active site residues of the GST enzyme. Therefore, these ligands can form stable complexes, and they may act as novel leads for GSTP1-1 inhibitors designing.

**Keywords:** GST p1-1, NBD, Pharmacophore, Docking, Virtual screening.



## Prédiction de l'activité antitopoisomérase d'une famille des benzo[C] phenanthridines (BZPS) in silico

Khadidja Amirat<sup>1</sup>, Fatiha Mebarki<sup>2</sup>, Nadia Ziani<sup>3</sup>.

Laboratoire de sécurité environnementale et alimentaire (LASEA), université Badji Mokhtar –  
Annaba, B. P. N° 12, 23000, Annaba, Algérie.

1 : [khadidja\\_amirat@yahoo.fr](mailto:khadidja_amirat@yahoo.fr)

### Abstract :

Depuis longtemps, la chimiothérapie joue un rôle important dans le traitement du cancer, particulièrement pour les tumeurs inopérables, métastatiques et systémiques. Plusieurs agents utilisés en clinique, disponibles pour la chimiothérapie du cancer, se différencient par leurs mécanismes d'action. Ils peuvent :

- endommager le matériel nucléaire (ex : agents alkylants), les protéines (ex : poisons des topoisomérases), ou s'incorporer comme fausses bases (ex : analogues nucléosides),
- intervenir dans la synthèse des co-facteurs vitaux et des précurseurs protéiques/ ARN/ADN (ex: antimétabolites, asparaginase),
- intervenir dans d'autres structures et procédés cellulaires (interactions avec la tubuline)
- inhiber les signaux de la croissance cellulaire (ex : inhibiteurs tyrosine kinase) [1].

L'apparition des populations de cellules cancéreuses résistantes à la chimiothérapie incite les scientifiques à chercher continuellement de nouvelles structures. Les enzymes de type topoisomérase sont, depuis plusieurs années, des cibles pleines de promesses [2] [3]. Parmi les agents exprimant une activité à visée antitopoisomérase, les alcaloïdes de la famille des benzo[c]phénanthridines sont bien connus [4]. De nombreuses études ont été réalisées afin de trouver des voies synthétiques des dérivés naturels (nitidine, fagaronine, chélérythrine, sanguinarine...), afin de disposer de quantité suffisante pour confirmer leur mécanisme moléculaire d'action. Parallèlement de nombreux analogues ou isomères du noyau benzo[c]phénanthridinique ont été synthétisés et évalués pour mesurer leur activité sur les topoisomérases et évaluer leur cytotoxicité. Parmi eux, NK109 et ARC111 sont actuellement des candidats potentiels à la chimiothérapie des cancers. Parmi les agents antitumoraux exprimant une activité sur les topoisomérases, les alcaloïdes de la famille des benzo[c]phénanthridines ((BZPs)) sont bien connus. Une recherche de relation structure/activité quantitative (RSAQ/3D) a été menée. L'équation de RSAQ/3D a été construite à partir de 87 analogues de BZPs possédant une activité antitopoisomérase en utilisant les logiciels Hyperchem [2], et Dragon [3]. Parmi une centaine de modèles à trois régresseurs obtenus nous avons sélectionné par le logiciel Molidigs [4] celui qui présente les meilleures valeurs du paramètre de prédiction ( $Q^2$ ) et du coefficient de détermination ( $R^2$ ) :  $\text{LogIC } 50 = 2.21 - 1.84 \text{ BELv8} - 0.203 \text{ RDF040m} - 3.31 \text{ Mor32v}$ ;  $n = 87$ ;  $S = 0.6258$ ;  $Q^2(\%) = 75.84$ ;  $R^2(\%) = 78.39$ ;  $F = 68.9416$ ;  $Q^2_{\text{boot}} = 74$ ,  $Q^2_{\text{ext}}(\%) = 77.7$ ,  $R^2_{\text{adj}}(\%) = 77.26$ .

**Mots clés:** Analogues de BZPs, Descripteurs, Logiciels, Activité antitopoisomérase.



## Simulation Of Docking Trans Polydatin With Beta Cyclodextrin And Derivatives : A Molecular Modeling Approach

Samia Amirat<sup>a</sup>, Amel Zaboub<sup>a</sup>, Fatiha Madi<sup>b</sup>, Abdelhak Gheid<sup>c</sup>, Rachid Merdes<sup>a</sup>.

a) Chemistry laboratory applied, Department of sciences of the matter, University May 8 45 B.P. 401 Guelma 24000 Algeria

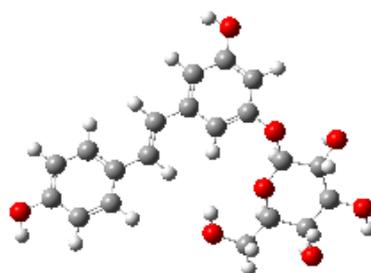
b) Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, Department of Material Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics and Material Sciences, University of 08 Mai 1945 BP 401 Guelma, Algeria

c) Laboratory sciences technique of water and environnement, Department of sciences of the matter, University Mohammed SherifMessaadia LP 1553 Ahras Souk 41000 Algeria

E-mail: [asamiachimie2005@gmail.com](mailto:asamiachimie2005@gmail.com)

### ABSTRACT

In this research, we studied the host–guest interactions between derivatives cyclodextrin and trans polydatin <sup>(1)</sup> in vacuum and water (with a 1:1 stoichiometry). Semi-empirical PM6, Density Functional Theory (DFT), MP2, and MP4 methods were employed. to investigate the structure and the stability of the resulting the complex involving two different binding models (A and B).





## Structural and Vibrational Properties of 4-amino-N-pyrimidin-2-yl-benzene sulfonamide: A Computational Study

Amrani Selma, Madi fatiha and Nouar Leila

*Laboratory of computational chemistry and nanostructures*

*Department of Material Sciences, Faculty of Mathematical,*

*Informatics and Material Sciences,*

University of 08 Mai 1945 BP 401 Guelma, Algeria

*Email: fatiha\_madi@yahoo.fr*

### **Abstract**

In this work, molecular structure and the vibrational spectra of 4-amino-N-pyrimidin-2-yl-benzene sulfonamide (SDZ) is studied theoretically by DFT/B3LYP calculations employing the standard 6-311<sup>++</sup>G(d,p) basis set for global minima; potential energy scan was computed by means scanning CSNC torsion angle. A detailed analysis of the vibrational characteristics of SDZ is presented and discussed. Additionally, the electronic properties, such as HOMO, LUMO energies, absolute softness  $S$  and absolute hardness  $\eta$  were performed.

**Keywords:** B3LYP/6-311<sup>++</sup>G(d,p), SDZ



## Qualitative and quantitative structure-tubulin inhibitors activities relationship of 1.3.4-thiadiazole derivatives

NABILA AOUMEUR<sup>1</sup>, NOUREDDINE TCHOUAR<sup>1</sup>, SIHEM MEDJAHED<sup>1</sup>,  
OUALID OUKIL<sup>1</sup> AND SALAH BELAIDI<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry, Oran University of Science and Technology (USTO-MB) BP 1503 Oran 31000, Algeria, [nabila.aoumeur@univ-usto.dz](mailto:nabila.aoumeur@univ-usto.dz)

<sup>2</sup>Groupe de chimie informatique et pharmaceutique, Laboratoire de chimie moléculaire et environnement, Département de chimie, Université de Biskra, BP 145 Biskra 07000, Algérie

### Abstract

Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) studies have been performed on twenty-three molecules of 1.3.4-thiadiazole derivatives. The compounds used are the potent inducers of antitubulin activity. A multiple linear regression (MLR) procedure was used to design the relationships between molecular descriptor and the activity of 1.3.4-thiadiazole derivatives. The predictivity of the models was estimated by cross-validation with the leave-one-out method. From the results we obtained, our best QSAR model, with physico-chemical and quantum descriptors showed that the two types of descriptors are important to ameliorate the inhibitory activities against tubulin. Results show high correlation between experimental and predicted activity values, indicating the validation and the good quality of the derived QSAR models. High correlation between experimental and predicted activity values was observed, indicating the validation and the good quality of the derived QSAR models.

**Keywords:** antitubulin activity, MLR, 1.3.4-thiadiazole, SAR, QSAR model.



## ***DFT investigation of charge transfer complex formation between p-phenylenediamine and 3,5-dinitrosalicylic acid***

*Athmani ali salah<sup>(a)</sup>, Madi fatiha<sup>(a)\*</sup>, Nouar leila<sup>(a)</sup> and Merdes rachid<sup>(b)</sup>*

<sup>(a)</sup>*Laboratory of computational chemistry and nanostructures,  
Department of material sciences, Faculty of mathematical, informatics and material sciences,  
University of 08 Mai 1945, Guelma, Algeria*

<sup>(b)</sup>*Laboratory of applied chemistry  
Department of material sciences, Faculty of mathematical, informatics and material  
sciences, University of 08 Mai 1945, Guelma, Algeria*

<sup>(c)</sup>*Institut Supérieur d'Informatique et de Mathématiques de Monastir  
Laboratoire de physique quantique et statistique, Université de Monastir, Tunisie.*

\*E-Mail: [fatiha\\_madi@yahoo.fr](mailto:fatiha_madi@yahoo.fr), [madi.fatiha@univ.guelma.dz](mailto:madi.fatiha@univ.guelma.dz)

### ***Abstract***

This study presents a computational investigation of p-phenylenediamine (PPD) interaction with 3,5-dinitrosalicylic acid (DNS) within PPD/DNS charge transfer (CT) complex. All calculations were performed by M06-2X/6-311+G (d, p) levels of theory in vacuum, water and methanol. EDA analysis was used to control the complexation process and suggested that electrostatic and dispersion energies contributes greatly in stabilizing PPD/DNS CT complex. The results of energy optimization showed that PPD/DNS CT complex is stable with negative complexation energy; the obtained geometries showed that ammonium group of PPD is closed to carboxylate one of DNS enabling the establishment of large number of interactions. Additionally, different analyses were performed on obtained optimized structures: TD-DFT, NBO, QTAIM and NCI. Consequently, NBO, QTAIM and NCI analysis give that PPD/DNS CT complex is stabilized by hydrogen bonding and van der Waals interactions.

**Keywords:** PPD, DNS, energy, EDA, NBO, QTAIM and NCI.



## Etude *Ab initio* de la structure de bande électronique du nanotube de carbone spiralé monoparoi de type zigzag (n,0)

Lina Linda Bechohra<sup>1</sup>, Hamza Azzaz<sup>2</sup>, Karim Rezouali<sup>3</sup>, Sofiane Safer<sup>3</sup>, Kellou-Tairi Safia<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Laboratoire de Physico-Chimie Théorique et Chimie Informatique, BP 32 Bab Ezzouar, Algerie

<sup>2</sup>Laboratoire des Sciences et de Génie des Matériaux, USTHB, BP 32 Bab Ezzouar, Algerie

<sup>3</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Science Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algerie

Email: [lynabechohra@gmail.com](mailto:lynabechohra@gmail.com)

### Résumé:

Le modèle du nanotube de carbone spiralé (NTCS) utilisé dans ce travail a été proposé par Azzaz et al [1].

Les nanotubes de carbone spiralés (NTCSs) ont été observés expérimentalement pour la première fois en 1994 [2]. Ils sont classés parmi les nanotubes de carbone NTCs ayant une structure spiralée. Cette spirauté est due à la présence de défauts heptagonaux et pentagonaux dans le réseau hexagonal. Comme les nanotubes linéaires, les NTCSs seraient dotés de propriétés physiques et chimiques uniques voire intéressantes. Ces matériaux spiralés présentent d'excellentes propriétés mécaniques, électriques et magnétiques. Ils auraient des applications remarquables dans les nanocomposites, les composés nanoélectroniques et les dispositifs nanoélectromécaniques.

Quelques études théoriques, sur la structure de bande électronique du NTCS, basées sur la méthode des liaisons fortes (TB), ont été discutées et ont prédit le caractère semi-métallique, en plus de leur comportement métallique et semi-conducteur. Cependant, à ce jour, aucune étude *ab initio* n'a été réalisée pour étudier les propriétés sus-citées. .

Notre objectif dans ce travail consiste à mieux comprendre la structure électronique des NTCSs. Pour cela, nous avons entrepris une optimisation de la géométrie. Cette optimisation est suivie du calcul et de l'analyse des propriétés électroniques par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), cette méthode est disponible dans le logiciel SIESTA. Les résultats de simulation obtenus (band gaps, densité d'états, densités de charge) ont été comparés avec ceux où la méthode de liaison forte est utilisée, ainsi que ceux relatifs aux nanotubes de carbone linéaire de type zigzag.

**Mots clés :** nanotube de carbone spiralé, propriétés électroniques, DFT, structure de bande.



## The physicochemical properties of Asgen (n=1-10) nanoclusters: A DFT study

Meriem Benaida<sup>1</sup>, Kamal Eddine Aiadi<sup>1</sup>, Sofiane Mahtout<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Laboratoire de Développement des Energies Nouvelles et Renouvelables en Zones Aride,  
Université de Ouargla, 30000 Ouargla, Algeria*

<sup>2</sup> *Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia,  
06000 Begaia, Algeria*

E-mail: [meriembenaida@gmail.com](mailto:meriembenaida@gmail.com)

### ABSTRACT

We reported a systematic computational study based on the density functional theory (DFT) aiming to high light the possible effects of one As doping atom on the physicochemical properties : structural, energetic, and electronic properties of different isomers of  $Ge_{n+1}$  clusters with  $n = 1-10$  atoms. By considering a large number of structures for each cluster size, the lowest-energy isomers are determined. The lowest-energy isomers reveal three-dimensional structures starting from  $n = 4$ . Their relative stability versus atomic size is examined based on the calculated binding energy, fragmentation energy, and second-order difference of energy. Doping  $Ge_{n+1}$  cluster with one As atom does improve their stability. The electronic properties as a function of the atomic size are also discussed from the calculated HOMO-LUMO energy gap, vertical ionization potential, vertical electron affinity, and chemical hardness. The obtained results are significantly affected by the inclusion of one As atom into  $Ge_n$  cluster.

**KEYWORDS:** The density functional DFT, Ge-As clusters, Structural properties, Electronic properties.



## Etude par docking moléculaire de l'inhibition des CYP3A4 par le jus de pamplemousse

*BENCHEIKH Bochra<sup>a</sup>, TIFOURAK Dalal<sup>a</sup>, DJEMIL Rayenne<sup>a</sup>, CHERIET Mound<sup>b</sup> et LACHI Nadia<sup>a</sup>*

*Département des sciences de la matière*

*<sup>a</sup>Laboratoire de Chimie Computationnelle et des Nanomatériaux (LCCN),*

*<sup>b</sup>Laboratoire de Chimie Appliquée (LCA)*

*Université 8 Mai 1945 Guelma*

*b.bencheikh24@gmail.com*

### Résumé :

Dans ce travail, nous avons étudié par Docking moléculaire l'inhibition des cytochromes CYP3A4 par le jus de pamplemousse pour mieux connaître les constituants du pamplemousse responsables de l'inhibition et de prédire leurs actions sur ces CYPs et sur le métabolisme des médicaments avec lesquels il interagit. Nous avons expliqué le mode d'interaction du complexe par la fixation de l'inhibiteur dans l'enzyme, avec une meilleure et forte complémentarité. Les résultats de Docking montrent que le CYP présente une affinité pour l'inhibiteur meilleure que pour le médicament et par conséquent, le complexe CYP-inhibiteur est plus stable que CYP- médicament. Nous pouvons conclure que le jus de pamplemousse présente une activité inhibitrice importante pour les CYPs par au moins un de ses constituants.

**Mot clés :** Docking moléculaire, Inhibition, CYP3A4, Jus de pamplemousse.

## Etude théorique de l'inclusion du pyrazol dans la Béta-cyclodextrine

*Bouchemella houria, Madi Fatiha, Nouar Leila*

Laboratoire de Chimie computationnelle et nanostructures (LCCN)  
Université du 08 Mai 1945 BP 401 Guelma, Algerie

*E-mail : bouchemella\_h@hotmail.it*

### Résumé:

La complexation du pyrazole dans la Béta-cyclodextrine a été menée théoriquement en utilisant les méthodes *PM3*, *PM6* et *B3lyp/6-31G(d, p)*. Pour l'étude de ce complexe deux modes de complexation ont été considérés. Les résultats obtenus indiquent que les complexes formés en utilisant toutes les méthodes sont énergétiquement favorables, le modèle B (pyrazole pénètre la cavité de la  $\beta$ -CD par sa face large avec le groupe amine) est plus favorable que le modèle A (le pyrazole pénètre la cavité de la  $\beta$ -CD par sa face large avec le groupe méthyle). En plus, les analyses NBO ont identifié l'existence d'interactions mutuelles entre les orbitales donneuses et acceptrices du pyrazole et de la  $\beta$ -CD qui sont un facteur important dans la stabilisation de ce type de complexe.

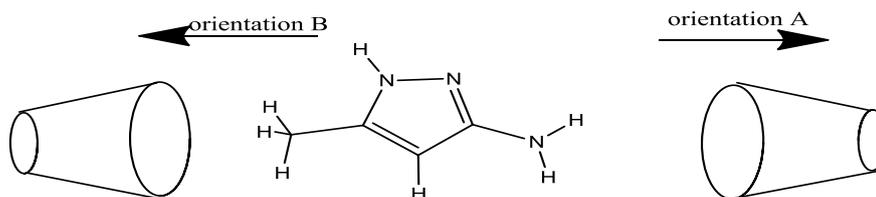


figure 1: les deux modes d'introduction de la pyrazole dans la Béta cyclodextrine

**Keyword:** *B-CD*, *PM3*, *PM6*, *B3LYP*.



## **Etude par DFT et TD-DFT de la structure et des propriétés optiques des nouveaux composés à base de schiff**

K. Bouchemella<sup>1</sup>, B. Anak<sup>1,2</sup>.

<sup>1</sup>*Laboratoire de Chimie des Matériaux, Université Frère Mentouri Constantine, Algérie.*

<sup>2</sup>*Ecole normale supérieure de Constantine \_Assia Djabar- (ENSC).  
Kh.bouchemella@gmail.com*

### **RESUME :**

Les composés à base de Schiff sont des molécules polyvalentes bien connues qui ont récemment fait l'objet d'une grande attention dans différents domaines. [1] Ces composés ont été utilisés comme colorants et pigments, inhibiteurs de corrosion, matériaux thermostables et catalyseurs [2] et dans des applications médicales comme agents antifongiques, anticancéreux et antibactériens. [3] Nous présentons l'étude des composés à base de Schiff en phase gazeuse, les calculs ont été effectués dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la densité DFT indépendante du temps et TD-DFT (Théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps), il s'agit de calculer les propriétés structurales, énergétiques et les spectres d'absorption UV-Visible par la fonctionnelle B3LYP et la base 6-31+G (d,p) . Les calculs sont effectués avec le programme GAUSSIAN 09. [4]



## Molecular modeling study of simazine by $\beta$ -cyclodextrin

Bouhadiba Abdelaziz<sup>a</sup>, Rahim Mouhamed<sup>b</sup>, Nouar. Leila<sup>c</sup>.

<sup>a,b</sup> Faculty of technology, Department of Petrochemical and Process Engineering, University of  
20 Août 1955 Skikda, Algeria

<sup>a,b,c</sup> Laboratory of Computational Chemistry and nanostructure, Guelma University Address:  
BP: 401; Guelma, 24000, Algeria.

### Abstract

The interactions between simazine and  $\beta$ -Cyclodextrin ( $\beta$ -CD) have been analyzed employing PM7, and DFT methods in vacuum. 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 simazine and  $\beta$ -CD.

**Keywords:**  $\beta$ -Cyclodextrin, simazine, PM7, DFT, NBO.



## Stability and electronic properties of copper doped nickel nanoclusters : A DFT investigation

Mouhssin Boulbazine<sup>1</sup>, Abdel-Ghani Boudjahem<sup>1</sup>, Meryem Dardare<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Catalysis Group, Laboratory of Applied Chemistry, University of Guelma, BP 401, 24000 Guelma, Algeria*

E-mail:mohcene24@gmail.com

### Abstract

In this study, the electronic and magnetic properties of small NiCu nanoclusters were studied by using DFT calculations. The relative stabilities of these clusters have studied by the same level of theory in terms of the binding energies, second-order difference of energies, fragmentation energies and HOMO-LUMO energy gaps. The calculated energy gaps (spin-up and spin-down) reveal that the NiCu nanoclusters behave as half-metallic nanomaterials. Thus, these clusters are expected to have high catalytic activity for several heterogeneous reactions. Particularly, they can be employed as nanocatalysts for the hydrogenation of the aromatic compounds. Higher energy gap was calculated for the Ni<sub>5</sub>Cu nanocluster (2.265 eV), suggesting the highest stability compared to the other clusters. Based on the VIP and VEA values, the results show the NiCu nanoclusters can more easily gain electrons.

**Key words:** NiCu nanoclusters, Stability, HOMO-LUMO energy gaps, electronic properties.



## DFT study of nanotubes as the drug delivery vehicles of montelukast

<sup>1,\*</sup> Walid BOUOUDEN ; Yacine BENGUERBA

<sup>1</sup>Laboratory of Chemical Process Engineering (LCEP), Faculty of Technology,  
Ferhat Abbas University-Setif-1, 19000, Setif-Algeria

\*[bououden.walid@hotmail.com](mailto:bououden.walid@hotmail.com)

### Abstract

Montelukast is a well-known drug indicated for the prophylaxis and chronic treatment of asthma. It acts as a selective antagonist of the leukotriene D4 receptor which leads to the reduction of bronchoconstriction and results in less inflammation. Montelukast is administered orally once daily which yields a benefit in comparison with a majority of drugs for pulmonary disorders such as asthma. [1,2]. However, some disadvantages such as the poor water solubility, low inherent dissolution rate, low oral bioavailability of EFV limited its therapeutic effect. Nanoparticles or nanostructures can overcome the resistance of the diseases to drugs and are extensively explored as drug delivery carriers in the diagnosis and treatments of many diseases. In the present work, the capability of the boron nitride nanotubes (BNNTs) and carbon nanotubes (CNTs) as the delivery vehicles of EFV was studied respectively. The electronic properties and interaction mechanisms of EFV with the BNNTs and CNTs have been explored by density-functional theory (DFT). The intermolecular interactions between EFV and nanotubes were investigated by analyzing the optimized structure and interaction energy. Results suggest that EFV can be adsorbed physically on the CNTs with a stable state, indicating that CNTs may be a potential delivery vehicle of EFV. The DOS plots, HOMO-LUMO orbitals, and RDG analyses indicate that the electronic properties of the pristine nanotubes are not changed after the adsorption of EFV on nanotubes. Due to the large  $\pi$ - $\pi$  interactions of EFV with CNTs, the computed interaction energies reveal that the adsorption of EFV on CNTs are more favorable than that on BNNTs. CNTs can thus server as a drug delivery vehicle for the transportation of the anti-asthmatic drugs within the biological system.

**Keywords:** Montelukast, Leukotriene D4, boron nitride nanotubes, carbon nanotubes, DFT.



## Vibrational spectra, optical properties, NBO and HOMO–LUMO analysis of para-phenylenediammonium: DFT calculations

Boursas Fawzia

*Laboratoire de chimie-physique, Université 08 Mai 1945, Guelma 24000, Algeria.,*

*e-mail: [boursfouzia@yahoo.com](mailto:boursfouzia@yahoo.com)*

### **Abstract**

The present study is a continuation of our investigations on characterization of phenylenediamine based crystals in the solid state. P-phenylenediamine and its derivatives of organic and inorganic complexes or salts can develop well defined non-covalent supramolecular architectures via multiple hydrogen bonds, since they contain complementary arrays of hydrogen bonding sites. The present paper is interested in the structural study of new hybrid salts of p-phenylenediammonium di (hydrogenesulfate). The intense hydrogen-bonded systems formed in these salts were widely investigated as responsible for structural changes occurred. We also were interested in vibrational spectra for p-phenylenediammonium di (hydrogenesulfate) crystal among others due to hydrogen bond system present in this crystal.

***Mots clés:*** DRX, Vibrational spectra, p-phenylenediamine, DFT calculations

## A DFT study of inclusion complexes between lidocaine and $\beta$ -cyclodextrin in vacuum and in water

Imane DJELLALA<sup>a\*</sup>, Mouna CHERIET<sup>b</sup>, Leila NOUAR<sup>a</sup>, Fatiha MADI<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, university of 8 May 1945,  
Guelma, Algeria

<sup>b</sup>Laboratory of chemistry applied, university of 8 May 1945, Guelma, Algeria

\*E-mail: [imane.djellala@gmail.com](mailto:imane.djellala@gmail.com)

### Abstract

In this work, we investigate theoretically, the structure and electronic properties of inclusion complex of betacyclodextrin ( $\beta$ CD) with lidocaine in vacuum and in water using DFT calculations at MPW1PW91/6-31G(d) level. Two modes of complexation were taken into consideration. The complexation energy, HOMO-LUMO energy gap were computed and discussed for the inclusion complexes. The results demonstrate that the complex formation is energetically favorable in vacuum and in water. Furthermore, electronic properties given by TD-DFT calculation clearly demonstrate that a charge transfer was occurred between betacyclodextrin ( $\beta$ CD) and lidocaine.

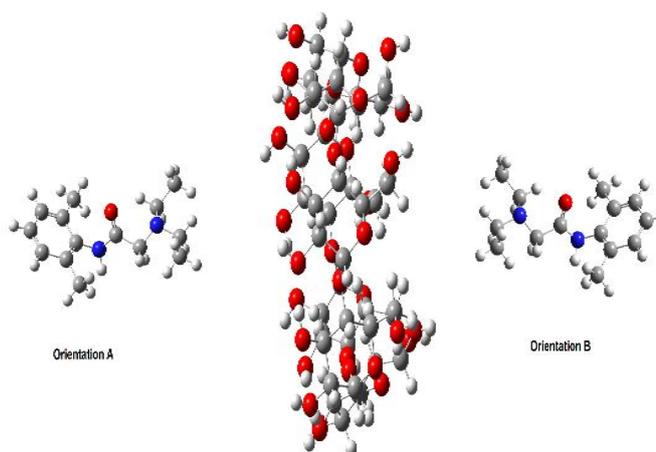


Figure.1 the inclusion complex of betacyclodextrin ( $\beta$ CD) with lidocaine

**Keywords:**  $\beta$ -cyclodextrin, lidocaine, DFT, inclusion complex.



## Etude théorique de l'oxydation atmosphérique de la butadiène

DJEMIL Rayenne<sup>a</sup>, MESSAOUDI Boulanouar<sup>b</sup>, CHERIET Mouna<sup>c</sup>, MADI Fatiha<sup>a</sup>  
et KHATMI Djameleddine<sup>d</sup>

<sup>a</sup> *laboratoire de chimie computationnelle et de nanostructures. Université 8 mai 1945, P.O. Box 401, Guelma, 24000, Algérie*

<sup>b</sup> *Laboratoire de thermodynamique appliquée et de modélisation moléculaire, Département de chimie, Université de Tlemcen, P.O. Box 119, Tlemcen, 13000, Algérie*

<sup>c</sup> *Laboratoire de chimie appliquée. Université 8 mai 1945, P.O. Box 401, Guelma, 24000, Algérie*

<sup>d</sup> *Institut des Sciences Moléculaires ISM2 Marseille. France  
E-mail messdjem@gmail.com*

**Résumé :** Afin de contribuer à l'étude des mécanismes réactionnels d'oxydation de 1,3-butadiène par l'oxygène triplet O(<sup>3</sup>P) et dans le but de prédire les chemins réactionnels les plus probables, la réaction d'oxydation atmosphérique de 1,3-butadiène a été suivie par la fonctionnelle B3LYP et la méthode MP2 associées à la base 6-31G(d). La surface d'énergie potentielle de la réaction et les différentes voies possibles ont été exploitées. Les résultats ont montré que (P2) est le produit principal de la première voie de l'oxydation du 1,3-butadiène par l'oxygène triplet O (<sup>3</sup>P) ; alors que (P`2) est le produit le plus stable pour la deuxième voie de l'oxydation du 3-buténa1 par l'oxygène triplet O (<sup>3</sup>P). Le meilleur accord avec les enthalpies réactionnelles expérimentales a été obtenu avec la méthode B3LYP / 6-31G (d).

## Encapsulation of Flavonoid Fisetin With - $\beta$ -Cyclodextrin: Spectral and molecular modeling studies

a: *F. Djebiha*, a: *R. Merdes*, b: *A. Bouhadiba*, b: *M. Rahim*

<sup>a</sup> *Laboratory of applied chemistry, Department of Material Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics and Material Sciences, University of 08 Mai 1945, BP 401, Guelma, Algeria*

<sup>b</sup> *Laboratory of computational chemistry and nanostructures, Department of Material Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics and Material Sciences, University of 08 Mai 1945, BP 401, Guelma, Algeria*

### **Abstract:**

This work presents a computational study of the inclusion complex formation between Fisetin (FIS) and  $\beta$ -cyclodextrin ( $\beta$ -CD) in vacuum and water (with a 1:1 stoichiometry).

Two possible models A and B of FIS in  $\beta$ -CD cavity were considered. Both PM7 and DFT via the ONIOM2 procedure, gives that FIS is totally encapsulated in  $\beta$ -CD cavity for A model and is partially encapsulated for B model. In addition, charge transfer between donor and acceptor orbit of FIS and  $\beta$ -CD play an important role in stabilizing the inclusion complex.

Finally, <sup>1</sup>H Nuclear Magnetic Resonance (NMR) chemical shifts of free and complexed FIS were calculated by the Gauge-Including Atomic Orbital (GIAO) method.

### **COMPUTATIONAL METHOD**

All calculations were performed using Gaussian 09 quantum mechanical package [14] and MOPAC2016. The structure of FIS was constructed using Hyperchem 7.5 molecular modeling package The initial structure of  $\beta$ -CD was taken from Chem office 3D Ultra data, The both structures FIS and  $\beta$ -CD were optimized by the PM7 semi-empirical method. See Fig. 1.

**Fig. 1:** Structures of FIS (a) and  $\beta$ -CD (b) optimized at PM7 methods



**Keywords:**  $\beta$ -CD; FIS; PM7; ONIOM2; NBO; GIAO



## Computational Study of the complexation of Vitamine-A in the beta-cyclodextrin

Faima Yahia Cherif <sup>1</sup>✉\_Abdelkrim Guendouzi,

*Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université M. TAHAR B.P.138, Saïda 20000, Algeria.*

### Abstract

In this research, we describe a study on the inclusion complex formation between Vitamine- A, and beta-cyclodextrin ( $\beta$ -CD). We use docking and quantum chemical calculations to ascertain the capability of the nano hydrophobic cavity of Beta-cyclodextrin ( $\beta$ -CD) to encapsulate this compounds(X), the formation of 1:1 a stoichiometry ratio of host-guest inclusion complex (X- $\beta$ -CD) in the solution phase were investigated using density functional theory modeling, four groups of conformers were found 'orientation'.

**Keywords:**  $\beta$ -cyclodextrin, Energy decomposition, Guest–host complexes , drugs

## Détermination des interactions intermoléculaires dans le complexe d'inclusion : vanilline/Béta-cyclodextrine

Gharibi Meryem<sup>(1)</sup>, Madi Fatiha<sup>(2)</sup>, Nouar leila<sup>(2)</sup>, Merdes rachid<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> laboratoire de Chimie Appliqué (LCA).

<sup>(2)</sup> laboratoire de Chimie computationnelle et nanostructures (LCCN)

E-mail : [meriem.gh24@gmail.com](mailto:meriem.gh24@gmail.com)

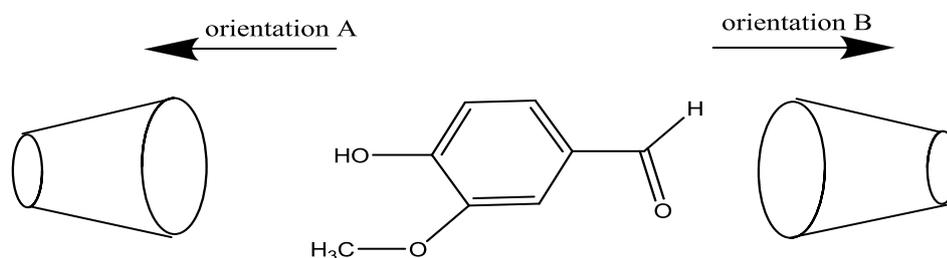
### Résumé

Les complexes d'inclusion de stœchiométrie 1:1 formé entre la béta-cyclodextrine et la vanilline a été étudié par différentes méthodes de modélisation moléculaire telle que : *PM3*, *B3LYP/6-311G<sup>++</sup>* ; *CAMB3LYP/6-311G<sup>++</sup>*.

Pour cela, un processus d'inclusion a été déterminé par la méthode semi empirique *PM3* pour localiser le minimum énergétique lors de l'approche de la vanilline vers la béta-cyclodextrine selon deux directions différentes (Figure).

Après la localisation des deux minimums qui sont soumis à différentes optimisations par les méthodes *B3LYP/6-311G<sup>++</sup>* et *CAMB3LYP/6-311G<sup>++</sup>* les grandeurs thermodynamiques ont été calculés et l'analyse des interactions intermoléculaires a été effectuée et discutée par les méthodes *NBO* et *AIM*.

**Keyword:** Vanilline, B-CD, *PM3*, *B3LYP/6-311G*, *CA?B3LYP/6-311G<sup>++</sup>*.



les deux modes d'introduction de la vanilline dans la béta cyclodextrine



## Etude de relation quantitative structure–Activité des composés chimiques à l'aide des descripteurs moléculaires. (Modélisation QSAR)

HAMMOUDI Nour El houda<sup>a\*</sup>, BENAICHA Mohamed<sup>a</sup>, BENGUERBA Yacine<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de (LEES), Département de Génie des Procédés, Université Ferhat ABBAS – Sétif, Algérie.

<sup>b</sup>Laboratoire de (LMPMP), Département de Génie des Procédés, Université Ferhat ABBAS – Sétif, Algérie.

\*E-mail : hammoudi\_nourelhouda@yahoo.com

### Résumé :

Les relations quantitatives structure-activité (QSAR) sont très utiles pour comprendre la corrélation entre la structure chimique et les propriétés physico-chimiques ou les descripteurs moléculaires théoriques des produits chimiques avec une activité biologique. L'objectif de Ce travail est de développer un modèle QSAR fiable et prédictif permettant, d'une part une exploration des principaux descripteurs moléculaires responsables de l'activité inhibitrice vis-à-vis de l'enzyme (acétylcholinestérase), d'autre part la prédiction de l'activité inhibitrice de nouveaux composés avant de les tester expérimentalement, en se basant sur des descripteurs quantique et non quantique. Les descripteurs quantiques calculés sont HOMO, LUMO, le moment dipolaire, les tailles moléculaires (surface et volume) et le profil sigma de tous les composés. Les autres descripteurs ont été obtenus par le site suisse ADME. Après l'optimisation géométrique de tous les composés, les fichiers cosmo générés présentent toutes les informations nécessaires au calcul de la fonction  $\sigma$  sigma profil, qui a été subdivisée en dix surfaces profil  $S\sigma$ . Les dix surfaces de 0,001 e / Å<sup>2</sup> de large, comprises entre -0,025 e / Å<sup>2</sup> et 0,025 e / Å<sup>2</sup> (axe des X), ont été utilisées comme descripteurs quantiques. Le modèle QSAR a été développé en utilisant une combinaison de méthodes de régression multilinéaire. Le modèle :

$$pIC50_{AChE} = 12.336 - 22 * S^7 - 0.0060 * volume - 785 * Gap - 0.3 * DMM + 1.853 * HOMO - 0.25 * TPSA - 2.5 * logs + 3.687 * LUMO$$

les résultats obtenus montrent que : le modèle QSAR est très robuste et possède une grande capacité prédictive. Ce modèle a un coefficient de corrélation  $R^2=94\%$ , et le DMM, volume, Gap,  $S^7$ , HOMO, LUMO, log S, TPSA vont jouer un rôle significatif dans l'activité inhibitrice de l'acétylcholinestérase.

**Mots clés :** Chimie quantique ; COSMO-RS ; modélisation ; Acétylcholinestérase ; QSAR.



## The accurate acid dissociation constant of some drugs: A quantitative structure–property relationships (QSPR) Study

Amina HENDI <sup>1</sup>✉\_Abdelkrim Guendouzi,

*Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université M. TAHAR B.P.138, Saïda 20000, Algeria.*

### Abstract

In this work, a study aimed at the theoretical prediction of pKa values of benzoic acids in aqueous solution we investigated the solute-solvent interactions of these acids and their corresponding anions. The deprotonation Gibbs free energies in aqueous solution have been computed by our last version of the polarizable continuum model (SMD), that it was used to describe the solvent. The framework set by the thermodynamic cycle have been studied for describing protonation in aqueous and gas phases. The pKa values have been calculated using the density functional theory (DFT) with B3lyp and 6-311++G(d,p) basis set. Using these methods, an excellent correlation was found between the deprotonation Gibbs free energy changes and the experimental data of 51 compounds acids in aqueous for the majority of the acids studied than other recently published results. The mean absolute deviation of the calculated pKa values is  $< 0.36$  in pKa units, for the benzoic acids considered with  $R^2= 0.93$

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



## Molecular Docking study of ARN2508 as COXs and TAAH inhibitors

*LACHI Nadia<sup>1</sup>, CHERIET Mouna<sup>2</sup>, DJEMIL Rayenne<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>*Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures (LCCN),*

<sup>2</sup>*Laboratory of Applied Chemistry (LAC),*

*University 8 Mai 1945 Guelma*

*Lachi\_n@yahoo.fr*

### **Abstract :**

Nonsteroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) represents a heterogeneous class of chemical compounds, its main action is the inhibition of cyclooxygenases (COX-1 and COX-2), 2 intracellular enzymes that oxygenate arachidonic acid (AA) to prostaglandin H<sub>2</sub> (PGH<sub>2</sub>). COX-2 also oxygenates the endocannabinoids, 2-arachidonoylglycerol (2-AG) and arachidonylethanolamide (AEA), to the corresponding PGH<sub>2</sub> analogs.

But NSAID-mediated COX inhibition is associated with gastrointestinal toxicity. One potential strategy to counter this toxicity is to also inhibit fatty acid amide hydrolase (FAAH), which hydrolyzes bioactive fatty acid ethanolamides (FAEs) into fatty acids and ethanolamine.

Here, we use molecular docking to study, theoretical elucidation of COX interaction with ARN2508, an NSAID that inhibits both COXs and FAAH with high potency, target selectivity, and decreased gastrointestinal toxicity due to its ability to increase levels of FAEs.

**Key Word:** Cyclooxygenases, FAAH, ARN2508, inhibition, molecular docking.



## Characterization theoretical study of the isomeric configuration of (Z/E)-endoxifen by *FT-IR*, NMR and UV.

Leila Largate, AND Leila Nouar

08 may 1945 Guelma University, Algeria leilalargate@gmail.com

### SUMMARY

(Z)-Endoxifen (4-hydroxy-*N*-desmethyltamoxifen), an active metabolite generated via actions of CYP3A4/5 and CYP2D6, is a more potent selective estrogen receptor modulator (SERM) than tamoxifen. In the MCF-7 human mammary tumor xenograft model with female athymic mice, (Z)-endoxifen, significantly inhibits tumor growth. (Z)-Endoxifen's potential as an alternative therapeutic agent independent of CYP2D6 activities, which can vary widely in ER+ breast cancer patients, is being actively evaluated. Furthermore, Molecular properties of isomeric configuration of (Z/E)-endoxifen are performed by a combination of spectroscopic characterization (FT-IR, <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR chemical shifts) and theoretical calculations. Vibrational wavenumbers, gauge independent atomic orbital (GIAO) <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C chemical shift values are investigated by using B3LYP functionals with the 6-31G(d) basis set in the ground state. Each vibrational frequency is assigned on the basis. The electronic transitions are calculated by time-dependent density functional theory (TDDFT). The energy band gap between the highest occupied molecular orbital (HOMO) and lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) energies are obtained by computing the frontier molecular orbitals using the B3LYP/6-31G(d) levels. The calculated HOMO and LUMO energies and NBO analysis revealed that charge transfer occurs within the molecule. Mulliken atomic charges and molecular electrostatic potential (MEP) are simulated using both functionals to find more reactive sites for electrophilic and nucleophilic attack.

**Keywords:** (Z/E)-endoxifen, CYP3A4/5 and CYP2D6, FT-IR, <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR and UV.



## QSAR and MBO study of coumarin derivatives

F. Lehraki<sup>a</sup>, A. Zekri<sup>a</sup>, A. Khelil<sup>a</sup>, F. Hirane<sup>a</sup>, N. Melkemi<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Department of matter sciences, faculty of exact and natural sciences University M. Khider of Biskra, Algeria, e-mail: lehraki\_f76@yahoo.fr

<sup>b</sup>Research team computational and pharmaceutical chemistry LMCE laboratory, University M. Khider of Biskra, Algeria, e-mail: menadjib@yahoo.fr

### Abstract

The main objective of this study was to develop a QSAR model for twenty new series of coumarin derivatives as a monoamine oxidase-B inhibitor that may be potential agents for treating Parkinson's disease. The QSAR model involves the use of MLR multiple linear regression analysis using the SPSS software. The predictive power of the obtained model was confirmed by  $R = 0.945$ ,  $R^2 = 0.893$ ,  $S = 0.451$  and  $F = 31.446$ . The LOO cross validation method shows a strong correlation was observed between experimental and predicted values of biological activities, which indicates the validity and quality of the QSAR models obtained.

The application of Lipinski rules, Veber rules and lipophilicity indices on the coumarin derivatives studied shows that most of these compounds will not have problems with oral bioavailability.

**Keywords:** Coumarin, QSAR, MLR, MAO inhibitor, Lipophilicity indices.

## La méthylation de l'ADN : Approche théorique

<sup>1</sup>Ismahan Lafifi , Salih Menasria et Leila Nouar

<sup>1</sup>Laboratoire de chimie computationnelle et nanostructures

lafifiismahane@gmail.com

### Résumé :

La méthylation de l'ADN est une modifications épigénétiques pouvant être transmis lors des divisions cellulaires et n'impliquant pas de modification de la séquence d'ADN, cette modification catalyse par les résidus Cys-S<sup>-</sup> et glu de l'enzyme DNMT qui catalysent le Transfer de méthyle de SAM vers la position C5 de la base pyrimidine de l'ADN (cytosine) pour former 5-méthylcytosine. Une étude théorique a été appliquées pour étudier le processus de méthylation de la cytosine, quatre réactions ont été étudier : attaque nucléophile suivi par un transfert de proton pour stabiliser la charge négative sur l'anneau pyrimidine de la cytosine puis une substitution nucléophile, et en fin à une étape de  $\beta$ -élimination .



**Figure1** : mécanisme de méthylation de l'ADN

L'étude de la réactivité chimique de la réaction de méthylation de l'ADN a été effectuée par la localisation des états de transition par QST3 suivie par un calcul IRC pour la vérification de chemin réactionnel de différentes étapes de méthylation, les propriétés thermodynamiques ont été montré que la réaction est spontanée et favorable. Les énergies des orbitales frontières HOMO et LUMO ont été confirmées les résultats thermodynamiques.

**Mots clés** : méthylation de ADN, mécanisme de méthylaton, DNMT, DFT.



## Host- guest complex of an antipsychotic drug with 2-O-methyl-beta-cyclodextrin: DFT-D study, NBO and QTAIM analysis

Karima MANSOURI<sup>1,2\*</sup>, Lynda SERIDI<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique de Guelma (LPG), Université 8 Mai 1945, Guelma, BP 401, Guelma 24000, Algérie

<sup>2</sup>Département de Génie des Procédés, Université 8 Mai 1945, Guelma, BP 401, Guelma 24000, Algérie. \*mansouri.karima@univ-guelma.dz

### Abstract

Our interest in this study is to understand the behavior of the complexation of 2-O-methyl-beta-cyclodextrin (Me- $\beta$ -CD), also known as CRYSMEB, and the atypical antipsychotic drug of the new generation: 2-methyl-4-(4-methylpiperazin-1-yl)-10H-thieno[2,3-b][1,5]benzodiazepine (OLP). The objective of this complexation is to change the physicochemical properties of the drug and to improve its rate of dissolution, since it has a low solubility in an aqueous medium. As a result, we are getting new vectorization systems with higher solubility and higher bioavailability. The formation of OLP@CRYSMEB host-guest inclusion complex was studied by DFT and dispersion-corrected DFT-D calculations with the B3LYP hybrid functional for 1:1 stoichiometry. The later has the Grimme's D2 and D3 dispersion terms included and is essential for the accurate treatment of non covalent interactions and determination of correct binding energies. The obtained results from all methods clearly indicate that the formed complexes are energetically favored, and the optimum 3D structure of OLP@CRYSMEB is deduced. The energetic values of different orientations are compared for all methods and the effect of the dispersion correction is highlighted. Moreover, we determined Frontier Molecular Orbitals (FMO) from which we inferred global reactivity descriptors. We identified also the interaction sites, the nature and the strength of intermolecular interactions using Natural Bond Orbital (NBO) and Quantum Theory of Atom In Molecule (QTAIM) analysis. The two approaches led to similar results as far as forces stabilizing structures are concerned.

**KEYWORDS:** OLANZAPINE, CRYSMEB, DFT, DFT-D, NBO, QTAIM.



## Etude quantique de la géométrie et la spectroscopie du 3,5-dibromo-4-méthylpyridine

Meriem Medjani<sup>a</sup>, Ouarda Brihi<sup>a</sup>, Ali boudjada<sup>a</sup> and Jean Meinne<sup>b</sup>

E-mail: medjanimeriem@yahoo.fr

<sup>a</sup> Laboratoire de Cristallographie, Université des frères Mentouri Constantine, Algérie.

<sup>b</sup> GMCM, Université de Rennes 1, CNRS (UM R 6626). Campus de Beaulieu, Bât. 11 A, Rennes Cedex 35042, France.

**Résumé :** Dans le cadre de ce travail nous présentons les résultats des calculs pour la détermination de la conformation moléculaire du 3,5-dibromo-4-méthylpyridine obtenus à partir des calculs théoriques basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT. Ce résultat de calcul, pour déterminer la conformation moléculaire de la molécule isolée à 0K du 3,5-dibromo-4-méthylpyridine est obtenu en s'aidant de la chaîne de programmes GAUSSIAN09 en utilisant deux fonctionnelles d'échange-corrélation B3LYP et MPW1PW91 et des bases suffisamment étendues adaptées aux produits organiques pour faire l'optimisation complète de la géométrie très précises.

Les modes internes moléculaires sont calculés en utilisant comme dans l'optimisation des fonctionnelles MPW1PW91 et B3LYP et le jeu de base LanL2DZ. Nous terminons ce travail par la comparaison des résultats de calcul théorique des modes de vibrations obtenus à partir de ces deux fonctionnelles avec les fréquences expérimentales de la spectroscopie infra – rouge.

**Mots clés :** DFT, Conformation, spectroscopie.



## Étude théorique de complexe de transfert de charge N, N'-bis-L-phénylalaninate de méthyle sulfone-DDQ

Messaouda Mohamdi<sup>1</sup>, *Nadjia Bensouilah*<sup>1,2</sup>, Nadia Trad<sup>1</sup> et Mohamed Abdaoui<sup>1</sup>

*(1) Laboratoire de Chimie Appliquée, groupe synthèse et développement de composés d'intérêt biologique - Université 08 Mai 1945, BP 401, Guelma*

*(2) laboratory of applied organic chemistry, faculty of chemistry (LAOC), University of Sciences and Technology Houari Boumediene, USTHB, BP 32, El-Alia, 16111 Bab-Ezzouar, Algiers*

*E-mail: mohamedinadjet@yahoo.fr et bensouilah2002@yahoo.fr*

### **Résumé :**

*Dans ce travail, nous avons étudié le procédé de complexe de transfert de charge de N, N'-bis- L-phénylalaninate de méthyle sulfone-DDQ à l'aide des méthodes DFT/CAM-B3LYP et TD-DFT, nous a permis d'étudier en détail les propriétés structurales, électroniques et spectroscopiques de donneur, d'accepteur et de leur complexe. D'autre part, nous avons étudié l'analyse de la population naturelle (NPA) et nous avons calculé également les énergies de stabilisation ( $E^2$ ) des interactions donneur-accepteur en utilisant l'analyse des orbitales naturelles de liaison (NBO) confirmant ainsi la formation de leur complexe.*

**Mots clés:** Sulfonamides, DDQ, CTC.



---

## DFT investigation of magnetic and structural properties of transition metal mono carbides, nitrides

R.Moussouni<sup>1</sup>, F.Benissad<sup>2</sup>, A.Houari<sup>3</sup>

1, 2, 3- Laboratory of theoretical physics, University of Bejaia, Algeria

*R.moussouni15@outlook.com*

### Abstract

The insertion of light elements such as hydrogen, boron, carbon, nitrogen ... etc in transition metals is of fundamental and applied dual interest due to possible structural changes and magnetic interactions.

Considering the nitrides and carbides of light and heavy transition metals (Pt, Co, Fe, Mn) as different study families, systematic research on magnetic properties will be carried out. Particular interest will be given to the relationship and competition between spin polarization and crystalline structure, in other words the transitions between magnetic order and crystalline structure. This will be done following an ab initio approach within the theory of functional density (DFT) using Projector Augmented Wave (PAW) method with the generalized gradient approximation (GGA).

## Etude de la stabilité du complexe de la Curcumine-Béta-Cyclodextrine

Mezari Yasmine<sup>(1)</sup>, Zaboub Amal<sup>(1)</sup>, Merdes Mohamed Mokhtar<sup>(3)</sup>, Ksouri Rabah<sup>(1)</sup>, Nouar Leila<sup>(2)</sup>, Madi Fatiha<sup>(2)</sup>, Merdes Rachid<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> *laboratoire de Chimie Appliqué (LCA) Groupe synthèse et développement de composés d'intérêt biologique*

*Université 8 mai 45 de Guelma, 24000, Guelma, Algérie*

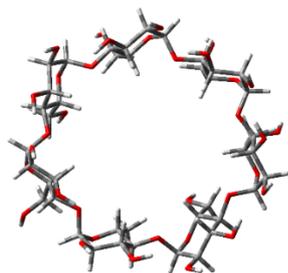
*E-mail :mezari.yasmine@hotmail.com*

<sup>(2)</sup> *Laboratoire de Chimie computationnelle et Nanostructures, Département Sciences de la Matière, Faculté des Mathématiques, de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 8 mai 45 de Guelma, 24000, Guelma, Algérie*

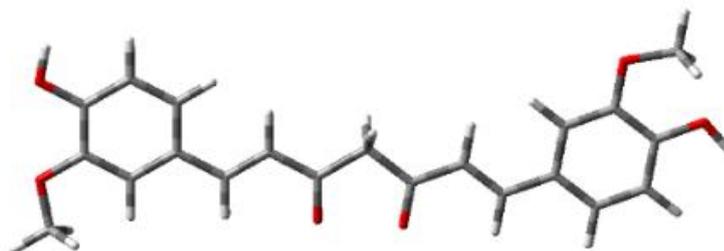
<sup>(3)</sup> *Département Pharmacie, Faculté de Médecine Annaba, Algérie*

### Résumé

Nous avons étudié le procédé d'inclusion de la curcumine (CUR) dans la  $\beta$ -cyclodextrine ( $\beta$ -CD) théoriquement dans le vide en utilisant les différentes méthodes de la modélisation moléculaire telle que : PM3 et DFT (B3LYP/6-31G<sup>+</sup> (d,p)). Dans cette étude nous avons tenu compte seulement de la stœchiométrie (1:1). Le procédé d'inclusion a été réalisé le long de l'axe Z pour un intervalle allant de [-8, 8] Å avec un pas de 1 Å. Les structures générées à chaque position sont optimisées par la méthode semi-empirique PM3, les résultats obtenus nous a permis de déterminer le minimum global qui correspond à l'état la plus stable (-6 Å). Nous avons trouvé que les statistiques thermodynamiques obtenu par la méthode DFT au minimum global trouvé à P=1 atm et T=298.15 K ont montré que le complexe CUR/ $\beta$ -CD est enthalpiquement favorable (exothermique) justifié par les valeurs négatives de  $\Delta H$  et  $\Delta G$ .



(a)



(b)

**Figure : Structures optimisées de la  $\beta$ -cyclodextrine et de la curcumine à B3LYP/6-31G.**

**Mots clés :** Inclusion,  $\beta$ -cyclodextrine, Curcumine, PM3, DFT



## Curcumin and its Biological Application

Mezari Yasmine<sup>(1)</sup>, Ksouri Rabah<sup>(1)</sup>, Zaboub Amal<sup>(1)</sup>, Merdes Mohamed Mokhtar<sup>(3)</sup>, Nouar Leila<sup>(2)</sup>, Madi Fatiha<sup>(2)</sup>, Merdes Rachid<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> *laboratoire de Chimie Appliqué (LCA) Groupe synthèse et développement de composés D'intérêt biologique*

*université 8 mai 45 de Guelma, 24000, Guelma, Algérie*

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

<sup>(4)</sup> *Laboratoire de Chimie computationnelle et Nanostructures, Département Sciences de la Matière, Faculté des Mathématiques, de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 8 mai 45 de Guelma, 24000, Guelma, Algérie*

<sup>(5)</sup> *Département Pharmacie, Faculté de Médecine Annaba, Algérie*

### Résumé

The dietary pigment curcumin is a natural polyphenol extracted from the *Curcuma longa* rhizomes native to South Asia. Curcumin has recently attracted much attention due to the wide range of its physiological actions such as anti-tumor, anti-inflammatory, anti-thrombotic, anti-diabetic and anti-microbial effects. This phytochemical can be used as a sensing material for the detection of chemicals due to its optical properties as a fluorescent polyphenol. Piperine, an alkaloid present in black pepper, seems to enhance the bioavailability and activity of curcumin. his study evaluated the biocompatibility of curcumin and piperine in cultures of periodontal ligament. to enhance curcumin (CUR) aqueous solubility is to use  $\beta$ -cyclodextrin ( $\beta$ -CD) to form inclusion complexes where CUR is encapsulated as a guest molecule within the internal cavity of the water-soluble ( $\beta$ -CD).

**Mots Clés :** Curcumin,  $\beta$ -cyclodextrin et Piperine.



## Computational investigations on geometric structures of Rhenium(i) complex of new bis-coumarins-1, 2, 3-triazole based ligands

Ourdjini Zeyneb, Achour Seridi \*, Mekki Kadri

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

**E-mail :** [seridi\\_a@yahoo.fr](mailto:seridi_a@yahoo.fr), [seridi.achour@univ-guelma.dz](mailto:seridi.achour@univ-guelma.dz)

### Abstract

Organometallic complexes possess great potential for imaging applications in biology, due to their kinetic stability and often favorable intrinsic properties. Rhenium complexes, in particular, are rapidly gaining interest as potential anticancer agents because of their high stability, structural diversity, and rich spectroscopic properties. Among the potential rhenium anticancer agents, compounds containing the stable rhenium(I) tricarbonyl core have been extensively explored for both imaging and therapeutic applications. In this study, we carried out calculations based on the DFT methods for studying the structural, electronic and spectroscopic properties (UV-visible, IR, NMR), its reactivity by interpreting molecular orbital energies HOMO and LUMO, atomic charges and electrostatic potential maps of the Re(I) complexed with new bis-coumarins-1,2,3-triazole based ligands. All theoretical calculations were performed using Gaussian 09 package and Gauss view molecular visualization programs. The geometry of the Re(I) complex was optimized in gas and liquid phase, using density functional theory (RB3LYP method). The harmonic vibrational frequencies were also calculated at the same level to characterize the nature of the stationary points as true minima with no imaginary frequencies. The spin-allowed singlet-singlet electronic transition of Re(I) complex has been calculated with time-dependent DFT (TD-DFT), and the UV-vis spectra are discussed based on the theoretical calculations.

**Keywords:** Organometallic complexes, Rhenium complexes, DFT, HOMO-LUMO.



## **Étude par les méthodes quantiques des complexes d'inclusions Taxifoline avec les cyclodextrines naturels**

*Mohamed RAHIM <sup>\*a</sup>, Abdelaziz BOUHADIBA<sup>a</sup>, Fares DJEBIHA <sup>a</sup> et Leila NOUAR*

*\*Département de Péetrochimie et Génie des Procédés, University 20 Aout 1955  
- Skikda, Algeria.*

*<sup>a</sup>Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructure, Université 08 Mai  
1945 - Guelma, Algérie.*

**Résumé:** Les cyclodextrines sont des macromolécules qui constituent une famille d'oligosaccharides cycliques. Elles sont actuellement au centre de recherches scientifiques récentes car elles conviennent à de multiples applications en agroalimentaire, en écologie, en cosmétologie et notamment en industrie pharmaceutique. L'objectif de cette investigation est d'étudier la stabilité des complexes d'inclusions TXT/ $\beta$ -CD, TXT/ $\alpha$ -CD et TXT/ $\gamma$ -CD en utilisant les méthodes PM7, PM6-D3H4 et PM6-DH2 pour déterminer leurs structures géométriques optimales.

**Mots clés:** Cyclodextrines naturels, TXT, PM7, PM6-D3H4 et PM6-DH2.



## Etude du mécanisme réactionnel de l'oxydation de l'acide linoléique par les méthodes de docking moléculaire

*RAHMOUNI Halima<sup>a</sup>, NIGRI Soraya<sup>b</sup>, DJEMIL Rayenne<sup>c</sup>, LACHI Nadia<sup>c</sup> et  
CHERIET Mouna<sup>a</sup>*

*Département des sciences de la matière*

*<sup>a</sup>Laboratoire de Chimie Appliquée (LCA)*

*<sup>b</sup>Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux (LAIGM),*

*<sup>c</sup>Laboratoire de Chimie Computationnelle et des Nanomatériaux (LCCN),*

*Université 8 Mai 1945 Guelma*

*Rahmounihalima45@gmail.com*

### Résumé :

L'objectif de ce travail est d'étudier le mécanisme réactionnel de l'oxydation de l'acide linoléique par les méthodes de Docking moléculaire. Cette réaction est catalysée par la lipoxygénase (**LOX**). Le processus du Docking comprend deux étapes essentielles, la première est l'arrimage de la protéine avec son ligand naturel. La seconde correspond à l'oxydation de l'acide linoléique par Docking. Les résultats obtenus ont montré la formation d'un complexe LOX-ligand stabilisé par des liaisons hydrogènes, des interactions hydrophobiques et électrostatiques.

**Mots-clés :** Docking moléculaire, Acide linoléique, Lipoxygénase, Oxydation.



## Chiral separation and molecular modeling of some antibiotics pharmaceutical formulation on different polysaccharides chiral stationary phases

Mohammed Nadjib Rebizi<sup>1\*</sup>, Khaled Sekkoum<sup>1</sup>, Nasser Belboukhari<sup>1</sup> and Hassan Y. Aboul-Enein<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Bioactive Molecules & Chiral Separation Laboratory, University of Bechar, Algeria*

<sup>2</sup> *Pharmaceutical and Medicinal Chemistry Department, Pharmaceutical and Drug Industries Research Division, National Research Center, Dokki, Cairo, Egypt*

\*rebizi-nadjib@hotmail.fr

### Abstract

Today in our pharmacies are a lot of developed drugs possess chiral centers, chirality has become increasingly important topic issue in drug research and has attracted increasing consideration in the pharmaceutical industry. Only one of isomers is currently under development as an antibiotic agent and consequently, the other isomers are considered as unwanted chiral impurities. The different drug enantiomers show different behaviors in pharmacological activities, pharmacokinetic processes and toxicity. The investigation of enantioselectivity in an active pharmaceutical ingredient (API) with chiral centers represents a great challenge for clinical pharmacology, because detecting isomers in an active pharmaceutical ingredient (API), poses a particularly difficult problem for the chiral separation. Isomers have chemical and physical characteristics (hydrophobicity) similar to those of the API, which makes their determination difficult from both a separation and a detection perspective. The main objective of this work is to applied a simple direct isocratic high-performance liquid-chromatographic methods for chiral separation and determining the enantiomeric purity of some antibacterials drugs using commercialized polysaccharides stationary phases (Chiralcel® OZ-3, Chiralcel® OD-H, Chiralcel® OD, Chiralcel® OJ, Chiralpak® AD, Chiralpak® IA and Chiralpak® IB). The result data illustrates the ability of the cellulose and amylose derivatives to yield good resolution. Therefore, this process has advantages over with ease of use. It is more simple and fast procedure for sample pre-treatment, easy preparation of the mobile phase, use of a low flow rate in the chromatographic system, and, consequently, decreased use of organic solvent in the mobile phase. The sample preparation step is critical for success and sensitivity of separation. This process exhibited an excellent performance in terms of sensitivity, speed and resolution. It is an important analytical process for separation and determination of inactive enantiomers present in enantiomerically pure drugs and finished products. To gain better understanding of the chiral recognition mechanism, detailed computational simulation of stationary phase interacting with enantiomers were carried out using the molecular modeling. The molecular modeling studied provided information about the binding energies and the conformations of chiral stationary phase-solute complexes. The chirality of an analyte molecule determines the number and strength of the intermolecular interaction which led to the differences were in agreement with the observed enantioselectivity in HPLC experiments.

**Keywords:** Antibiotic, HPLC, Cellulose-amylose CSPs, Molecular Modeling, Immobilized-coated CSPs, Chiral separation on CSPs, enantioseparation.



## Étude spectrales par modélisation moléculaire d'un nouveau ligand organique de type base de schiff

REGHIOUA Abdallah ,BARKAT Djamel ,GOUBBI Faten, MESSAOUDI Moufida

*laboratoire de chimie de l'université d'eloued  
faculté des Technologie Université d'eloued*

[reghioua-abdallah@univ-eloued.dz](mailto:reghioua-abdallah@univ-eloued.dz)

### Résumé :

Pendant ces dernières années, les ligands poly nitrile à base de schiff ont suscité un intérêt croissant dans plusieurs domaines de la chimie et biologie tel que la conception des matériaux moléculaires magnétiques, antioxydant et antibactérienne.

Dans ce travail, nous avons préparé d'un nouveau ligands organique de type base de schiff par réaction de condensation entre compose carbonyle et amine primaire et nous adoptons sur la comparaison de caractérisation spectral théorique ( modélisation moléculaire en utilisant logiciel gaussien 09 ) et caractérisation spectral pratique, Les résultats des deux méthodes étaient fortement corrélés.

**MOTS CLÉS :** base de Schiff , ligands organique. modélisation moléculaire, compose carbonyle



## Molecular modeling study the charge transfer interactions of an analgesic with $\pi$ acceptors

SOLTANI Sara<sup>1</sup>, KADRI Mekki<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup> Laboratoire de Chimie Physique, Université 08 Mai 1945, Guelma, Algérie.

<sup>1</sup> [soltani.chimie@yahoo.com](mailto:soltani.chimie@yahoo.com)

<sup>2</sup> [mekkadri@gmail.com](mailto:mekkadri@gmail.com)

### Abstract

The purpose of the present study is to investigate by molecular modeling the intermolecular charge-transfer complexes (CT) between an analgesic (ANC) as a donor and picric acid (PA), and 2,3-Dichloro-5,6-dicyano-1,4-benzoquinone (DDQ) as a  $\pi$ -acceptor. The geometry optimization, the thermodynamic parameters, have been calculated in chloroform as solvent at the B3LYP/6-311+G (d,p) by using the integral equation formalism polarizable continuum model (IEFPCM). The vibrational frequencies were calculated by DFT method and compared with the experimental frequencies, which yield good agreement with the corresponding experimental data and results in the literature. Ultraviolet-visible spectrums of the title complexes were recorded and have been calculated using TD-DFT method. A study on the electronic properties, such as excitation energies, HOMO and LUMO energies, are performed by time-dependent DFT (TD-DFT) approach. In addition, Milliken atomic charges, possible charge transfer, natural bond orbital (NBO) and AIM topological analysis were performed.

**Mots clés:** *drug-acceptor interaction,  $\pi$ -acceptor, DFT, TD-DFT, NBO, AIM.*



## Contribution théorique des bastadines : molécules d'intérêt biologique

Nabila Taib<sup>1</sup>; Nouredine Tchouar<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> Laboratoire de Modélisation et d'Optimisation des Systèmes Industriels LAMOSI: Université des Sciences et de la Technologie Mohamed Boudiaf, Oran, Algérie, [nabila21bio@yahoo.fr](mailto:nabila21bio@yahoo.fr), <sup>2</sup> Laboratoire de Modélisation et d'Optimisation des Systèmes Industriels LAMOSI: Université des Sciences et de la Technologie Mohamed Boudiaf, Oran, Algérie.

**Résumé :** L'angiogenèse est un mécanisme de néovascularisation prenant naissance à partir d'un réseau capillaire préexistant. Elle est particulièrement indispensable au cours de nombreux processus physiologiques mais aussi pathologiques, en particulier pour la croissance des tumeurs et le développement des métastases. L'angiogenèse n'est pas contrôlée par un seul facteur, mais par une balance d'inducteurs et d'inhibiteurs produits par les cellules normales ou tumorales, l'utilisation de puissants facteurs anti-angiogéniques dans des modèles expérimentaux de tumeurs solides a confirmé l'efficacité de la thérapie anti-angiogénique sur la croissance et la dissémination tumorale. Le milieu naturel a toujours été une source très importante de molécules à activité anti-angiogénique, beaucoup de produits naturels et d'analogues synthétiques ont été développés avec succès pour le traitement du cancer, dans ce travail nous nous intéressons à l'étude théorique des bastadines: molécules d'origine naturel produites par des éponges marines et qui possèdent des propriétés anti-angiogéniques. L'objectif du présent travail est de modéliser la molécule bastadine 6 et quelques-uns de ses analogues synthétiques et d'établir entre autre une corrélation entre les propriétés énergétiques et les propriétés anti-angiogéniques de ces produits. Les calculs ont été effectués en utilisant le logiciel de modélisation et de simulation moléculaire : gaussian 09 et les résultats montrent que :

- La molécule bastadine 6 est la molécule la plus stable par rapport à ses analogues synthétiques.
- Le produit naturel reste le meilleur produit thérapeutique.
- L'activité anticancéreuse de ces molécules augmente avec la stabilité et la différence énergétique HOMO-LUMO.
- L'activité biologique de la molécule bastadine 6 dépend de ses deux fonctions oxime localisant dans la partie droite de la molécule.

L'informatique comme outil de recherche est en pleine expansion et le sujet de recherche présenté ici ne montrent qu'une infime partie de développement actuel de l'informatique au sein des sciences.



## Relation structures propriétés quantitatives pour les composés organiques

TOUAM Said<sup>a</sup>, BOUCHAMA Fateh<sup>b</sup>

*a. Laboratoire des Sciences Analytiques Matériaux et Environnement, faculté des Sciences Exactes et Sciences de la Nature et de la Vie, université Larbi Ben M'hidi, Oum El Bouaghi.*

*b. Laboratoire de Synthèse et Biocatalyse Organique, département de chimie, faculté des sciences, université BADJI Mokhtar, Annaba.*

### Résumé :

Une relation quantitative structure-propriété (QSPR) a été réalisée pour la prédiction de l'indice de rétention de différents composés chimiques.

En utilisant des descripteurs moléculaires théoriques calculés à l'aide du logiciel DRAGON. Un ensemble de 10 autres composés organiques, séparées dans les mêmes conditions, a servi d'ensemble de test.

La taille du modèle a été déterminée en optimisant le FIT de Kubinyi, et la sélection des descripteurs réalisée par algorithme génétique.

La qualité de l'ajustement a été évaluée en calculant le coefficient de détermination multiple ( $R^2$ ) et la racine de l'erreur quadratique moyenne de prédiction. La stabilité du modèle a été explorée en utilisant la validation croisée par "leave-one-out".

La fiabilité du modèle proposé a été en outre illustrée en utilisant diverses techniques d'évaluation: validation croisée par leave- one- out, bootstrap, tests de randomisation, et la validation par l'ensemble de test.

**Mots clés:** Descripteurs moléculaires, prévision, modèle statistique, indices de rétention, QSPR, régression linéaire multiple



## Study of the effect of sulfur on the conformational and electronic properties of 1,4-diformylpiperazine

F. Yahia Cherif<sup>a</sup>, A. Rahmouni<sup>a</sup> and O. Bensaid<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de modélisation et de méthode de calcul, Université Dr Tahar Maoulay de Saida, B.P. 138, Cité En-Nasr 20002 Saida, Algérie.*

*E-mail : yc\_fatima@yahoo.fr*

<sup>b</sup> *Laboratoire de substances naturelles et bioactives, Université de Tlemcen 22, Rue Abi Ayad Abdelkrim, Fg Pasteur B.P 119 Tlemcen 13000, Algérie.*

### Abstract

The molecular properties known to play an essential role in drug-receptor interaction of substructures models of bioactive molecules have been studied using chemical quantum calculations. 1,4-Diformyl-piperazine and 1,4-dithionyl-piperazine have been used as models to probe conformational behaviors and some electronic properties of substructure of some tri-substituted piperazine showing dual anti-PAF and anti-HIV-1 activities. The derivatives containing sulfur atoms present different bioactivities compared to those containing oxygen atoms. On the basis of the results, substitution of an oxygen atom by a sulfur atom induces changes in some activation energies when the conformers have similar structures. This substitution causes also changes in the molecular shape, electronic potentials, partial charges distribution, HOMO and LUMO energies.

**Keywords:** Conformational analysis, 1,4-Diformyl-piperazine, 1,4-Dithionyl-piperazine, Rotational barrier, Nitrogen inversion barrier, HOMO-LUMO gap



## Etude quantique du complexe de transfert de charge entre 2-(2-méthyl-5-nitroimidazol-1-yl) éthanol et DDQ: analyses NBO et QTAIM

Khawla YAHIAOU<sup>a,b,\*</sup>, Lynda SERIDI<sup>a,b</sup>.

<sup>a</sup> *Laboratoire de Physique de Guelma (LPG), Université 8 Mai 1945, Guelma, Algérie*

<sup>b</sup> *Département de Génie des Procédés, Université 8 Mai 1945, Guelma, Algérie.*

\* *email du communicant : yahiaoui.khawla@univ-guelma.dz*

### Résumé:

S'inspirant d'une étude expérimentale traitant la complexation de l'antibiotique 2-(2-méthyl-5-nitroimidazol-1-yl)éthanol (MNZ) en tant que donneur avec quelques accepteurs, on s'est fixé comme objectif dans nos investigations théoriques, d'explorer le processus de formation du CTC entre ce médicament et l'accepteur  $\pi$ : 2,3-dichloro-5,6-dicyano-*p*-benzoquinone (DDQ), de stoechiométrie 1:1. Ainsi, se basant sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et en utilisant les fonctionnelles hybrides B3LYP/6-311+G(d,p) et CAM-B3LYP/6-311+G(d,p), nous visons à comprendre et clarifier l'interaction médicament-accepteur dans différents milieux. Donc, suite aux multiples rapprochements que nous avons réalisés, nous avons déterminé la géométrie structurale du conformère le plus stable dans le vide, ainsi dans le chloroforme et le méthanol selon le modèle IEFPCM (Integral Equation formalism Polarized Continuum Model). Nous avons ensuite procédé à l'étude des propriétés électroniques (orbitales frontières HOMO, LUMO et descripteurs de réactivité globale) du complexe MNZ  $\rightarrow$  DDQ. L'origine des spectres électroniques a été déduite en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TD-DFT). En outre, les sites électrophiles et nucléophiles les plus réactifs de DDQ et de MNZ ont été prédits en utilisant la carte du potentiel électrostatique moléculaire (MESP) et le mécanisme de transfert de charge a été élucidé. Enfin l'analyse NBO (Natural Bond Orbital) a été réalisée pour détailler le type et quantifier les interactions intermoléculaires entre donneur et accepteur dans chacun des milieux. L'analyse des descripteurs topologiques aux différents BCP (Bond Critical Point) selon la Théorie Quantique des Atomes dans la Molécule (QTAIM) a permis d'explorer minutieusement la nature et la force des liaisons hydrogène stabilisantes dans chacun des milieux.

**Mots clés:** MNZ, DDQ, CTC, DFT, TD-DFT, QTAIM, NBO.



## Etude computationnelle spectroscopique d'un triazacyclohexane

A.Zaboub Yahiaoui<sup>a</sup>, M. Hadjam<sup>b</sup>, F. Madi<sup>c</sup>, R. Merdes<sup>a</sup>, R. Ksouric<sup>c</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de chimie Appliquée. Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière Université 08 Mai 45. Guelma 24000.*

<sup>b</sup> *Laboratoire de Chimie Appliquée et Technologie des Matériaux (LCATM), Université Larbi BEN MHIDI, 04000-Oum El Bouaghi.*

<sup>c</sup> *Laboratoire de chimie computationnelle et nanostructures. Université 08 Mai 1945. BP 401. Guelma.*

Email: [zaboub.amal@gmail.com](mailto:zaboub.amal@gmail.com)

### Résumé :

Nous présentons dans ce travail une étude théorique des propriétés spectroscopiques des nouveaux triazacyclohexanes synthétisés par des réactions de condensation simple et mixte des amines primaires aromatiques ou aliphatiques avec la formaline. Les calculs théoriques ont été réalisés par la méthode DFT en utilisant les niveaux de calcul (B3LYP: 6-31+G(d,p), B3LYP: 6-311+G(d,p) et B3LYP: 6-31++G(d,p)) et la méthode TD-DFT (B3LYP: 6-31+G(d,p)). L'optimisation des structures nous a permis d'avoir les paramètres géométriques, et les spectres IR et RMN ont été générés.

Après comparaison entre les résultats obtenus, on a trouvé que les résultats théoriques sont très proches à ceux obtenus expérimentalement.

**Mots clés :** Hexahydrotriazines, , spectroscopie, B3LYP, 6-31+G(d,p), TD-DFT.



1<sup>er</sup> Séminaire sur la Chimie Appliquée &  
la Modélisation Moléculaire  
Guelma, 26 septembre 2019



Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructures  
&  
Laboratoire de Chimie Appliquée

*1<sup>er</sup> Séminaire National sur la chimie appliquée et la modélisation  
Moléculaire  
A Guelma, le 26 Septembre 2019*

## Programme

*Lieu : Salle des conférences, Bibliothèque Centrale, Ancien  
Campus*

- *07h : 30mn – 09h : 00: Inscriptions*
- *09h : 00mn – 09h : 30 mn: Ouverture officielle*
- *09h : 30mn – 10h : 15 mn : **Conférence plénière** /Pr. Abdelkrim Guendouzi de l'Université de Saïda « : **IPP : Inclusion Phenomena Program** »*
- *10h : 15mn – 11h : 00 mn: Session Orale /Modélisation Moléculaire /  
Salle de conférences*
- *10h : 15mn – 11h : 00mn: Session Orale /Chimie Appliquée /  
Salle Visioconférence*
- *11h : 00 mn - 11h : 30 mn : Session Poster (1) + Pause-café*
- *11h : 30 mn – 12h : 15 mn: Session Orale/Modélisation Moléculaire /  
Salle de conférences*
- *11h : 30 mn – 12h : 15 mn: Session Orale/Chimie Appliquée /  
Salle Visioconférence*
- *12h : 15 mn – 12h : 45 mn: Session Poster (2)*
- *12h : 45 mn : Déjeuner & Clôture*