



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



## Programme

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

*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 : 45mn : Déjeuner & Clôture**

### Atelier A : Chimie Appliquée - Salle Visio- conférences

<b>Session Orale</b>		
<b>Président : Pr. Merdes Rachid</b>		
10h : 15mn	E. Kolli	3-hydroxy-5,6-epoxy-ionone et dehydrovomifoliol, deux monoterpènes isolés de l'espèce centaurea omphalotricha
10h : 30mn	A. Kedjadja	Réaction one-pot : synthèse de nouvelles molécules à visée thérapeutique du type 6-amino-2-pyridones quinoléique
10h : 45mn	M. Nessaib	Design, synthesis and antibacterial activity against MDR GRAM – negative bacteria of N-[(Phenyl) Sulfonyl] Perhydro-1,3-Oxazin-2-One
<b>Président : Pr. Oumeddour Rabah</b>		
11h : 30mn	I.Saifi	Etude expérimentale et modélisation théorique des inhibiteurs de corrosion
11h : 45mn	T.Yousfi	Synthèse des nouveaux composés hétérocycliques "pyrazolidine et isoxazolidine" et leurs activités antimicrobiennes
12h : 00mn	R.S. Zakaria	Photodegradation of 2-MBT using NCP as heterogeneous photocatalyst (characterization, kinetics and mechanism study)
<b>Session Poster (1) / 11h : 00 mn - 11h : 30 mn</b>		
<b>P1</b>	K.Abdellaoui	Caractérisations (XPS-RRX-FTIR-ATD) de la baryte naturel région de wilaya de Khenchela -Algérie
<b>P2</b>	R. Aribi	Etude de l'adsorption d'une molécule thérapeutique à l'interface d'une pseudo-membrane moléculaire à base de tensioactif non- ionique (Triton –RX100)
<b>P3</b>	H.Beddiar	Comparative study of "juniperus phoenicea" essential oils antibacterial activity
<b>P4</b>	M.Benmabrouk	Etude de l'activité anti-oxydante du Rhizome d'épice
<b>P5</b>	Y.Berredjem	Réutilisation des nanomatériaux pour la fabrication des cellules solaires organiques
<b>P6</b>	C. Bezazi	Optimisation de la production de biodiesel à partir des huiles alimentaire usagées
<b>P7</b>	F. Bouchareb	Synthèse et étude structurale de nouveaux diazaphospholidine par cyclisation intermoléculaire
<b>P8</b>	H.Boudjehem	Optimisation des paramètres de déposition des couches minces Ni-Mo obtenues par électrodéposition en utilisant la méthode de Taguchi
<b>P9</b>	M.Boulahbal	Removal of a cationic dye from aqueous solution by local natural clay
<b>P10</b>	H.Bouzit	Synthèse et réactivité d'une série de sulfonamides couples à l'acide lipoïque
<b>P11</b>	W.Cheddadi	la détermination du taux de migration globale : cas d'emballages destinés au conditionnement d'eau minérale le polyéthylène téréphtalate (emballage dans l'industrie alimentaire)
<b>P12</b>	L.Chekatti	Activité antioxydante de l'huile d'olive
<b>P13</b>	S.Charif	Photodégradation d'un colorant textile
<b>P14</b>	N.Cheghib	Synthèse et caractérisation des N-(N-BOC, N-(2-Chloroéthyl)-Sulfamoyl)-Aminoester de <i>Tertbutyle</i>
<b>P15</b>	T.Derabla	Etude de l'influence des paramètres d'électrolyses sur la qualité des dépôts de chrome
<b>P16</b>	M.Derdare	Characterization and reactivity of Ni-Ag/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> nanoparticles prepared by chemical method
<b>Session Poster (2) /12h : 15mn - 12h : 45mn</b>		
<b>P1</b>	I. Djaghout	Electrodeposition and properties of nickel composite coatings Ni-SiO <sub>2</sub>

<b>P2</b>	H. Fisli	Etude physicochimique des complexes de l'antithyroïdien de synthèse carbimazole avec une cyclodextrine modifiée
<b>P3</b>	S. Nigri	Effet de l'emballage en plastique sur la qualité de l'huile d'olive algérienne
<b>P4</b>	M. Grabsi	Traitement d'un polluant organique en milieu aqueux par un procédé d'oxydation catalytique
<b>P5</b>	R. Ksouri	Characterizations of matrix resin TRM6 and CFRP composite by DMA and impedance spectroscopy at different cure temperature
<b>P6</b>	D.Lekmine	Caractérisation et minéralisation de la barytine gisement d'Ain Mimoun Khenchela
<b>P7</b>	A. Louadj	Simultaneous sorption of malachite green and Rhodamine b on a new granules based on surfactant-modified pillared-clay and gluten
<b>P8</b>	N. Mayouf	UPLC-DAD analysis, antioxidant capacity and the correlation with phenolic compounds, content in the root methanolic extract of asphodelus microcarpus
<b>P9</b>	S.Medjahed	Etude des propriétés électroniques, structurales et de la relation structure-activité des dérivés de thiazolidine-2,4-dione par la modélisation moléculaire
<b>P10</b>	A. Meribai	A new analytic method completed for the diacetyl assay in milk and dairy products
<b>P11</b>	M.Stiti	Etude théorique et expérimentale de la complexation de l'acide lipoïque avec le Cu(II)
<b>P12</b>	A.Talbi	Structural behavior of electrodeposited Ni-Fe thin films using fractional factorial design method
<b>P13</b>	F.Yssaad	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
<b>P14</b>	H.Zeghache	Nonlinear regression method for adsorption isotherm of organic dyes by activated carbon of vegetable origin : Comparison of error analysis criteria
<b>P15</b>	S.Zeroual	Analyse par fluorescence X de l'eau potable de la ville de Constantine après préconcentration

### **Atelier B : Modélisation moléculaire - Salle de conférences**

<b>Session Orale</b>		
<b>Présidente : Pr. Nouar Leila</b>		
10h : 15mn	M. Almi	Etude théorique du mécanisme réactionnelle de la réoxydation d'un catalyseur hexamolybdate réduit par l'oxygène moléculaire
10h : 30mn	B. Messaoudi	Negative activation energies and the addition reactant complex
10h : 45mn	S. Hadjar	Etude théorique des propriétés structurales et électroniques d'une molécule bioactive (base de schiff)
<b>Présidente : Pr. Madi Fatiha</b>		
11h : 30mn	F. Mouissa	Etude de l'efficacité inhibitrice de molécules organométalliques sur la corrosion du cuivre par technique de monte carlo
11h : 45mn	A. Mansour	Etude théorique de la complexation de la lidocaine par $\beta$ -cyclodextrine
12h : 00mn	N. EH. Bensiradj	Theoretical and experimental studies of polyphenols and flavonoids of propolis: antioxydant activity
<b>Session Poster (1) / 11h : 00 mn - 11h : 30 mn</b>		
<b>P1</b>	F. Djebiha	Encapsulation of flavonoid fisetin with $\beta$ -cyclodextrin: spectral and molecular modeling studies
<b>P2</b>	F. Allouche	Etude théorique et structurale par RX d'un nouveau compose hybride riche en liaisons hydrogène
<b>P3</b>	I. Almi	Ligand-based pharmacophore searching and molecular docking for the discovery of novel cytotoxic agents targeting human glutathione-s-transferases
<b>P4</b>	K.Amirat	Prédiction de l'activité antitopoisomérase d'une famille des benzo[C] phenanthridines (BZPS) in silico
<b>P5</b>	S.Amirat	Simulation of docking trans polydatin with beta cyclodextrin and derivatives : A molecular modeling approach

<b>P6</b>	S. Amrani	Structural and vibrational properties of 4-amino-n-pyrimidin-2yl-benzene sulfonamide: A computational study
<b>P7</b>	N. Aoumeur	Qualitative and quantitative structure-tubulin inhibitors activities relationship of 1.3.4-thiadiazole derivatives
<b>P8</b>	S. Athmani	DFT investigation of charge transfer complex formation between p-phenylenediamine and 3,5-dinitrosalicylic acid
<b>P9</b>	L.Bechohra Lina	Etude Ab initio de la structure de bande électronique du nanotube de carbone spiralé monoparoi de type zigzag (n,0)
<b>P10</b>	M. Benaida	The physicochemical properties of Asgen (n=1-10) nanoclusters: A DFT study
<b>P11</b>	B. Bencheikh	Etude par docking moléculaire de l'inhibition des CYP3A4 par le jus de pamplemousse
<b>P12</b>	H.Bouchemella	Etude théorique de l'inclusion du pyrazol dans la bêta-cyclodextrine
<b>P13</b>	K.Bouchemella	Etude par DFT et TD-DFT de la structure et des propriétés optiques des nouveaux composés à base de schiff
<b>P14</b>	A.Bouhadiba	Molecular modeling study of simazine by $\beta$ -cyclodextrin
<b>P15</b>	M.Boulbazine	Stability and electronic properties of copper doped nickel nanoclusters : A DFT investigation
<b>P16</b>	W.Bououden	DFT study of nanotubes as the drug delivery vehicles of montelukast
<b>P17</b>	F.Boursas	Vibrational spectra, optical properties, NBO and HOMO–LUMO analysis of para-phenylenediammonium: DFT calculations
<b>P18</b>	I.Djellala	A DFT study of inclusion complexes between lidocaine and $\beta$ -cyclodextrin in vacuum and in water
<b>P19</b>	R.Djemil	Etude théorique de l'oxydation atmosphérique de la butadiène
<b>P20</b>	F.Yahia Cherif	Computational study of the complexation of vitamine-A in the beta-cyclodextrin
<b>P21</b>	M.Gharibi	Détermination des interactions intermoléculaires dans le complexe d'inclusion : vanilline/bêta-cyclodextrine
<b>Session Poster (2) /12h : 15 mn - 12h : 45mn</b>		
<b>P1</b>	N.EH.Hammoudi	Etude des relations quantitatives structure–activité des composés chimiques à l'aide des descripteurs moléculaires (modélisation QSAR)
<b>P2</b>	A.Hendi	The accurate acid dissociation constant of some drugs: a quantitative structure–property relationships (QSPR) study
<b>P3</b>	N. Lachi	Molecular docking study of ARN2508 as COXS and TAAH inhibitors
<b>P4</b>	L.Largate	Characterization theoretical study of the isomeric configuration of (z/e)-endoxifen by FT-IR, NMR and UV
<b>P5</b>	F.Lehraki	QSAR and MBO study of coumarin derivatives
<b>P6</b>	I. Lafifi	La méthylation de l'ADN : Approche théorique
<b>P7</b>	K.Mansouri	Host- guest complex of an antipsychotic drug with 2-o-methyl-beta-cyclodextrin: DFT-D study, NBO and QTAIM analysis
<b>P8</b>	M.Medjani	Etude quantique de la géométrie et la spectroscopie du 3,5-dibromo-4-methylpyridine
<b>P9</b>	M. Mohamdi	Etude théorique de complexe de transfert de charge N, N'-bis- L-phénylalaninate de méthyle sulfone-DDQ
<b>P10</b>	R. Moussouni	DFT investigation of magnetic and structural properties of transition metal mono carbides, nitrides
<b>P11</b>	Z. Ourdjini	Computational investigations on geometric structures of rhenium(i) complex of new bis-coumarins-1, 2, 3-triazole based ligands
<b>P12</b>	M. Rahim	Etude par les méthodes quantiques la stabilité des complexes d'inclusions taxifoline avec les cyclodextrines naturels
<b>P13</b>	H.Rahmouni	Etude du mécanisme réactionnel de l'oxydation de l'acide linoléique par les méthodes de docking moléculaire
<b>P14</b>	M.N. Rebizi	Chiral separation and molecular modeling of some antibiotics pharmaceutical formulation on different polysaccharides chiral stationary phases
<b>P15</b>	A.Reghioua	Etude spectrales par modélisation moléculaire d'un nouveau ligand organique de type base de schiff
<b>P16</b>	S.Soltani	Molecular modeling study the charge transfer interactions of an analgesic with $\pi$ acceptors
<b>P17</b>	N.Taib	Contribution théorique des bastadines : molécules d'intérêt biologique

<b>P18</b>	S.Touam	Relation structures propriétés quantitatives pour les composés organiques
<b>P19</b>	F.Yahia Chérif	Study of the effect of sulfur on the conformational and electronic properties of 1,4-diformylpiperazine
<b>P20</b>	K.Yahiaoui	Etude quantique du complexe de transfert de charge entre 2-(2-méthyl-5-nitroimidazol-1-yl) éthanol et DDQ: analyses NBO et QTAIM
<b>P21</b>	A.Zaboub	Etude computationnelle spectroscopique d'un triazacyclohexane