



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
République Algérienne Démocratique et Populaire  
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Faculté des Sciences Exactes

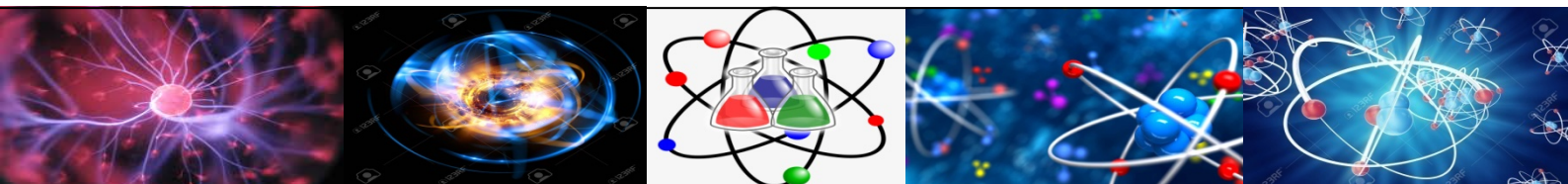
Laboratoire de Physique Théorique  
Université A.Mira - Béjaïa

Laboratoire de Physique et Chimie Quantique  
Université M.Mammeri - Tizi Ouzou

# 3ème Congrès International de Physique et de Chimie Quantique (CIPCQ 2019)

*Université de Béjaïa, du 04 au 06 Novembre 2019*

## Recueil des résumés



## Comité d'honneur

### Présidents

**Pr. AOURAG Hafid**  
Directeur Général de la DGRSDT

**Pr. SAIDANI Boualem**  
Recteur de l'Université de Bejaia

### Vice-président

**Dr. BOUKEROUI Abdelhamid**  
Doyen de la Faculté des Sciences Exactes

## Comité d'organisation

**Président : Pr MAHTOUT Sofiane (UAM Bejaia)**

M.	Ait Amokhtar Hakim	UAM Bejaia
M.	Belhadi Zahir	UAM Bejaia
M.	Benmerad Belkacem	UAM Bejaia
M.	Bouzar Hamid	UMM Tizi-Ouzou
M.	Chelouche Azeddine	UAM Bejaia
M.	Djouder Madjid	UMM Tizi-Ouzou
M.	Gharbi Abdelhakim	UAM Bejaia
M.	Hamidi Mahdi	UMM Tizi-Ouzou
Mme	Mehidi Nadia	UAM Bejaia
M.	Mezeghrane Abdelaziz	UMM Tizi-Ouzou
M.	Ouhenia Salim	UAM Bejaia
Mme	Oulebsir Nadia	UAM Bejaia
M.	Rezouali Karim	UAM Bejaia
M.	Souici Abdelhafid	UAM Bejaia
M.	Yala Hakim	UAM Bejaia
M.	Zenia Hand	UMM Tizi-Ouzou

## Comité Scientifique

<b>Pr. Aourag Hafid</b>	<b>U. Tlemcen</b>
<b>Pr. Ait Amokhtar Hakim</b>	<b>U. Bejaia</b>
<b>Pr. Baida Fadi Issam</b>	<b>U. Bourgogne Franche-Comté, France</b>
<b>Pr. Belabbas Imad</b>	<b>U. Bejaia</b>
<b>Pr. Belkhir Abderahmane</b>	<b>U. Tizi-Ouzou</b>
<b>Pr. Blügel Stefan</b>	<b>I. Peter Grünberg, Jülich, Allemagne</b>
<b>Pr. Bouarab Said</b>	<b>U. Tizi-Ouzou</b>
<b>Pr. Boucekkine Abdou</b>	<b>U. Rennes 1, France</b>
<b>Pr. Bouda Ahmed</b>	<b>U. Bejaia</b>
<b>Pr. Boudrioua Azzedine</b>	<b>U. Paris 13, France</b>
<b>Pr. Bouzar Hamid</b>	<b>U. Tizi-Ouzou</b>
<b>Pr. Chelouche Azeddine</b>	<b>U. Bejaia</b>
<b>Pr. Djouadi Abdelhak</b>	<b>U. Paris sud, France</b>
<b>Pr. Elkechai Aziz</b>	<b>U. Tizi-Ouzou</b>
<b>Pr. Gharbi Abdelhakim</b>	<b>U. Bejaia</b>
<b>Pr. Houat Salah</b>	<b>U. Jijel</b>
<b>Pr. Komninou Philomela</b>	<b>U. Aristote, Grèce</b>
<b>Pr. Lagraa Mohamed</b>	<b>U. Oran 1</b>
<b>Pr. Lamrous Omar</b>	<b>U. Tizi-Ouzou</b>
<b>Pr. Lounis Samir</b>	<b>FZ Jülich, Allemagne</b>
<b>Pr. Mahtout Sofiane</b>	<b>U. Bejaia</b>
<b>Pr. Nouicer Khireddinne</b>	<b>U. Jijel</b>
<b>Pr. Olivares Stefano</b>	<b>U. Milan, Italie</b>
<b>Pr. Paris Matteo</b>	<b>U. Milan, Italie</b>
<b>Dr. Hamidi Mahdi</b>	<b>U. Tizi-Ouzou</b>
<b>Dr. Rabilloud Franck</b>	<b>U. Lyon 1, France</b>
<b>Pr. Touam Tahar</b>	<b>U. Annaba</b>

## Présentation

Le troisième Congrès International de la Physique et la Chimie Quantique (CiPCQ 2019) est organisé par le Laboratoire de Physique Théorique de l'Université Abderrahmane Mira de Bejaia en collaboration avec le Laboratoire de Physique et Chimie Quantique de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou, fait suite aux deux éditions précédentes tenues avec succès à l'Université de TIZI OUZOU.

La présente édition s'est tenue du 4 au 6 Novembre 2019 à l'Université Abderrahmane Mira de Bejaia.

## Objectifs du Congrès

1. Offrir aux chercheurs et aux doctorants l'opportunité de diffuser les résultats de leurs travaux.
2. Promouvoir la coopération scientifique avec les différentes compétences scientifiques sur la scène nationale et internationale.
3. Faire le point sur l'état actuel de la recherche dans les différentes thématiques traitées durant le congrès.

## Thèmes

- A- Plasma et Lasers.
- B- Photonique et Phononique.
- C- Nanomatériaux : Propriétés et Applications.
- D- Chimie Quantique.
- E- Théorie de l'Information Quantique et Technologies Quantiques.
- F- Physique Mathématique et Cosmologie.

## Nos Sponsors



## Sommaire

### Conférences plénières

<b>PL 01:</b> Intelligence artificielle et la physique Hafid Aourag, Direction Générale de la Recherche Scientifique et du Développement Technologique (DGRSDT), Alger	17
<b>PL 02 :</b> Quantum sensing and metrology: the quantum Cramer-Rao bound and beyond. Matteo Paris University of Milan, Italy.	17
<b>PL 03:</b> DFT investigations of molecular one-, two-photon absorption and photochemical properties. Abdou Boucekkine Université Rennes 1, France.	17
<b>PL 04:</b> Squeezing (and) phase diffusion: recent theoretical and experimental results Stefano Olivares University of Milan, Italy.	18
<b>PL 05:</b> Le formalisme hamiltonien de la gravitation d'Einstein - Cartan. Mohamed Lagraa Université d'Oran 1, Algérie.	18
<b>PL 06:</b> Anatomy of skyrmion-defect complexes from first principles. Samir Lounis Forschungszentrum Jülich & JARA, Germany.	19
<b>PL 07:</b> Nouveau formalisme pour les ondes de Bloch de surface. Fadi I. Baida Université Bourgogne Franche-Comté, France.	20
<b>PL 08:</b> Electronic structure and plasmonic response of metal nanoclusters. Franck Rabilloud Université de Lyon, France.	20
<b>PL 09:</b> Dislocations in III-nitride materials investigated by DFT calculations Imad BELABBAS Université de Bejaia, Algeria.	21
<b>PL 010:</b> La lumière et le nano monde Azzedine Boudrioua Université Paris 13, France.	22
<b>PL 011:</b> Bulk photovoltaics: first-principles calculations using Wannier interpolation Julen Ibanez Azpiroz Universidad del País Vasco (UPV/EHU), Spain	22
<b>PL 012:</b> Particle Physics: status and perspectives Djouadi Abdelhak Université Paris-Sud, France	23

## Thème A: Plasma et Lasers

### Communications Orales

- CO.08:** Satellite Spectra for Hydrogen Perturbed by Oscillating Fields 24  
Ibtissem HANNACHI, Roland STAMM

### Communications Posters

- CP.01** The structural, electronic, optical, thermal, and thermodynamic properties Studies of Ba<sub>1-x</sub>CaxS alloy using the (FP-LAPW) method 24  
Bochra AMIMOUR, Menouba SLIMANI, Rachida KHEMISSI, Hocine MERADJI, Sebti GHEMID
- CP.02** Effet conjugué de la non thermalité et des corrections d'ordre supérieur sur le soliton acoustique poussiéreux 25  
Nabil ARAB et Rabia AMOUR
- CP.03** Study of Threshold Ablation of Recuperated Alu-minum Alloys Irradiated by Nd: Yag Laser 25  
Leila BAZIZ
- CP.04** Diffusion in quasi-one-dimensional strongly coupled system on a quasi-aperiodic substrate 25  
A. Bekda, M. Djebli
- CP.34** Investigation and applications of laser-induced plasma spectroscopy technique 26  
Fatma Bencherif, Sid. Ahmed.Beldjilali, Tewfik Baba-Hamed, Ahmed Belasri
- CP.35** Airy beam generation using acousto-optical cell : Acoustic wavelength effect 26  
Abdeljalil BENSTITI, Kouider FERRIA, Abd elhalim BENCHEIKH
- CP.36** Propriétés de luminescence par Upconversion des cristaux de CdF<sub>2</sub> codopés Tm<sup>3+</sup>/Yb<sup>3+</sup> 26  
Sabrina BORDJ, Madjid DIAF, Reda FARTAS
- CP.37** Preliminary studies of VUV emission spectrum of the trivalent Dysprosium free ion (Dy<sup>3+</sup>) 27  
Anis CHIKH, Djamel DEGHICHE, Ali MEFTAH, Omar LAMROUS
- CP.68** Contribution à l'étude de matériaux magnétiques Fe<sub>92,4</sub>Si<sub>3,1</sub>B<sub>4,5</sub> consolidés par SLM 27  
R. Drablia, S. Alleg, N.E. Fenineche, J.J. Suñol
- CP.69** Rare earth doped fiber laser study: comparison between Erbium and yt-terbium 28  
Abir KEMMACHE, Bouzid BELLOUI, Abderrahim BELLOUI
- CP.70** ab initio calculations for structural and optical properties of MF<sub>2</sub>, PrF<sub>3</sub> and M<sub>1-x</sub>Pr<sub>x</sub>F<sub>2+x</sub> 28  
Rachida KHEMICI, Zohra CHOUAHDA, Bochra AMIMOUR, Hocine MERADJI and Sebti GHEMID
- CP.71** Démonstration expérimentale de la propagation de faisceaux laser d'ordre supérieur à travers un système optique à ouverture rectangulaire 29  
Karima Mihoubi, Abdelhalim Bencheikh, Aissa MANallah and Andrew Forbes
- CP.102** Étude par dynamique moléculaire d'un cristal coulombien bidimensionnel à une température proche de zéro. 29  
Fatma KERMOUN, Madjid DJOUDER Moh Djerdjjer MITICHE, Omar LAMROUS
- CP.103** Laser à puits quantique à base de Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Se/ZnSe 30  
Mohamed LAHOUAL, Ahmed GUEDDIM, Nadir BOUARISSA
- CP.104** Experimental and Theoretical study of a Kr dielectric barrier discharge excilamp; comparison and interpretation of chemical process 30  
Nadjet LARBI DAHO BACHIR, Ahmed BELASRI, Bruno CAILLIER, Philippe GUILLOT
- CP.105** Onde acoustique ionique solitaire dans un plasma collisionnel non extensif en présence de l'ionisation 31  
Saliha MAYOUT
- CP.106** Non-thermal Plasma Discharge for CO<sub>2</sub> Splitting in CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> Gas Mixture: Kinetic Modelling to Elucidate the Chemistry and Improve the Performance 31  
Larbi SAIDIA, Ahmed BELASRI and Salim BAADJ



## Thème B: Photonique et Phononique

### Communications Orales

- CO.07:** Electronic structure, thermodynamic properties and phonon instabilities inducing structural phase transition in ScSb and ScBi : an ab initio study 32  
Hadj Moulay Ahmed MAZOUZ, Amina AICHE, Abdelkader TADJER
- CO.11:** Résolution du problème de diffraction en nano-optique par la Méthode Modale de Fourier 32  
Hakim Yala
- CO.31:** Propriétés vibrationnelles du système de nano-alliage de surface ordonnée Au/Cu (111) 33  
Bilal MENGUELTI, Rabah CHADLI

### Communications Posters

- CP.05** Theoretical study on the tautomerization of formamide inside carbon nanotube 34  
Bilal Achouri, Yamina Belmiloud and Meziane Brahimi
- CP.06** Pressure effects on the Structural, Electronic and Optical Properties of ternary  $\text{BeS}_x\text{Se}_{1-x}$  alloys from first principal calculations 34  
Ghania BELGOUMRI, Nadjat BENMEKIDECHE, Abdelouahab BENTABET
- CP.07** Investigation of structural, electronic and elastic properties of ternary gallium chalcogenides  $\text{CsGaQ}_2$  (Q = S, Se) 34  
Nadjat BENMEKIDECHE, Ghania BELGOUMRI, Abdelouahab BENTABET
- CP.08** Thermal conductivity and scattering properties by lamellar structure with different thicknesses 35  
M.Boucherrab, R. Tigrine, A. Khater
- CP.38** Équivalence entre le raccordement de la fonction d'onde et la fonction de Green atomique: la relation de Fisher-Lee généralisée 35  
H. BOUMRAR, H. ZENIA et M. HAMIDI
- CP.39** Temperature annealing effect of europium electrodeposited on silicon nitride 36  
A. Brika, K.Bekheddab, B. Benyahia, A. Manseri, B. Mahmoudi
- CP.40** Microscopie assistée par microsphère 36  
Assia Guessoum, Nacer Eddine Demagh
- CP.41** Conception of a new topology of wavelengths demultiplexers based on 2D photonic crystals for the separation of wavelengths  $1.31\mu\text{m}$  and  $1.55\mu\text{m}$  37  
F. Lallam, H. Abri Badaoui, and M. Abri, L. Benseddik
- CP.72** Optimizing the Performance of Grating Refractive Index Sensor Based on Guided-Mode Resonance. 37  
Sabrina MESLI, Mahdi HAMIDI, Fadi Issam BAIDA, Abderrahmane Belkhir
- CP.73** Simulation numérique d'une cellule solaire à hétérojonction InGaP/GaAs avec couche BSF et couche fenêtre 38  
Mohammed Zakaria MISSOURI, Ahmed BENAMARA Hassane BENSLIMANE
- CP.74** Absorption enhancement in thin-film amorphous silicon in solar cells 38  
Boumediene SADOON, Souheil MOUETSI
- CP.75** Broadband optical parametric generation in nonlinear photonic crystals of 2D-PPLN 39  
K OULD-LAMARA, A BENAZOUZ, M CHEBLI-MAKHLOUFI, Y.RACHEDI, Artur M. S. SILVA
- CP.76** Conception par FDTD d'une lame demi-onde dans la gamme optique à base de métamatériau biréfringent 39  
Thinhinane ZEGHDOUDI, Zahia KEBICI, Abdelaziz MEZEGHRANE, Abderrahmane BELKHIR and Fadi Issam BAIDA
- CP.164** Propriétés vibrationnelles d'une interface métallique Cu/Pt (100) 40  
Fazia LEKADIR, Rachid TIGRINE

## Thème C: Nanomatériaux : Propriétés et Applications

### Communications Orales

- CO.01:** Investigation of the physical properties of Fe/Si for use in a Cu/Fe/Si solar cells contact. 41  
Mourad MEBARKI, Abdelhamid LAYADI
- CO.02:** Propriétés structurales électroniques et magnétiques des petits agrégats d'argent dopés par un atome de brome. 41  
Yamina CHEBALLAH, Hamza KELLOU
- CO.12:** Etude de guides d'onde sublongueur d'onde en forme de C pour la conception de nano-coupleurs optiques 42  
Fadhila CHEHAMI, Abderrahmane BELKHIR, Omar LAMROUS
- CO.14:** TiO<sub>2</sub>: Eu<sup>3+</sup> films for temperature sensor applications derived by sol-gel technique 42  
Abdelkader Nebatti, Christian Pflitsch, Burak Atakan
- CO.16:** Analyse et caractérisations structurales des couches minces de ZnO/Si déposées par pulvérisation cathodique à magnétron: par diffraction des rayons X (DRX) et par microscopie électro-nique à balayage (MEB) 43  
Leila GHALMI, Souhila BENSMAINE
- CO.19:** Nanocrystalline nickel synthesis by pulsed current 43  
Amel BOUKHOUITE, Sihem ATAILIA
- CO.23:** Ab initio investigation using DFT method of Germanium doped clusters 44  
M. LASMI, S. MAHTOUT, M.A. ROUMILI & F. RABILLOUD
- CO.24:** Structural, electronic and magnetic properties of semiconductor doped transition metals using dft study 44  
M.A. Roumili, S. Mahtout, M. LASMI, K. Baddari and F. RABILLOUD
- CO.25:** Experimental investigation of carriers thermal distribution mechanisms in InAs nanostructures grown on vicinal InP(001) substrate 45  
Fatiha BESAHAOU, M'hamed BOUSLAM, Michel GENDRY, Faouzi SAIDI
- CO.26:** Les nanoparticules d'argent, synthèse et application antibactérienne 45  
M. Amraoui, M. Remram, A.M. Jurdy
- CO.27:** Evolution des densités de dislocations en présence du vieillissement dynamique 46  
MEHENNI Madjid et AIT-AMOKHTAR Hakim
- CO.28:** Electronic Magnetic and Structural properties of 3d transition metal compounds: First Principle Calculations 47  
R. Moussouni, F. Benissad, A. Houari
- CO.29:** Using first principles density functional theory approach to model the thermal conductivity of diamond-like materials 47  
S. BENSLEM, A. BOUHEMADOU, A. HADJ ARAB, N. BELHAOUAS
- CO.33:** Magnetic Properties of Nanostructured FeCoP Powder Mixture 47  
Hanane BERKANI, Rachid SIAB, Wassila TEBIB, Locif REDOUANI, Saida BOUKEFFA, Ali HAFS
- CO.36:** Milling Effect On The Structural, Microstructural and Magnetic Properties of Fe-Cu-Zn Nanomaterials 48  
Saida BOUKEFFA, Wassila TEBIB, Locif REDOUANI, Ali HAFS
- CO.38:** Etude par DFT des transitions de phases dans le CaCO<sub>3</sub> : effet des vibrations du point zéro 48  
R. Belkofsi and I. Belabbas
- CO.42:** morphological, structural and optical characterization of porous TiO<sub>2</sub> thin films deposited by spin coating method 49  
Rezika Zedek, Djedjiga Zalouk



## Communications Posters

<b>CP.09</b>	Half-Metallic Ferromagnetism Related to Spintronic Applications in 3d (Cr, and Co) doped CaS Amina AICHE, Abdelkader TADJER, Hadj Moulay Ahmed MAZOUZ	50
<b>CP.10</b>	Etude computationnelle du dinitrofluorenone par les différentes méthodes quantiques Mohammed Arab AIT TAYEB, Hichem Mahi BOUMEDAL, Noureddine TCHOUAR, Abdenacer IDRISSE, Oussama ELAFFFIFI	50
<b>CP.11</b>	Effect of rapid thermal annealing on CuO nanoparticles prepared by Sol-Gel method Kenza ALMI, Saïd LAKEL, Amina OUAHEB, Zahra BENADI	51
<b>CP.12</b>	Dielectric, Piezoelectric, Elastic and Acoustic Responses of Sn-doped PbTiO <sub>3</sub> as Potential Ferroelectric Materials for Acoustic Wave Applications Abdenacer Assali, F. Arab, F. Kanouni, F. Laidoudi	51
<b>CP.13</b>	Theoretical review of the structural and electronic properties of coiled carbon nanotubes Lina Linda BECHOHRA, Safia KELLOU-TAIRI, Hamza AZZAZ, Karim REZOUALI	52
<b>CP.14</b>	Elaboration and study of structural, microstructural and electrical properties of Barium-Strontium doped Manganite prepared at different sintering temperatures Faiza MERICHE, Nabil MAHAMDIQUA, <u>Ibtihal BELAL</u> , Fatih DENBRI, Samia BOUDJAOU, Nevin SOYLU, Sevgi Polat ALTINTAS, Ahmet VARILCI, Cabir TERZIOGLU	52
<b>CP.15</b>	Synthesis and characterization of PANI-WO <sub>3</sub> nanocomposite and its electrochemical behavior PANI-WO <sub>3</sub> matériaux composites Mohamed Sif Eddine Belardja, Faiza Chouli, Abdelghani Benyoucef	53
<b>CP.16</b>	Effet de l'épaisseur du film mince de CZTS sur les propriétés physiques et électrique Obtenus par immersion pour l'application de cellules solaires Mohamed Cherif Benachour, Rabeh Bensaha	53
<b>CP.17</b>	The different properties of Arsenic-doped germanium clusters by DFT Study Meriem BENAIDA, Kamal Eddine AIADI, Sofiane MAHTOUT, Soumaia DJAADI	54
<b>CP.18</b>	Ab-initio investigation of structural, electronic, magnetic, and thermodynamic properties of the new ferromagnetic full-Heusler alloys Pd <sub>2</sub> PrX(X=Cl, F) Saadiya BENATMANE, Bachir BOUHAFS	54
<b>CP.19</b>	Une étude comparative de trois types de nanofils sur Substrat en Silicium-Germanium pour des applications photovoltaïques Fatiha BENBEKHTI, Souaad TAHRAOUI, Habiba Houari, Hayate KHOUANI	55
<b>CP.20</b>	Contribution of Heusler alloys cobalt-manganese based Co <sub>2</sub> MnAl and Co <sub>2</sub> MnGa in Spintronic application Omar BENGUERINE, Zakia NABI, Badra BOUABDALLAH	56
<b>CP.21</b>	Ab initio Study into the Structural, Elastic, Electronic and Magnetic Properties of Cu <sub>2</sub> MnZ (Z = Si, Al) ternary Compounds Boucif BENICHOU, Halima BOUCHENAF, Zakia NABI, Badra BOUABDALLAH	56
<b>CP.22</b>	Formation et stabilité de petits clusters de lacunes sur la surface (111) de nickel Thinhinane Bennour, Lynda Lounis, Nadja Cherbal, Hand Zenia, El Hocine Megchiche	57
<b>CP.23</b>	Magnetic and thermoelectric properties of Ba <sub>2</sub> CeCoO <sub>6</sub> double perovskite BESBES Anissa, DJELTI Radouan, BESTANI Benaouda	57
<b>CP.24</b>	Photodegradation of a pharmaceutical compound using heterogeneous photo-Fenton system under UV illumination Nour Bouanimba, Ibrahim Mouhoub, Nassima Laid and Tahar Sehili	58
<b>CP.42</b>	Structural and magnetic properties of FeSe <sub>2</sub> and Fe <sub>3</sub> Se <sub>4</sub> nanostructures synthesized by HEBM B.HIND, O.AMARA	58
<b>CP.43</b>	Thermoelectric, electronic and magnetic properties of full-heusler materials Cs <sub>2</sub> CrGe S.CHERID, R. BENTATA, S. BENTATA, F. BENDAHEMA, S. HAID AND R. DJELTI	59
<b>CP.44</b>	Reinforcement of PANI with MWNTs for Supercapacitors F. Djefaffia, O. Guellati, A. Nait-Merzoug, A. Harat, S. Detriche, Z. Mekhalif and M. Guerioune	59

<b>CP.45</b>	PROPRIETES STRUCTURELLES, ELECTRONIQUES ET MAGNETIQUES DE LA PEROVSKITE DOUBLE Sr <sub>2</sub> MnReO <sub>6</sub> Benbella DJELTI, Samir BENTATA, Wissam BENSTAALI	60
<b>CP.46</b>	Experimental investigation and First-principles calculations on the physical properties of CuGaTe <sub>2</sub> for solar cells application Moufdi HADJAB, Ammar KASSAA, Smail BERRAH, Fayçal BOUZID, Miloud IBRIR, Abderrahim HADJ LARBI, Samah BOUDOUR, Hamza BENNACER	60
<b>CP.47</b>	Investigation of DFT+U effect of Holmium rare-earth on the electronic, magnetic and the half-metallic ferromagnetic properties' of double perovskite compound Slimane HAID, Bouabdellah BOUADJEMI and Samir BENTATA	61
<b>CP.48</b>	Effects of Sn content (at.%) on the structural, mechanical and tribological properties of Ti-Nb-Sn Alloys N. Hezil, M. Fellah, M. Abdul Samad, M. Abdurabou Hussein, R. Djellabi, A. Montagne, A. Mejias, S. Kossman, A. Iost, A. Obrosof and S. Wiess	61
<b>CP.49</b>	A Performance Evaluation of a Solar still using nanoparticles as photocatalysts Moulay rachid KOUADRI, nasreddine CHENNOUF, mohamed hassan SELLAMI, mohammed nasreddine RAACHE, Abdelhakim BENARIMA	62
<b>CP.50</b>	Electrochemical Synthesis and Characterization of Cuprous Oxide Nanomaterial and its Application in Electrocatalytic Oxidation of Glucose Samiha LAIDOUDI, Mohamed Redha KHELLADI, Charif DEHCHAR, Leila LAMIRI, Ouafia Belgherbi, Samah BOUDOUR, Rabah BOUFNIK	62
<b>CP.51</b>	Polypyrrole-coated manganese dioxide as electrode material for hydrogen peroxide reduction Leila Lamiri, Charif Dehchar, Samiha Laidoudi, Ouafia Belgharbi, Assia Tounsi, Belkacem Nessark, Farid Habelhames	63
<b>CP.52</b>	Etude de l'influence de défauts ponctuels sur le processus d'adsorption et de ségrégation de l'oxygène à la surface (111) de nickel : cas d'une bilacune Lynda Lounis, Thinhinane Bennour, Nadja Cherbal, El Hocine Megchiche, Hand Zenia	63
<b>CP.53</b>	First principle investigation of Li intercalated on MoO <sub>3</sub> A. Mahmoudi, M.K. Benabadji, H.I. Faraoun, M. Dergal	64
<b>CP.54</b>	DFT investigation of inclusion complexes nanoparticules interaction between nicotinic acid and β-cyclodextrin. Faiza MEDDOUR, Leila NOUAR	64
<b>CP.55</b>	Etude d'un monolayer ou d'un bilayer de MoSe <sub>2</sub> recouvert d'un monolayer de Fer ou de Cobalt. Lyes Mesbahi, Hamid Bouzar	65
<b>CP.56</b>	Effect (Co) On optical and electrical properties thin films ZnO nanostructure Mohammedi Abdelkader, Irir Miloud, Meglali Omar	65
<b>CP.77</b>	Préparation, caractérisation des titanates nanotubes et leur propriétés photocatalytiques dans la dégradation du méthyl orange Aouicha Mounia BOUAYED, Nawal AMEUR, Hanane CHAKER, Redouane BACHIR, Sumeya BEDRANE	65
<b>CP.78</b>	Etude par le code siesta des propriétés électroniques et magnétiques des nanorubans de carbone dopés par les atomes de bore et d'azote Boufala Khaled, Amrouche Faiza	66
<b>CP.79</b>	Variable range and small polaron hopping mechanisms in the high temperature range magneto-electrical transport of compound. S. Boufligha, N. Mahamdioua, F. Meriche, F. Denbri, N. Soyly, C. Terzioglu, A. Varilci, S.P. Altintas	67
<b>CP.80</b>	Structural, electronic and optical properties of Deltamethrin using density functional method Amel BOUTASTA, Abdelhakim BENOSMAN, Mouna CHERIT and Leila NOUAR	67
<b>CP.81</b>	Structure and Microstructure Properties of FeNbB NANOPERM alloy prepared by mechanical alloying T. CHABI, N. BENSEBAA, S. ALLEG, S. AZZAZA and J.J. SUNOL	68
<b>CP.82</b>	Etude des propriétés élastiques directionnelles du monohydrure de calcite sous pression Ghiles CHAHI, Imad BELABBAS, Djamel BRADAI	68

<b>CP.83</b>	Analyse Statique Des Plaques En Matériaux Fonctionnellement Gradué Sous L'effet Thermique Sara CHELAHI CHIKR, Bouchra ELMOSSOUESS, Abdelhakim KACI, Fouad BOURADA, Abdelouahed TOUNSI	69
<b>CP.84</b>	Elaboration d'un biocapteur chimique pour la détection du cadmium (II) et du plomb (II) par voltammétrie en redissolution anodique à impulsions Différentielles (DPASV) Mounira Dali, Amani Chrouda, Fadhel ismail	69
<b>CP.85</b>	Magneto-transport properties at insulator paramagnetic regime of (La, Sm, Ca) MnO <sub>3</sub> simple perovskite manganite Fatih DENBRI, Nabil MAHAMDILOUA, Faiza MERICHE, Sevgi POLAT-ALTINTAS, Nevin SOYLU, Cabir TERZIOGLU, Ahmet VARILCI	70
<b>CP.86</b>	L'aromaticité de Nouvelles structures moléculaires Coniques à base de C/Ge : Etude théorique (DFT) Moumena ELKEBICH, Soraya ABTOUCHE, Meziane BRAHIMI	70
<b>CP.87</b>	Optical and Electrical Properties of ZnO and Co Doped ZnO Thin Films Prepared by Sol-Gel Djouweyda FERKHA and Douniazad MEZDOUR	71
<b>CP.88</b>	The magnetic and structural properties of nanostructured Fe <sub>75</sub> Al <sub>15</sub> Mg <sub>10</sub> alloy synthesized by mechanical alloying Ali .Hafs, Salah Hamdi , Rachid Siab	71
<b>CP.89</b>	The electroluminescence investigation of a light emitting diode composed of a silicon nitride film containing silicon nanocrystals Nadjet HAFSI, Hachemi BOURIDAH	71
<b>CP.90</b>	Structural and electronic properties of Tin+1 and FeTin (n=1-7) clusters Rahida HAICHOOR, Sofiane MAHTOUT	72
<b>CP.91</b>	Characterization by Photoluminescence, Grazing Incidence X-ray Diffraction, and FEG/SEM Observations, of the Oxide Scales Grown on the PM2000 at High Temperatures Samiha Hakkar, Sofiane Achache, Frédéric Sanchette, Zineb Mekhalif, Najoua Kamound, Abdecharif Boumaza	72
<b>CP.107</b>	Elaboration and Application of Nanomaterial for Water Depollution A. Nait-Merzoug, O. Guellati, N. Habib, A. Harat b, I. Janowska, D. Bégin, N. Manyala d and M. Guerioune	73
<b>CP.108</b>	Preparation of cetyltrimethylammonium bromide modified montmorillonite for adsorption of Methylene Blue A. Nait-Merzoug, O. Guellati, N. Habib, A. Harat, I. Janowska, D. Bégin, N. Manyala and M. Guerioune	74
<b>CP.109</b>	Synthesis and characterisation of diatomite supported Ti-Fe nanoparticles for optical property Walid REZIG, Mohammed HADJEL	74
<b>CP.110</b>	Synthesis of the CuFeSe <sub>2</sub> thin films for solar cells using SHS technique and thermal evaporation L. Saad Hamideche, F. Boutarfa, A. Amara, A. Benaldjia, N. Benslim	75
<b>CP.111</b>	Modélisation théorique de la dynamique précessionnel de la surface alliage AxB <sub>1-x</sub> Lamia SAIM, Rachid TIGRINE, Antoin KHATER	75
<b>CP.112</b>	Effet de la température de calcination sur les céramiques sans plomb du type perovskite préparées par réaction à l'état solide conventionnelle K. SEDDA, R. DJAFAR, K. BOUMCHEDDA, F. BOUKAZOUHA	75
<b>CP.113</b>	A numerical investigation on the critical buckling load of nanocomposites plate based on carbon nanotubes. Tayeb SI TAYEB, Mohamed ZIDOUR, Houari HIRACHE	76
<b>CP.114</b>	Ab initio Calculations of Ternary Full Heusler Alloy Co <sub>2</sub> NbZn Amel Slamani, Friha Khelfaoui, Mohammed Ameri	76
<b>CP.115</b>	The effect of disorder on electronic and magnetic properties of (Ni <sub>1-x</sub> Cox) <sub>2</sub> MnSn quaternary Heusler alloys. Y. Zaoui, L. Seddik, L. Beldi, S. Amari, and B. Bouhafis	77
<b>CP.116</b>	Structural and mechanical properties of TmB <sub>2</sub> and TiB <sub>2</sub> compound Fatiha ZAZOUA, Ali ZAOUI	77
<b>CP.117</b>	Synthèse verte de nano-objets à base d'argent en utilisant l'extrait de feuille de plante Sabrina HALIT, Mourad MECHOUET	78

<b>CP.118</b>	Annealing effect on the photoluminescence properties of Pr <sup>3+</sup> doped YPO <sub>4</sub> nanophosphors Badis KAHOUADJI, Lakhdar GUERBOUS	78
<b>CP.119</b>	Propriétés Structurales, Electroniques, et Magnétiques de la nouvelle classe des alliages Heusler CsSrX (X= C, Si), Etude du premier principe. A.M.KHETIR, H.ROZALE	79
<b>CP.120</b>	Ab-initio study of the electronic structures of metal dichalcogenides van der Waals heterostructures Fayssal MAHROUCHE, Karim. REZOUALI, Sofiane MAHTOUT, and Foudil ZAABAR	79
<b>CP.121</b>	Hydrothermal synthesis, crystal structure and luminescent properties of a new praseodymium coordination polymer of glutarates and 1,10-phenanthroline Roza MAOUCH, Imane ZAAMOUCHE, Sabrina BELAID, Belkacem BENMERAD, Sofiane BOUACIDA and Olivier GUILLOU	80
<b>CP.122</b>	Elastic properties and Sound velocities of calcite under hydrostatic pressure Ouahiba NAMIR and Imad BELABBAS	80
<b>CP.123</b>	Physico-chemical properties, of ternary AgBr <sub>1-x</sub> I <sub>x</sub> alloys in Zinc-Blend(B3), and Rock-Salt(B1), structures Hamza REKAB-DJABRI, Souad FASLA-LOUHIBI	81
<b>CP.124</b>	First principal calculations of properties of iron doped arsenic clusters FeAs <sub>n</sub> (n = 1 - 20) S. SAFER, S. MAHTOUT, K. REZOUALI, C. SIOUANI and F. RABILLOUD	81
<b>CP.125</b>	Contribution à l'étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des nanomatériaux de Germanium dopés aux alcalino-terreux MGen (M = Ca, Sr, Cs et Ba) pour n = 1 – 12 : Calculs ab initio par voie de la DFT Y. TARIKET, S. MAHTOUT	82
<b>CP.126</b>	Caractérisation électrochimiques de composites nanofibreux à base de po-lyaniline et d'oxyde de manganèse (PANI/MnO <sub>2</sub> ) pour des propriétés de stockage d'énergie Assia Tounsi, Farid HABELHAMES, Ahmed BAHLOUL, Abdelfetteh SAYAH	82
<b>CP.127</b>	Optoelectronic properties of layered transition metal dichalcogenides Foudil ZAABAR, Karim REZOUALI, Sofiane MAHTOUT	83
<b>CP.138</b>	A Green Synthesis of poly(styrene-co- 1,3,5-trioxane) Using an Ecologic Catalyst Montmorillonite nanocomposite (Maghnite-H <sup>+</sup> ) Nabil HAMAM, Mohammed Issam FERRAHI, Mohammed BELBACHIR	83
<b>CP.139</b>	Synthèse de ZnO dopé Ce et Co par co-précipitation et effet du dopage sur les propriétés structurales Amina HAMIHAM, Yamina BEGGAH	84
<b>CP.140</b>	Effet de montmorillonite sur les propriétés mécaniques et morphologique de biocomposite à base d'un polymère et une charge végétale Fayçal KABACHE, Sorya NEKKA	84
<b>CP.141</b>	Caractérisation des nanostructures de ZnO et son application pour le traitement des eaux usées en utilisant la photocatalyse hétérogène sous irradiation artificielle et solaire N. Laid, N. Bouanimba, A. Ben Ahmede, A. Toureche, I. Mouhoub and T. Sehili	84
<b>CP.142</b>	First principles investigation of the structural and electronic properties of (110), (110) and (111) growth axis BN/GaN superlattices Mimouna OUKLI, Noureddine MEHNANE, Hafida BELGHOUL, Nabila OUKLI	85
<b>CP.143</b>	Etude des varistances a base de poudres nanométriques de ZnO dopé Bi : effet de la température de frittage Maliha OUNIS, Kamel GUERGOURI	85
<b>CP.144</b>	Application de la densité d'état (DSO) constante dans l'analyse numérique du système PIN en a-Si : H RAHMOUNI Khaoula, AISSANI Linda, CHAHDI Mohamed, BOURAHLA Nassima, BENABDELAZIZ Dalila	86
<b>CP.145</b>	Theoretical study of organic triphenylamine dyes for dye sensitized solar cells Ihssène OUARED, Mâammar REKIS	86
<b>CP.146</b>	A computational approach using the DFT theory to reveal the structural stability and physical properties of PdAs <sub>n</sub> (n = 1-20) clusters Chaouki SIOUANI, Sofiane MAHTOUT, Sofiane SAFER and Franck RABILLOUD	87
<b>CP.165</b>	Nanocomposite : comportement a la corrosion de l'alliage Zn-Fe Nazih RIBOUH, Samia AMIRAT	87

## Thème D: Chimie Quantique

### Communications Orales

- CO.03:** Ab initio simulations of ultrafast laser-induced destabilization of metallic lattice 88  
Leila Ben-Mahfoud, Elena P. Silaeva, Emile Bevillon, Razvan Stoian, Jean-Philippe Colombier
- CO.17:** Processus de tautomérie céto-éno / thion-thiol catalysé par des solvants polaires protiques 88  
de nouvelles molécules hétérocycliques.  
Hasnia ABDELJEBBA, Yamina BELMILOUD, Meziane BRAHIMI, Bahoudine TANGOUR
- CO.37:** Prédiction des diagrammes de phases des liquides ioniques à l'aide du modèle COSMO-RS 89  
Batoul Fatima Zohra SARI-ALI, Latifa NEGADI
- CO.39:** Mechanism Thermochemistry and kinetics of/DMF/DMA /DMP reaction with OH Radical 89  
S. Samai, A.Ferhatia
- CO.40:** Etude DFT des modes d'empilement dans des cristaux de trihalogéno mésitylène 90  
A. Amar, A. Boucekkine, J. Meinel
- CO.43:** Etude Thermodynamique, Spectroscopique, et Computationnelle des Systèmes Binaires de 91  
1,4-Dioxane + Alcools (1-propanol, 1-pentanol, 1-heptanol)  
Houda BENABIDA, Amar SAAL, Farid Brahim BELARIBI

### Communications Posters

- CP.25** DFT Study of Arginine-Guanosine Interaction: QTAIM and NBO analysis 92  
Nour Elyakine AMRAOUI, Dalila HAMMOUTENE
- CP.26** Investigations on curcumin and its complexes using DFT, TDDFT, QTAIM and ETS- 92  
NOCV calculations  
Kaouther BAIRA, Nadia OUDDAI
- CP.27** Quantum mechanical calculations of polyphenols 93  
Kahina BAKHOUCHE, Dalila HAMMOUTÈNE
- CP.28** First-principles study of CsPbBr<sub>3</sub> stability 93  
Raouia BEN SADOKa, Dalila HAMMOUTENE
- CP.29** Recherche structurale des conformères stables d'intérêt biologique au moyen des 94  
méthodes quantiques  
Aicha BENABDELKRIM, Ala Eddine TOURCHI, Hasnia OTHMANI, Saida BEN  
YAGHLANE, Nejm Edine JAIDANE, Majdi HOCHLAF, Dalila HAMMOUTENE
- CP.30** Etude théorique du mode de coordination du ligand cyanure dans des complexes de 94  
l'uranium et du cérium  
Yamina BOUZIDI, Lotfi BELKHIRI, Michel EPHRITIKHINE, Jean-François HALET, et  
Abdou BOUCEKKINE
- CP.57** Host-guest interaction between Flavonoid Fisetin and  $\beta$ -cyclodextrin: Molecular 95  
modeling and nuclear studies  
Fares Djebiha, rachid Merdes, abdelaziz Bouhadiba, mohamed Rahim
- CP.58** Theoretical Investigation of the Protonation Sites within a set of Anderson 95  
Heteroploanions  
Ikram Nour El Hoda GUERMI, Meriem ALMI, Amar SAAL
- CP.59** Etude théorique dans les séries hétérocycliques : structure, réactivité, relations structure- 96  
activité et sélectivité dans les réactions d'hétérocyclisation  
Zehira Haddadi, Hacène Meghezzi, Anissa Amar, Abdou Boucekkine, Samia Bouzroua,  
Bellara Nedjar-Kolli
- CP.60** DFT/TD-DFT investigation on the UV-vis absorption and phosphorescence spectra of 96  
plati-num(II) and palladium(II) complexes with Schiff-base ligands  
Houari BRAHIM, Abdelkrim GUENDOZI

<b>CP.61</b>	Détermination des propriétés structurales et électroniques bimétallique à base du ligand BDI et du groupe imido Moncef Khireche, Bachir zouchoune, Azzedine Ferhati	97
<b>CP.62</b>	Insertion de petites molécules CO <sub>2</sub> et CS <sub>2</sub> dans les complexes monothiolates de l'uranium (IV). Farida KIAS, Fatiha TALBI, Aziz ELKECHAI, Abdou BOUCEKKINE	97
<b>CP.63</b>	Theoretical investigations of CsO: spectroscopy and transitions moments S. Koudjeti, B. Mehnen, K. Merabti, S. BenYaghlane, N. Jaidane, S. Azizi and M. Hochlaf	98
<b>CP.92</b>	Understanding the regio- and stereoselectivities of the 1,3- dipolar cycloaddition of 2,3,4,5-tetrahydropyridine-I-oxide with methylcrotonate using DFT study Halima Hazhazi, Boulanouar Messaoudi	98
<b>CP.93</b>	Quantitative structure properties relationship for DESs using $\sigma$ -profile as molecular descriptors and their molecular interaction by COSMO-RS Tarek LEMAOU, Yacine BENGUERBA	99
<b>CP.94</b>	Etude cristalline, spectroscopique et analyse de la surface de Hirshfeld du 4,6-dichloro-5-méthylprimidine comparée aux résultats théorique Merime Medjani, Ouarda Brihi, Ali Boudjada	100
<b>CP.95</b>	Synthesis, Characterization, and quantum chemical calculation of new isatin-hydrazone: as a potent antibacterial and antioxidant agent Kamel MOKHNACHE, <u>Soraya Madoui</u> , Hanane KHITHER, Nouredine CHAREF	100
<b>CP.128</b>	Oxidation of CO into CO <sub>2</sub> with Monte Carlo simulation and DFT theory Lamia. KRIM, Dalila. HAMMOUTENE	101
<b>CP.129</b>	DFT and TDDFT study on the lanthanide and actinide triflate complexes Meriem LEMMOUCHI and Nadia OUDDAI	101
<b>CP.130</b>	Theoretical study of the bonding mode and electronic structure of bimetallic complexes to ligands rich in p-electrons Sabri MECHERI and Bachir ZOUCOUNE	102
<b>CP.131</b>	Etude théorique par la méthode QSAR d'une série de molécules hétérocycliques a intérêt médicinale <u>sihem Medjahed</u> , zoulikha Sebaa, fatima Soualmia, salah Belaidi, noureddine Tchouar, Nabila Aoumeur et kamel Bentayeb	102
<b>CP.132</b>	Theoretical study of some lowest electronic states of CsS Karim Merabti, Sihem Azizi, Nejm-Eddine Jaidane, Roberto Linguerri, Gilberte Chambaud and Majdi Hochla	103
<b>CP.147</b>	Theoretical prediction of the toxicity of polychlorinated biphenyls (PCBs) using functional density theory (DFT) Noura Naili, Bachir Zouchoune	103
<b>CP.148</b>	Theoretical study of EDDS,EDDM and EDTA acids for the prediction of their stability and reactivity Salima Lakehal, NAWEL REDJEM and Aicha lakehal	104
<b>CP.149</b>	Etude Théorique de la Réaction de Régénération du POM d'Anderson Imane CHIKHAOUI, Meriem ALMI, Amar SAAL, Ourida OUAMERALI	104
<b>CP.150</b>	Theoretical study on the mechanism of CH <sup>+</sup> and O <sub>3</sub> atmospheric reaction K. Sidi Said et M. Nait Achour	105
<b>CP.151</b>	SAR and QSAR Modeling of some 1,4 diazine derivatives as anti-proliferative agents Fatima SOUALMIA, Nouredine TCHOUAR, Nabila AOUMEUR, Salah BELAIDI	105
<b>CP.152</b>	Etude théorique, par la méthode DFT, du complexe [Cu(4-éthyle pyridine triméthylté-trathiafulvalène)1(hfac)2][PF <sub>6</sub> ] <sub>2</sub> . Hanene Soukehal, Saliha Belhouchat, Noura Benbellat, Samira Zeroual, Abdelkrim Gouasmia	106
<b>CP.153</b>	GREEN SYNTHESIS, THEORETICAL CALCULATION AND MECHANISM STUDY OF NEW 2-PYRONE-BASED HYDRAZONES S. TELLAL, D. OUKACHA-HIKEM, A. AMAR-HADDAD, L. BELMAHDI	107
<b>CP.154</b>	ETUDE THEORIQUE DES PROPRIETES STRUCTURALES ET ELECTRONIQUES DES MOLECULES D'INTERET INTERSTELLAIRES DE FORMULE GENERALE [H,C,N,O,O] PAR LES METHODES QUANTIQUES Ala Eddine TOURCHI, Aicha BENABDELKRIM, Hasnia OTHMANI, Saida BEN YAGHLANE, Nejm Edine JAIDANE, Majdi HOCHLAF, Dalila HAMMOUTENE	107



<b>CP.155</b>	Molecular structure, NMR, FT-IR, UV spectroscopy, and HOMO-LUMO of dérivé 2-(ferrocenylmethylamino) benzonitrile by quantum computing methods ZEGHEB Nadjiba, BOUBEKRI Cherifa, LANEZ Touhami	108
<b>CP.156</b>	Etude structurale et électronique des spectres UV-Vis des Complexes d'un plan Bipyramidale à base carrée avec les métaux de transition $[M(III)(PyPepS)_2] \times n$ [(M=Cr, Mn, Fe, Co et Ni) $x=-1, 0, +1$ ]: étude DFT et TD-DFT S.M. Zendaoui, S. Abbessa, O. Bouzid, B. Zouchoune	109

## Thème E: Théorie de l'Information Quantique et Technologies Quantiques

### Communications Orales

<b>CO.04:</b>	Action d'une amplification non-déterministe linéaire et sans bruit sur la distillation de l'intrication et de la téléportation des états cohérents de la lumière. Hamza ADNANE, Abdelhakim GHARBI, Matteo G A PARIS	110
<b>CO.06:</b>	Can fluctuations enhance quantum entanglement ? Kamel OURABAH	110
<b>CO.30:</b>	Discrete and generalized phase space techniques in critical quantum spin chains. Zakaria MZAOUALI, Steve CAMPBELL, Morad EL BAZ	111
<b>CO.35:</b>	Simulating quantum gates with anyons Ismail AKKOUCHE, Achour BENSLAMA	111
<b>CO.41:</b>	Super quantum information Abdeslem Khemakhmia, Nouredine Mebarki	111
<b>CO.45:</b>	The Quantum Entanglement of Bosonic massless fields in Non commutative Expanding Spacetime Med Farouk GHITI, Nouredine MEBARKI et Habib AISSAOUI	112

### Communications Posters

<b>CP.31</b>	Improving quantum phase-shift keying by noiseless linear amplification and nonMarkovianity Hamza ADNANE, Abdelhakim GHARBI, Matteo G A PARIS	113
<b>CP.32</b>	Entangled Nonlinear Coherent States attached to Tsallis q-exponential: Non-classical Properties and Quantum Entanglement Abdelhak BENDJEFFAL	113
<b>CP.33</b>	Quantum state engineering within superposition of causal orders Seid KOUDIA, Abdelhakim GHARBI	113

## Thème F: Physique Mathématique et Cosmologie

### Communications Orales

<b>CO.05:</b>	Quantum solution of time-dependent equations related to cosmological models Yahia SAADI	115
<b>CO.09:</b>	Non commutative geometry and particle creation phenomenon Slimane Zaim, Hadjar Rezki	115
<b>CO.10:</b>	New predictions on the nature of the hypothetical magnetic charge in Fock's nonlinear relativity Naimi Takka and Ahmed Bouda	115

<b>CO.13:</b> Calculation of the $^{25}\text{Al}(p,\gamma)^{26}\text{Si}$ and $^{26}\text{Al}(p,\gamma)^{27}\text{Si}$ reaction rates	116
Hanane Mebrek, Mouna Bouhelal, Derradji Bahloul and Abdelhamid Bouldjedri	
<b>CO.15:</b> Study of the reaction $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$	116
Mohammed Akram ZERMANE, Nadia OULEBSIR	
<b>CO.18:</b> Mass Spectrum of Open and Closed Strings with background B-Field and Para-Quantization	117
Mohamed adib ABDELMOUMENE, nadir BELALOU	
<b>CO.20:</b> Bi-Galileon model	117
Boumaza Hamza , Nouicer Khiredinne	
<b>CO.21:</b> Sur la dynamique des particules en relativité générale	118
Hichem GUERGOURI, Taoufik FOUGHALI	
<b>CO.22:</b> Equation de Dirac dans un Espace-temps Courbé et création de Paires de Particules	118
Nabil MEHDAOUI, Lamine KHODJA, Abdelhakim GHARBI, Salah HOUAT	
<b>CO.32:</b> The Neveu-Schwarz-Ramond models with deformed dispersion relations.	118
Hocine Randji, Nadir BELALOU	
<b>CO.34:</b> The three dimensional time dependent generalized dirac oscillator (Adiabatic solution)	119
CHAABI Nadir	
<b>CO.44:</b> Flavor changing in the flipped 341 model	119
Meriem DJOUALA, Noureddine MEBARKI	

## Communications Posters

<b>CP.64</b>	Détermination du spectre des énergies de potentiel de Rosen-Morse modifié dans le cadre du formalisme des intégrales de Feynman	120
Assia AMROUCHE, Ahmed DIAF		
<b>CP.65</b>	Schwinger effect in the presence of a nonzero minimal length	120
Bouali Messaouda, Salah Haouat		
<b>CP.66</b>	Analytical solutions of the Schrödinger equation with an energy-dependent hyperbolic potential using the Pekeris approximation	120
Elhadj Hocine, Rabia Yekken		
<b>CP.67</b>	Hartmann Potential with a Minimal Length and Generalized Recurrence Relations for Matrix Elements	121
Lamine KHODJAa, Mohamed ACHOUR		
<b>CP.96</b>	Pseudoharmonic potential of diatomic molecules in noncommutative space	121
Mohamed ACHOUR, Lamine KHODJA		
<b>CP.97</b>	On the quantum behaviour of a fermion in the presence of a scalar and vector potential barriers	121
Basma AINOUS, Salah HAOUAT		
<b>CP.98</b>	Projected Partition Function of a Color-singlet Quark-Gluon Plasma within a Density of States given by the Multiple Reflection Expansion Approximation	122
Amal AIT EL DJOUDI, Karima MEZOUAR, Bachir MOUSSAOUI		
<b>CP.99</b>	Scattering of a spin-1/2 Dirac particle by a Woods-Saxon potential in a One-Dimensional	122
Soumia AYACH HAMRAOUI, Kamel KHOUNFAIS		
<b>CP.100</b>	Exact solutions for a relativistic generalized harmonic oscillator using quantum Hamilton-jacobi approach	122
Halima BACHI, Samir TOULOUM, , Abdelhakim GHARBI		
<b>CP.101</b>	Geodesic equation in R-Minkowski phase space	123
BERRABAH Abdelghani		
<b>CP.133</b>	Eikonal gluon Bremsstrahlung and non global logarithms	123

	Hamza Bouaziz, Yazid Delenda	
<b>CP.134</b>	Finite Size Effects on the Deconfinement Phase Transition to a QGP for Different SU(3) Color Representations	123
	Karima MEZOUAR, Amal AIT EL DJOUDI	
<b>CP.135</b>	The Quark-Gluon Plasma Equation of State at Finite Chemical Potential within the Bag Model	124
	Bachir MOUSSAOUI, Amal AIT EL DJOUDI	
<b>CP.136</b>	Regularization of the singular attractive potentials by using an energy dependent coupling constant	124
	Rabia YEKKEN, Elhadj HOCINE	
<b>CP.137</b>	The Microstates of (2+1)-dimensional Black Hole and CFT	125
	Hadjer BENMEBAREK	
<b>CP.157</b>	Effets viscoélastiques sur les instabilités dans un écoulement annulaire à faible nombre de Reynolds	125
	Nabila BOUBALOU, Nadia MEHIDI BOUAM, Houria DJESSAS	
<b>CP.158</b>	The geometrical aspect of electromagnetic interaction	125
	Abdelmadjid DJEHICHE, Abdelmoumene BELABBAS, Ahmed BOUDA	
<b>CP.159</b>	Some characteristics of the deconfinement phase transition in a finite volume from cumulants of the probability distribution	126
	Rokaya DJIDA, Amal AIT EL DJOUDI	
<b>CP.160</b>	Modélisation numérique pour générer l'énergie de l'état lié par la méthode variationnelle semi-inverse-B-spline	126
	Ouanassa HAIF KHAIF	
<b>CP.161</b>	An investigation of the Higgs-gauge boson couplings at Leptonic Colliders	126
	HAMDELLOU Hilal	
<b>CP.162</b>	Dirac Particles Tunneling from Rotating Charged Cosmic Strings with Seiberg-Witten Non Commutative Geometry	127
	Lamia Menacer, Habib Aissaoui, Noureddine Mebarki	
<b>CP.163</b>	Effet de lentille gravitationnelle fort dans le cadre du modèle d'Einstein-Straus avec une courbure spatiale positive	127
	Mourad GUENOCHE, Sami Ryad ZOUZOU	

## **Conférences plénières**

## Conférences plénières

### PL01

#### Intelligence artificielle et la physique

Hafid Aourag

Direction Générale de la Recherche Scientifique et du Développement Technologique (DGRSDT),  
Alger

### PL02

#### Quantum sensing and metrology: the quantum Cramer-Rao bound and beyond

Matteo Paris

Quantum Technology Lab, Department of Physics, University of Milan, Italy

#### Abstract

Quantum estimation theory (QET) is a powerful tool for quantum sensing, metrology and the search of new physics. This talk is devoted to QET and it is divided in two parts. In the first part, I provide an invitation to QET, introducing ideas and methods from scratch, and providing examples of application. In the second part, I go back to foundation of QET and emphasize that a crucial assumption to prove the quantum Cramer-Rao theorem is that the unknown parameters label the possible states of the system, while they influence neither the sample space of outcomes, nor the measurement aimed at extracting information on the parameters itself. However, there are relevant estimation problems where this assumption does not hold and an alternative approach should be developed to find the genuine ultimate bound to precision of quantum measurements. We investigate physical situations where there is an intrinsic dependence of the measurement strategy on the parameter, and find that quantum-enhanced measurements may be more precise than previously thought.

### PL03

#### DFT investigations of molecular one-, two-photon absorption and photochemical properties

Abdou Boucekkine

Sciences Chimiques de Rennes UMR 6226

Université Rennes 1, France

#### Abstract

High energy particle physics has witnessed a decisive progress this decade with the observation of the Higgs boson at the CERN Large Hadron Collider, a discovery which confirmed the Standard Model in the description of three of the four fundamental interactions in nature. I will first discuss the status of the model and its tests at present experiments. I will then describe its shortcomings and the extensions of the model that address some of them, such as supersymmetry, extra space-time dimensions and composite models. I will finally summarise the perspectives for the search of the new physics implied by these extensions.

**PL04****Squeezing (and) phase diffusion: recent theoretical and experimental results**

Stefano Olivares

Quantum Technology Lab, Department of Physics, University of Milan, Italy

**Abstract**

The phase of an optical signal represents a building block for quantum enhanced metrology and communication. However, the major obstacle to fully exploit the possible advantages the optical phase is the phase noise due to phase diffusion. Here we consider two scenarios. In the first one [1], we address binary phase-shift-keyed communication based on Gaussian states and prove that squeezing can enhance optical state discrimination at fixed channel energy. By investigating the ultimate bounds to discrimination (the Helstrom bound), we show that displaced-squeezed states (DDS) can be better discriminated than coherent states (CS) if the squeezing fraction (the ratio between the squeezed photons and the total energy of the signal) is below a given threshold. When phase noise affects the propagation of the signals, the performance of the DDS with a homodyne receiver can beat the Helstrom bound for CS. Furthermore, we find that as the phase noise increases, the protocol exploiting DDS and homodyning becomes nearly-optimal, i.e. approaches the corresponding Helstrom bound. Finally, we consider imperfections in the preparation of the seed signal (the state before the encoding). As one may expect, the presence of a not pure seed state increases the discrimination error probability; nevertheless, we still find that squeezing may improve state discrimination with respect to the protocol based on CS.

In the second scenario [2], we show that, thanks to an active stabilisation scheme of our optical parametric amplifier (OPO) cavity and to a novel technique for pump phase stabilisation, we are able to explore experimentally the use the OPO to counteract phase noise, and to demonstrate reduction of phase diffusion for coherent signals. The high degree of control of the setup allows us not only to seed the quantum amplifier but also to simulate the effect of the phase noise. We theoretically and experimentally show that there is a threshold value on the phase-noise, above which the OPO can be exploited to “squeeze” phase noise. The threshold depends on the energy of the input coherent state and on the relevant parameters of the OPO, i.e. gain and input/output and crystal loss rates.

**References**

- [1] G. Chesi, S. Olivares and M. G. A. Paris, Squeezing-enhanced phase-shift-keyed binary communication in noisy channels, *Phys. Rev. A* 97, 032315 (2018).
- [2] S. Cialdi, E. Suerra, S. Olivares, S. Capra and M. G. A. Paris, Squeezing phase diffusion, arXiv:1905.13158.

**PL05****Le formalisme hamiltonien de la gravitation d'Einstein - Cartan**

Lagraa Mohamed

Laboratoire de Physique Théorique, Université d'Oran 1, Algérie.

**Abstract**

Une analyse détaillée des contraintes hamiltoniennes de la gravité de dimension  $D$  formulée en termes de connexion et tétrade où la partie non dynamique de la connexion spatiale est fixée à zéro par une transformation de jauge adéquate conduit à des contraintes polynomiales de Lorentz, scalaire et vectorielles obéissant à une algèbre fermée construite en terme de crochet de Poisson. Cette algèbre se ferme avec des constantes de structure contrairement au formalisme hamiltonien de la gravitation basé sur la décomposition A.D.M. de la métrique où l'algèbre de contraintes se ferme avec des fonctions de structure (algèbre ouverte). Ces contraintes de première classe conduisent aux mêmes degrés physiques de liberté de la relativité générale.



**PL06****Anatomy of skyrmion-defect complexes from first principles**

Samir Lounis

Peter Grünberg Institut and Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich & JARA,  
Germany**Abstract**

Magnetic skyrmions are swirling spin-textures of topological nature making-up an exciting and innovative field of science, that takes part in the general revolution condensed matter undergoes by notion of topology. Their potential implication is enormous in new technologies used to store, transport and read information. This is however hindered by various challenges, encompassing the unavoidable inhomogeneities ubiquitous to any device, which affect their detection, nucleation, motion and velocity. Using first-principles, I will address in a material specific context some of these aspects, which define the viability of past, current and future devices for information technology. This requires novel theoretical concepts, the development of cutting-edge methodologies and surmounting formidable computational challenges. I will discuss ab-initio inspired protocols for efficiently detecting non-collinear spin-textures with all-electrical or optical means and how they are particularly affected by the presence of defects. I will present our mapping of the energy-landscape of single magnetic nanoskyrmions interacting with 3d and 4d transition single-atom impurities, establishing a generic shape as function of the defect's electron filling. With a careful analysis of the hybridization of the electronic states, similarities with key concepts of bond theories in catalysis and surface sciences imbue the universality of the shape of the interaction profile and the potential of predicting its nature being pinning, repulsive or inert. Surprisingly, once brought close to each other initially repulsive single-atomic defects can lead to either pinning or repulsion and even to a combination of both behaviours. Borrowing biological concepts such as the Punnet square, we predict the resulting interaction genotype's profile after "breeding" of profiles of individual impurities.

It is a pleasure to acknowledge the contributions of I. L. Fernandes, J. Bouaziz, D. M. Crum, M. dos Santos Dias, M. Bouhassoune, I. GedeArjana, J. Chico and S. Blügel.

\*Support from EU Horizon 2020 via ERC-consolidator Grant No. 681405 DYNASORE.

**References**

- [1] I. L. Fernandes, M. Bouhassoune, S. Lounis, under review in Nature Communications, ArXiv:1906.08838 (2019).
- [2] M. Bornemann et al, J. Phys. : Cond. Mat. 31, 485801 (2019).
- [3] I. L. Fernandes, J. Bouaziz, S. Blügel, S. Lounis, Nature Communications 9, 4395 (2018).
- [4] F. dos Santos, M. dos Santos Dias, F. Guimaraes, J. Bouaziz, S. Lounis, Phys. Rev. B 97, 024431 (2018).
- [4] D. M. Crum, M. Bouhassoune, J. Bouaziz, B. Schweflinghaus, S. Blügel, S. Lounis, Nature Commun. 6, 8541 (2015).
- [5] M. dos Santos Dias, J. Bouaziz, M. Bouhassoune, S. Blügel, S. Lounis, Nature Commun. 7, 13613 (2016).

**PL07****Nouveau formalisme pour les ondes de Bloch de surface**Fadi I. Baida<sup>a</sup> et Maria-Pilar Bernal<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Département d'Optique P.M. Duffieux, Institut FEMTO-ST, UMR CNRS 6174, Université Bourgogne Franche-Comté, 25030 Besançon cedex, France,*

*\* email : fbaida@univ-fcomte.fr*

**Résumé**

En raison du nombre croissant de publications et d'applications basées sur l'exploitation des ondes de surface de Bloch (BSW) et des erreurs grossières commises et des approximations régulièrement utilisées pour évaluer les propriétés de ce type d'onde, nous jugeons extrêmement important de développer un formalisme adapté permettant d'extraire les informations pertinentes expérimentalement mesurables. Grâce à un calcul complet appuyé par un développement analytique, nous établissons une formule généralisée pour la longueur de propagation de l'onde qui diffère de celle utilisée habituellement dans la littérature. Nous démontrons également que le décalage de Goos-Hänchen devient une propriété extrinsèque qui dépend de la dimension du faisceau avec un comportement asymptotique limitant sa valeur à celle de la longueur de propagation. Le schéma théorique proposé permet de prédire certains résultats originaux liés à des erreurs sur l'angle d'incidence du faisceau et sur sa position par rapport à la structure. Ce formalisme peut être étendu pour décrire la réponse optique de toute structure résonante sensible à la polarisation et éclairée par un faisceau gaussien polarisé.

**Mots clés:** Ondes de Bloch, Cristaux photoniques, Ondes de surface, ...

**PL08****Electronic structure and plasmonic response of metal nanoclusters**

Franck Rabilloud

Université de Lyon, Institut Lumière Matière

Campus LyonTech La Doua, 69622 Villeurbanne, France

[Franck.rabilloud@univ-lyon1.fr](mailto:Franck.rabilloud@univ-lyon1.fr)[ilm.univ-lyon1.fr](http://ilm.univ-lyon1.fr)**Abstract**

Metal nanoparticles exhibit outstanding optical properties which have attracted much interest in terms of both experiments and computations because of their application outlooks which appear to be more and more promising. These unique properties have paved the way to a wide range of use in the field of electronics, chemistry, biosciences, etc. Particularly, the optical spectra of noble metal nanoparticles are characterized by a strong response in the UV-visible range, usually interpreted in the framework of classical optics in terms of plasmon excitations due to the valence  $s$  electrons.

State-of-the-art fabrication and characterization techniques are now able to experimentally control light-matter interaction at sub-nanometer scales. Thus theoretical schemes able to overcome the limits of the classical vision and to fully take into account quantum mechanical effects are needed. We will see that the Time-Dependent Density-Functional Theory (TDDFT) gives a framework to investigate the optical properties of small-sized metal nanoclusters for which the classical approaches are no longer valid. This approach gives a new description of the plasmon phenomenon from a quantum point of view.

In a recent joint experiment-theory investigation, we have showed that the plasmon band of silver nanoclusters in vacuum lies between 3.9 and 4.1 eV, and the variation with the size of the cluster reveals a peculiar electronic shell structure. The plasmon energy is highest for clusters with electrons numbers fully filling states (e.g. 1S, 1P, 1D, etc.). Our results are compared to very recent experimental data measured on clusters embedded in a rare gas matrix and in an oxide matrix. The effects of those

matrices over the cluster's optical response will be described and evaluated. We will also discuss recent results on alloyed nanoclusters.

### References

- [1] C. Yu, R. Schira, H. Brune, B. v. Issendorff, R. Schira, F. Rabilloud, W. Harbich, *Optical properties of size selected neutral Ag clusters: electronic shell structures and the surface plasmon resonance*, *Nanoscale*, 10, 20821-20827 (2018).
- [2] R. Schira, F. Rabilloud, *Localized Surface Plasmon Resonance in Silver Nanoclusters* Agn  $n=20-147$ , *J. Phys. Chem C* 123, 6205-6212 (2019) ; *Effects of the Rare-Gas Matrices on the Optical Response of Silver Nanoclusters*, *J. Phys. Chem. C* 122, 27656-27661 (2018).

## PL09

### Dislocations in III-nitride materials investigated by DFT calculations

Imad BELABBAS

Equipe de Cristallographie et de Simulation des Matériaux. Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse. Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia 06000, Algeria.

E-mail : imad.belabbas@univ-bejaia.dz

### Abstract

III-nitride compounds semiconductors, constituted by gallium nitride (GaN), aluminium nitride (AlN), indium nitride (InN) and their ternary and quaternary alloys are key materials for electronic and optoelectronic devices including light emitters such as LEDs and lasers, as well as high frequency and high-power electronic devices [1,2]. For optoelectronics, they offer the potential of bandgap engineering from near infrared to deep ultraviolet wavelengths, by tuning their alloy compositions [1,3]. Heteroepitaxial growth on structurally and thermally mismatched substrates is at the origin of the introduction of high densities of extended defects, mainly threading dislocations in III-nitride epilayers. Threading dislocations typical densities range from  $10^8$  to  $10^{10}$  cm<sup>-2</sup>.

Dislocations have been proven to have detrimental impact on the performance of GaN-based devices [4]. By introducing gap states, they were found to give rise to parasitic luminescence. They were also demonstrated to behave as strong non-radiative recombination centers, degrading light emission efficiency. By providing pathways to leakage currents, screw TDs were identified to be responsible for electrical shorts in electronic devices. When getting charged, dislocations act as scattering centers, limiting the mobility of charge carriers. Despite their harmful impact, GaN was found to be more tolerant to dislocations than conventional semiconductors. For instance, in the case of GaAs, a TD density as low as  $10^4$  cm<sup>-2</sup> is usually sufficient to prevent optical device operation.

In this conference, investigations on the impact of dislocations on different properties of III-nitride materials will be presented. These investigations were conducted in the framework of atomistic simulations based on Density Functional Theory (DFT) or empirical potentials. The presented results concern the prediction and the impact of the growth conditions or the growth direction on the atomic core configurations of dislocations in GaN, AlN and InN [5,6]. They concern also, the impact of dislocations on leakage currents in GaN [7,8], and the role of dislocations in the bulk n-type conductivity in InN [9]. Some results concerning the mobility of dislocations under electron beam irradiation [10] and the impact of dislocations on thermal conductivity of GaN [11] will be presented as well.

**Key words:** Dislocations, core configurations, mobility, thermal conductivity, GaN, AlN, InN, DFT, empirical potentials.

### References

- [1] M.T. Hardy, D.F. Feezell, S.P. Den Baars, and S. Nakamura, *Materials Today* 14, 408 (2011).
- [2] B. Jayant Baliga, *Semicond. Sci. Technol.* 28, 074011 (2013).

- [3] I. Gorczyca, T. Suski, N. E. Christensen, and A. Svane, *Cryst. Growth Des.* 12, 3521 (2012).
- [4] S. Keller, B.P. Keller, Y.F. Wu, B. Heying, D. Kapolnek, J.S. Speck, U.K. Mishra, S.P. DenBaars, *Appl. Phys. Lett.* 68, 1525 (1996).
- [5] I. Belabbas, A. Béré, J. Chen, S. Petit, M. A. Belkhir, P. Ruterana and G. Nouet. *Phys. Rev. B* 75, 1152201 (2007).
- [6] L. Pizzagalli, I. Belabbas, J. Kioseoglou and J. Chen, *Phys. Rev. Mat.* 2, 064607 (2018).
- [7] I. Belabbas, J. Chen and G. Nouet. *Comput. Mater. Sci.* 51, 206 (2011).
- [8] I. Belabbas, J. Chen and G. Nouet. *Comput. Mater. Sci.* 90, 71 (2014).
- [9] I. Belabbas, L. Pizzagalli, J. Kioseoglou and J. Chen. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**,15767 (2019).
- [10] I. Belabbas, I. Vasileiadis, J. Moneta, J. Smalc-kozirowska and G. P. Dimitrakopoulos, *J. Appl. Phys.* (submitted 2019).
- [11] K.Termentzidis, M. Isaiev, A. Salnikova, I. Belabbas, D. Lacroix and J. Kioseoglou *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 5159 (2018)

## PL10

### La lumière et le nano monde

Azzedine Boudrioua

Laboratoire de Physique des Lasers, Université Paris 13, France.

#### Résumé

Le développement des nanotechnologies et nanosciences connaît un essor important notamment grâce à l'arrivée à maturité de plusieurs outils technologiques qui permettent de d'imiter « Dame nature » en apprenant à agencer, organiser la matière atome par atome. Cela s'applique également aux sciences et technologies photoniques avec plusieurs questions suscitées par l'interaction du photon avec le monde nanométrique : comment confiner une onde optique dans un espace plus petit que sa longueur d'onde ? Quels matériaux utilisés ? Comment générer et manipuler la lumière dans ce nano-monde et quelles sont les applications possibles ?

Dans ce cadre, il sera notamment question du rôle de la plasmonique pour répondre à ces questions avec des exemples d'applications dans le domaine de la photonique organique.

## PL11

### Bulk photovoltaics: first-principles calculations using Wannier interpolation

Julen Ibanez Azpiroz

Universidad del País Vasco (UPV/EHU), Spain

#### Abstract

The bulk photovoltaic effect (BPVE), also known as the shift-current, is a nonlinear optical response that yields a net photocurrent in noncentrosymmetric crystals. Contrary to the conventional photovoltaic effect in p-n junctions, the BPVE occurs in homogeneous systems and the photovoltage attained is not limited by the band gap of the material. Although the theory of the BPVE is well established, its practical implementation is challenging because it involves a subtle Berry-phase-like quantity [1]. Here we present a Wannier-interpolation scheme for the calculation of the BPVE [2], recently implemented into the Wannier90 software package [3], which provides an efficient and accurate alternative. As an application, we analyze graphitic BC<sub>2</sub>N, a semiconductor made of alternating zigzag chains of carbon and boron nitride. The analysis shows that the relative parity of valence and conduction bands under mirror reflection determines whether the shift current flows parallel or perpendicular to the applied

electric field [4]. Furthermore, our calculations reveal an enhanced shift-current absorption in the visible range, which makes graphitic BC<sub>2</sub>N a prime candidate for future experimental studies.

**References**

- [1] J. E. Sipe and A. I. Shkrebtii, PRB **61**, 5337 (2000)
- [2] J. Ibañez-Azpiroz, S. S. Tsirkin and I. Souza, PRB **97**, 245143 (2018)
- [3] G. Pizzietal., arXiv:1907.09788 (2019)
- [4] J. Ibañez-Azpiroz, I. Souza and F. de Juan arXiv:1906.07627 (2019).

**PL12****Particle Physics: status and perspectives**

Djouadi Abdelhak

Laboratoire de Physique Théorique d'Orsay, Université Paris-Sud, France

**Abstract**

"High energy particle physics has witnessed a decisive progress this decade with the observation of the Higgs boson at the CERN Large Hadron Collider, a discovery which confirmed the Standard Model in the description of three of the four fundamental interactions in nature. I will first discuss the status of the model and its tests at present experiments. I will then describe its shortcomings and the extensions of the model that address some of them, such as super symmetry, extra space-time dimensions and composite models. I will finally summarise the perspectives for the search of the new physics implied by these extensions."

**Thème A**  
**Plasma et Lasers**



## Thème A: Plasma et Lasers Communications Orales

### CO.08

#### Satellite Spectra For Hydrogen Perturbed By Oscillating Fields

Ibtissem HANNACHI<sup>a,\*</sup>, Roland STAMM<sup>b</sup>

<sup>a</sup>PRIMALAB, Department of Physics, University of Batna 1, Algeria

<sup>b</sup>PIIM, Aix-Marseille Université-CNRS, centre Saint Jérôme, 13397 Marseille, France

\*email : pseudo@messengerie.com

#### Abstract

A Simple case for studying the effect of oscillating electric field on spectral line shapes in a plasma consists in taking a fixed magnitude  $E_0$  for the perturbing electric field  $E_0 \cos(\omega t + \phi)$ , with  $\omega$  and  $\phi$  the frequency and the phase of the field. Such a situation is observed in many laboratory plasmas when the oscillating field is created by external power systems in various electromagnetic frequency bands such as found with microwave generated (VHF, UHF, or microwaves), or laser radiation. For such a field, one expects the observation of a Blochinzew spectra [1], consisting of satellites separated by multiples of the oscillation frequency  $\omega$ . Using a simple model, we will study on Lyman lines the conditions which are required for observing such a spectra in various plasma conditions.

**Keywords :** Stark effect, Spectral line shape, Blochinzew spectra, oscillating field, satellite spectra.

**References :** [1] D. I. Blochinzew, Phys. Z. Sov. Union, 4, 501 (1933).

## Thème A: Plasma et Lasers Communications Posters

### CP.01

#### The structural, electronic, optical, thermal, and thermodynamic properties Studies of $Ba_{1-x}Ca_xS$ alloy using the (FP-LAPW) method

Bochra. Amimour<sup>a,\*</sup>, Menouba . Slimani<sup>a</sup>, Rachida. Khémissi<sup>a</sup>, Hocine. Meradji<sup>a</sup>, Sebti. Ghemid<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire LPR, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar, Annaba, Algeria

\*bouchraamimour@yahoo.fr

#### Abstract

In this work, the full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method was used to calculate the structural, electronic, thermal and thermodynamic properties of BaS and CaS compounds and their ternary mixtures,  $Ba_{1-x}Ca_xS$ . The local-density approximation (LDA), the Wu-Cohen generalized gradient approximation (WC-GGA) and the Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation (PBE-GGA) were used as the exchange-correlation potential. Moreover, the modified Becke-Johnson approximation was also used for the band structure calculations. We examined the composition effect on the lattice constants, bulk modulus and band gap. The microscopic origins of the band gap bowing were characterized in detail using the approach of Zunger and colleagues. Pressure and temperature effects on the lattice parameter, heat capacity, Debye temperature, Grüneisen parameter, and thermal expansion coefficient were predicted using the quasiharmonic Debye model. The thermodynamic stability of these alloys was investigated by calculating the excess enthalpy of mixing,  $H_m$ , and the phase diagram. It was shown that these alloys are stable at high temperature.

**Keywords :** First-principles calculations, band structures, optical properties, thermal properties

**CP.02****Effet conjugué de la non thermalité et des corrections d'ordre supérieur sur le soliton acoustique poussiéreux**

Nabil ARAB\* et Rabia AMOUR

Laboratoire de Physique Théorique, faculté de Physique, USTHB, B.P. 32, El Alia, Alger 16111.

\* email : nabilarabphysique@gmail.com

**Résumé**

La propagation des ondes solitaires dans un plasma non magnétisé non collisionnel peut être décrite par une équation de type K-dV. Cependant, les observations expérimentales ont montré que la propagation des ces ondes acoustiques solitaires, ne concordent pas avec leur homologue théorique décrite par l'équation K-dV. Des modifications de la théorie ont été alors suggérées pour améliorer la précision de la solution solitaire, à savoir, la prise en compte des corrections d'ordre supérieur dans la perturbation. C'est pourquoi ce travail consiste à chercher une nouvelle solution solitaire en tenant compte des corrections d'ordre supérieur. En particulier, nous analysons, d'une part, l'apport des corrections d'ordre supérieures par rapport à l'équation K-dV habituelle et d'autre part l'effet de la non thermalité ionique sur le soliton enveloppe acoustique poussiéreux et l'énergie qu'il transporte.

**Mots clés:** Plasma poussiéreux, Soliton acoustique poussiéreux, Ions non thermiques, Corrections d'ordre supérieure.

**CP.03****Study of Threshold Ablation of Recuperated Aluminium Alloys Irradiated by Nd: Yag Laser**

L. Baziz

<sup>1</sup>Departement of Science and Technology Abdelhafid Boussouf Mila University Center.

E-mail : leila1\_b@yahoo.fr

**Abstract**

In this work we studied the irradiation of recovered aluminum composition (% mass) is (72.02 Al, 13.05 Si, 6.34 Zn, 4.28 O, 2.08 Mg, 1.75 Cu, 0.48 Ni) by pulsed Nd:Yag laser ( $\lambda = 532$  nm) with a pulse duration of 15 ns and an energy of 50 mJ. The flux domains were separated for each type of treatment (surface treatment, cutting, welding, etching ...). The experimental results obtained show that the weakest fluxes correspond to the surface treatments on the other hand to cut or weld it is necessary to use the strong fluxes these last depend on the energy and the duration of pulsation.

**Keywords:** Nd:Yag laser, flux, aluminum recovered, irradiation.

**CP.04****Diffusion in quasi-one-dimensional strongly coupled system on a quasi-aperiodic substrate**A. Bekda<sup>a\*</sup>, M. Djebli<sup>b</sup><sup>a</sup>L PCQ, University of Tizi-Ouzou, BP17 RP, 15000 Tizi-Ouzou, Algeria<sup>b</sup>USTHB, Faculty of Physics, Theoretical Physics Laboratory, B.P. 32 Bab-Ezzouar, Algeria

\* email : bekdahmed@yahoo.fr

**Abstract**

The Using the molecular dynamics method, we studied the movement of highly coupled particles in a quasi-one-dimensional channel while being subjected to a quasi-aperiodic substrate.

The numerical resolution of the Langevin equation allows us to study the effects of particle density, temperature, particle charges, amplitude of the quasi-aperiodic substrate and the extent of the interaction potential between particles on the diffuse behaviour of the potential system.

In conclusion, by increasing the amplitude of the quasi-aperiodic substrate, there is a significant reduction in particle mobility, which, for a critical value of the amplitude of the substrate, leads to the adhesion of the particles at least to the substrate. Increasing the temperature of the system increases the mobility of the particles. Therefore, in order to obtain a rapid diffusion process, it is necessary to increase the temperature of the system and decrease the intensity of the substrate.

**Keywords:** Strongly coupled systems, Diffusion, plasmas.

**CP.34****Investigation and applications of laser-induced plasma spectroscopy technique**Fatma Bencherif<sup>a</sup>, Sid. Ahmed.Beldjilali<sup>a</sup>, Tewfik Baba-Hamed<sup>a</sup>, Ahmed Belasri<sup>a</sup><sup>a</sup>LPPMCA, USTOMB- Université des Sciences et de la technologie d'Oran Mohamed Boudiaf,

\* email : fatma.bencherif04@gmail.com

**Abstract**

Basic and applied research in complementary fields of design and processing of advanced materials and coatings using several different technologies. Detailed characterization of advanced materials and coatings from macro down to Nano-scale. Development of novel approaches and instrumentation in materials design, testing and characterization. Combination of e.g. micro- and Nano-structural studies, environmental degradation studies, metallography, optoelectronic characterization of micro and nanostructures, Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).

LIBS is a technique capable of fast and even *in-situ* and standoff elemental analysis. In LIBS, high-energy laser pulse is focused on sample surface to ablate small amount (few ng) and thus to generate luminous laser-induced plasma (LIP). Characteristic spectral lines detected in LIP radiation provide qualitative and quantitative information about chemical composition of investigated objects.

LIBS has several advantages, it allows for real-time and stand-off analysis of multielemental samples and does not require any sample preparation. This makes LIBS a promising technique for quality control that needs fast analysis of large amounts of samples.

**Keywords :** Laser plasma, LIBS, spectroscopy.

**References**

- [1] Beldjilali S A *et al.* Anal Bioanal Chem 400 2173-2183(2011)
- [2] Hermann J *et al* , Applied surface science 252 4814–4818 (2006)
- [3] Mercadier L *et al* ,J. Anal. At. Spectrom 28 1446-1455(2013)

**CP.35****Airy beam generation using acousto-optical cell : Acoustic wavelength effect**Abdeldjalil BENSTITI<sup>a\*</sup>, Kouider FERRIA<sup>a</sup>, Abd elhalim BENCHEIKH<sup>a,b</sup><sup>a</sup>Applied optics laboratory, Institute of optics and precision mechanics, University Ferhat Abbas setif1<sup>b</sup> Al Bachir Al Ibrahim University, Bordj Bou Arréridj

\* email : benstiti.abd.aldjalil@gmail.com

**Abstract**

A technique to generate a tunable Airy beam is presented. The technique is based on the interaction of an incident laser Gaussian beam with an ultrasonic wave in an acousto-optic cell. The latter could Taylor a Gaussian beam into many interesting shapes, However under some consideration, the incident Gaussian beam could be transformed into tunable Airy beam successfully using this technique. Perfect Airy beam distribution has been observed in propagation direction. In addition, a transverse shift has been also achieved when the acousto-optic parameters change.

**Keywords :** Airy beam, acousto-optic, laser shaping

**CP.36****Propriétés de luminescence par Up conversion des cristaux de CdF<sub>2</sub> codopés Tm<sup>3+</sup>/Yb<sup>3+</sup>**Sabrina BORDJ<sup>a</sup>, Madjid DIAF<sup>a</sup>, Reda FARTAS<sup>a,b</sup><sup>a</sup>Laser Physics, Optical Spectroscopy and Optoelectronics Laboratory,

Badji Mokhtar Annaba University, Algeria

<sup>b</sup>08 May 1945 Guelma University, 24000 Guelma, Algeria

E-mail: bordjsabrina23@gmail.com

**Résumé**

Les matériaux photoniques revêtent aujourd'hui une grande importance compte tenu de leurs multiples applications. Ils sont présents dans des domaines technologiques de pointe tels que les écrans

d'affichage, les lampes d'éclairage, la biophysique, les appareillages de communication, les lasers à l'état solide, etc. Les matériaux dopés aux ions de terres rares luminescentes occupent une place d'avant-garde parmi ces matériaux photoniques. Cela est dû aux propriétés uniques de la luminescence des ions de terres rares. De tels ions possèdent des transitions  $4f - 4f$  protégées par les orbitales externes remplies, ce qui entraîne une émission monochromatique nette et une longue durée de vie de luminescence. Les matériaux insérant ces ions se présentent sous la forme de cristaux, de verres et de vitrocéramiques ou sous la forme de nanoparticules ayant généralement des énergies maximales de phonons relativement faibles.

Dans ce contexte, nous nous intéressons à l'étude des propriétés de luminescence des monocristaux de  $\text{CdF}_2$  codopés avec des ions  $\text{Tm}^{3+}$  et  $\text{Yb}^{3+}$  selon différents processus d'excitation. Nous présentons les propriétés de fluorescence des cristaux de  $\text{CdF}_2$  en excitant directement les ions activateurs ou via les ions sensibilisateurs. Les propriétés spectroscopiques des principaux niveaux d'émission ont été étudiées et discutées.

**Mots Clés :** Lasers solides, luminescence, matériaux optiques, terres rares

### CP.37

#### Preliminary studies of VUV emission spectrum of the trivalent Dysprosium free ion ( $\text{Dy}^{3+}$ )

Anis CHIKH <sup>a\*</sup>, Djamel DEGHICHE <sup>a</sup>, Ali MEFTAH <sup>a,b</sup>, Omar LAMROUS <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie.

<sup>b</sup> LERMA, Observatoire de Paris-Meudon, PSL Research University, CNRS UMR8112, Sorbonne Université, Meudon F-92195, France

\* email : anis.chikh@ummo.dz

#### Abstract

The lanthanides are incorporated generally in crystalline matrices for applications in laser physics, quantum information and industry. The VUV emission spectra are produced and recorded using a high-resolution spectrograph at normal incidence with a vacuum sliding light source. The biggest challenge is to be able to predict and identify energy levels and transitions, which are necessary for the interpretation of the free ion spectra. Our analysis is based on the R.D. Cowan code (Los Alamos) to calculate theoretically the energy levels and their properties. Our main interest is on the spectrum of the trivalent Dysprosium free ion ( $\text{Dy}^{3+}$ ) produced in the spectral region of 940-2100 Å. By using the parameters found in the literature for elements of isoelectronic and isoionic sequences, the identification of levels and other properties are deduced at final step of least squares fitting for the odd and even configurations  $4f^9$ ,  $4f^8 6p$  and  $4f^8 5d 4f^8 6s$  respectively.

**Keywords:** Trivalent lanthanide, Dysprosium, Energy levels, Wave functions, Transition probabilities, Electronic configurations.

### CP.68

#### Contribution à l'étude de matériaux magnétiques $\text{Fe}_{92,4}\text{Si}_{3,1}\text{B}_{4,5}$ consolidés par SLM

R. Drablia <sup>1,\*</sup>, S. Alleg <sup>1</sup>, N.E. Fenineche <sup>2</sup>, J.J. Suñol <sup>3</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Magnétisme et Spectroscopie des Solides, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar Annaba, B.P. 12, 23000 Annaba, Algérie

<sup>2</sup> LERMPS, Université de Technologie de Belfort-Montbéliard (UTBM), 90010 Belfort, Cedex France

<sup>3</sup> Depart. de Física, Universitat de Girona, Campus de Montillivi, Girona 17071, Spain

Corresponding author: rimadrablia@yahoo.fr

#### Résumé

Les alliages  $\text{Fe}_{92,4}\text{Si}_{3,1}\text{B}_{4,5}$  ont été fabriqués par la fusion sélective par laser (SLM) en utilisant différentes puissances du laser (50 à 110 W) et différentes vitesses de balayage (0,1 à 1,5 m/s). La diffraction des rayons X, la microscopie électronique à balayage couplée à la spectroscopie à dispersion d'énergie, la spectrométrie Mössbauer, la microscopie à force atomique, le profilomètre 3D, le microduromètre, le magnétomètre à échantillon vibrant et l'analyse clorimétrique différentielle ont été utilisés pour étudier les propriétés structurale, microstructurale, mécanique, magnétique hyperfine et thermique. La

morphologie des échantillons élaborés par SLM montre globalement des zones fondues, des particules non fondues et interconnectées et des pores. L'affinement Rietveld du diffractogramme X de la poudre initiale révèle la présence d'une phase amorphe (64,45 %), de la phase  $\text{Fe}_{0,95}\text{Si}_{0,05}$  (11,32 %) et du borure  $\text{Fe}_2\text{B}$  (24,23%). Une nouvelle phase désordonnée  $\varepsilon'$ -FeSi cubique de structure B20 a été obtenue pour les échantillons fabriqués par SLM. Le borure  $\text{Fe}_2\text{B}$  et la phase  $\text{Fe}_{0,95}\text{Si}_{0,05}$  sont conservés de la poudre de départ. Le siliciure  $\varepsilon'$ -FeSi, la phase  $\text{Fe}_{0,95}\text{Si}_{0,05}$  et le borure  $\text{Fe}_2\text{B}$  exhibent des tailles de cristallites nanométriques. La spectrométrie Mössbauer confirme la formation du siliciure  $\varepsilon'$ -FeSi. L'augmentation de l'aimantation à saturation,  $M_s$ , peut être liée à l'appauvrissement de la phase  $\text{Fe}_{0,95}\text{Si}_{0,05}$  en atomes de silicium, et l'augmentation de  $H_c$  peut être due aux défauts cristallins induits par la déformation thermique. Les courbes DSC montrent la présence d'un pic endothermique vers 703°C attribuable à la température de Curie de solution solide Fe(Si). Les valeurs les plus élevées de la microdureté peuvent être dues à la formation d'une structure hétérogène avec un affinement considérable de la taille des cristallites. Les mesures de la rugosité des échantillons confirment que l'état de surface s'améliore avec l'augmentation de l'énergie (puissance élevée et vitesse faible).

**Mots clés:** Alliages Fe-Si-B ; Fusion sélective par laser; Microstructure ; Microdureté ; Propriétés magnétiques ; spectrométrie Mössbauer ; Propriétés mécaniques.

### CP.69

#### Rare earth doped fiber laser study: comparison between Erbium and ytterbium

Abir KEMMACHE<sup>1\*</sup>, Bouzid BELLOUI<sup>1</sup>, Abderrahim BELLOUI<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Applied Optics Laboratory, IOMP Institute, University of Setif 1, Setif, 19000, Algeria

\*email: kemmacheabir@yahoo.com

#### Abstract

This work is based on both the theory and simulation as well as the design of the erbium doped fiber amplifier and the erbium doped fiber laser and some materials. We are interested in changing the "signal index" parameters of the OSA signal and the type of the amplifier each time like Erbium and ytterbium, then we will do an analysis of the results by simulation with software (Optisystem). In the results we find that the laser signal is more powerful with the signal index 31 compared to those of 8 for the two types of rare earth (Erbium and Ytterbium). The OPM (Optical Power Meter) recorded a maximum output power of 15.60 dBm at 1525nm wavelength for Erbium simulation, and another 9.70 dBm at 1035nm wavelength for ytterbium simulation. It can be deduced that the laser signal power depends on the type of the amplifier, and each type has precise wavelengths for the weak or strong signal.

**Keywords :** fiber laser, Erbium, Ytterbium, fiber amplifier

### CP.70

#### ab initio calculations for structural and optical properties of $\text{MF}_2$ , $\text{PrF}_3$ and $\text{M}_{1-x}\text{Pr}_x\text{F}_{2+x}$

Rachida KHEMICI<sup>a</sup>, Zohra CHOUAHDA<sup>a</sup>, Bochra AMIMOUR<sup>a</sup>, Hocine MERADJI<sup>a</sup> and Sebti GHEMID<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Université Badji Mokhtar, Laboratoire LPR, PB. 12, 23000 Annaba, Algérie.

\*email : rachida.khemissi87@gmail.com

#### Abstract

$\text{M}_{1-x}\text{Pr}_x\text{F}_{2+x}$  (M = Sr, Cd and x = 0.25)[1] solid laser materials have been widely studied experimentally, but there is little theoretical study of these materials. Hence, in order to provide other reference for completing the existing data on these compounds, an ab-initio study was undertaken. The present work is devoted to study  $\text{PrF}_3$ ,  $\text{MF}_2$  and  $\text{M}_{1-x}\text{Pr}_x\text{F}_{2+x}$  using the full potential linearized augmented plane wave method FP-LAPW [2,3] as implemented in WIEN2k code [4] within density functional theory [4] to determine the structural and optical properties. The generalized gradient approximation WC-GGA is used for the structural and optical properties of  $\text{MF}_2$ , while the compounds  $\text{M}_{1-x}\text{Pr}_x\text{F}_{2+x}$  and  $\text{PrF}_3$  are characterized by 4f localized electrons of the rare earth. The different properties are calculated using the two approximations LSDA and LSDA + U. The calculated structural parameters are in agreement with

experimental and theoretical values. The optical properties, such as dielectric function, refractive index, absorption, reflectivity and energy loss function are also presented.

**Keywords:** ab initio calculations,  $M_{1-x}Pr_xF_{2+x}$ , WC-GGA, LSDA, WIEN2K code.

**References:**

- [1] Boiaryntseva, I.A., Gektin, A.V., Stryganyuk, G.B. et al, J Appl Spectrosc 589 (2012).
- [2] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S.B. Trickey, Phys. Commun., 59, 399 (1990).
- [3] D.J. Singh, Plane Waves, Pseudopotential and the LAPW Method, Kluwer Academic Publishers, Boston, Dordrecht, London (1994).
- [4] P. Blaha, K. Schwarz, J. Luitz, Wien'97, Vienna University of Technology, Improved and Updated Unix Version of the original Copyrighted WIEN-code, Which was published in : P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S.B. Trickey. Comput. Phys. Commun., 59, 399 (1990).

**CP.71**

**Démonstration expérimentale de la propagation de faisceaux laser d'ordre supérieur à travers un système optique à ouverture rectangulaire**

KARIMA MIHOUBI<sup>a\*</sup>, ABDELHALIM BENCHEIKH<sup>ab</sup>, AISSA MANALLAH<sup>a</sup> AND ANDREW FORBES<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire d'optique appliquée, Institut IOMP, Université de Sétif 1, Sétif, 19000, Algérie

<sup>b</sup>Département d'électromécanique, Université de BBA, BBA 34000, Algérie

<sup>c</sup>École de physique, Université du Witwatersrand, Private Bag X5, Johannesburg 2050, Afrique du Sud

\*email : mihoubi\_ka@yahoo.fr

**Résumé**

Le présent travail expérimental présenté dans cette intervention, a été effectué au sein de laboratoire « Structured Light » de l'université du Witwatersand d'Afrique de Sud, et qui est centré sur la mise en forme par une modélisation de la diffraction par des objets d'amplitude (ouverture rectangulaire) des faisceaux lasers d'ordre supérieur du type Hermite-Gaussien. Quand on veut forcer un laser à osciller sur un seul mode supérieur, il doit insérer un élément diffractif à l'intérieur de la cavité, dont chaque fois que nous avons besoin d'un faisceau avec un ordre défini nous devons changer l'élément diffractif, à partir de ce point, nous avons pensé à l'idée qui consiste à ; générer par exemple un seul mode d'ordre supérieur, et à partir de cet ordre de faisceau, nous utilisons une simple ouverture pour générer tous les ordres inférieurs à l'ordre le plus élevé.

**Mots clés:** mise en forme de faisceau, faisceau Hermite-Gaussien, ouverture rectangulaire, diffraction.

**CP.102**

**Étude par dynamique moléculaire d'un cristal coulombien bidimensionnel à une température proche de zéro.**

Fatma KERMOUN<sup>a\*</sup>, Madjid DJOUDER<sup>a</sup> Moh Djerdjjer MITICHE<sup>a</sup>, Omar LAMROUS<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou

\* email : fa\_kermoun@yahoo.fr

**Résumé**

Le plasma poussiéreux, ou plasma complexe, est certainement l'état de la matière le plus abondant dans l'univers. Il s'agit généralement, de particules microscopiques chargées négativement, qui baignent dans un plasma. Ils constituent l'essentiel de l'environnement terrestre au-delà de la haute atmosphère. L'une des propriétés intéressantes des plasmas poussiéreux est la formation de structures auto-organisées, appelées cristaux coulombiens. Elles sont dues aux fortes interactions entre les poussières et leurs confinement dans un espace réduit ainsi que la formation de structures cristallines par les poussières. En raison des fortes interactions des poudres entre elles, les plasmas poussiéreux peuvent être vus comme des milieux auto-organisés appelés cristaux coulombiens. Il existe plusieurs formes stables de ces structures: des cristaux à trois dimensions, à deux dimensions, en boules. Le présent travail porte sur la simulation par dynamique moléculaire du comportement d'un système bidimensionnel de grains de

poussières chargés négativement et fortement couplés. Notre système obéit à un modèle physique qui tient compte à la fois, de l'interaction entre les grains chargés et du potentiel de confinement parabolique. Cette étude nous a permis d'invalider le comportement en gaz parfait d'une mono-couche de cristal coulombien à deux dimensions rapporté dans la littérature.

**Mots clés :** Plasma poussiéreux, dynamique moléculaire, cristal coulombien, équation d'état, pression, densité.

### CP.103

#### Laser à puits quantique à base de $Cd_xZn_{1-x}Se/ZnSe$

Mohamed LAHOUAL<sup>a\*</sup>, Ahmed GUEDDIM<sup>a</sup>, Nadir BOUARISSA<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Materials Science and Informatics Laboratory, Faculty of Science, University of Djelfa, Algeria

<sup>b</sup>Laboratory of Materials Physics and Its Applications, University of M'sila, Algeria

\*email : lahoul70@yahoo.fr

#### Résumé

Ce travail est une étude de la diode laser à puits quantique contraint  $Cd_xZn_{1-x}Se/ZnSe$  qui permet une émission à 430 nm dans la région du bleu. Nous avons utilisé le matériau binaire  $Cd_xZn_{1-x}Se$  comme une zone active dans la diode laser à puits quantique contraint sur un substrat ZnSe.

Nous avons calculé par la suite le gain optique en fonction de la fraction molaire, longueur d'onde, la largeur de la zone active et la concentration des porteurs de charge ainsi que les valeurs optimales de la largeur de puits. La concentration des porteurs de charge et la fraction molaire ont été faite afin d'obtenir un gain optique maximale pour une émission autour du 430 nm.

**Mots clés:** laser, puits quantique, matériau II-VI, gain optique

### CP.104

#### Experimental and Theoretical study of a Kr dielectric barrier discharge excilamp; comparison and interpretation of chemical process.

Nadjet LARBI DAHO BACHIR<sup>a,b\*</sup>, Ahmed BELASRI<sup>a</sup>, Bruno CAILLIER<sup>c</sup>, Philippe GUILLOT<sup>c</sup>

<sup>a</sup>LPPMCA Plasma Physics Laboratory, Conductive Materials and Their Applications, University of Science and Technology of Oran Mohamed Boudiaf, Oran 31000, Algeria

<sup>b</sup>Department of Physics, Faculty of Exact and Applied Sciences, University of Oran 1 Ahmed Ben Bella, Oran 31000, Algeria

<sup>c</sup>DPHE, University of Toulouse, Champollion National University Institute, Place de Verdun, 81012 Albi Cedex 9, France

#### Abstract

This work presents an electric and kinetic study of homogeneous DBD in pure Kr. An experimental work and theoretical study of the radiative emission in the pure krypton lamp excited by dielectric barrier discharge is developed. The discharge development in homogeneous model approach using extended kinetic schemes is simulated. Stable dielectric barrier discharges were achieved between two identical insulated electrodes separated by 2 mm gap containing pure krypton at pressure from 129 to 460 mbar. The discharge was powered with a sinusoidal supply at frequencies from 10 to 50 kHz. Electrical characteristics of the DBD were studied. A spectroscopic and kinetic analysis of a pure krypton dielectric barrier discharge is reported here. The discharge emits radiations in UV, visible and IR range. In order to understand the emission process a theoretical interpretation of the results is given in the IR range by describing the chemical properties of the lamp. IR emission and a detailed study of kinetics allow to follow the population of metastable excited states of Krypton in  $(Kr^*(^3P_{0,2}))$ . A comparison between experimental and modeling results is presented.

**Keywords:** Plasma, dielectric barrier discharge, Krypton, UV Emission spectroscopy, experimental result.

**CP.105****Onde acoustique ionique solitaire dans un plasma collisionnel non extensif en présence de l'ionisation**Saliha MAYOUT<sup>a,b,\*</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté de physique, Université de Bab ezzouar, U.S.T.H.B, Alger<sup>b</sup>Ecole Supérieure des Sciences Appliquées d'Alger, Lycée Emir Abdelkader Bab El Oued, Alger

\* email : salihathairi@yahoo.fr

**Résumé**

Un plasma contenant des particules solides massives et chargées électriquement, de taille variant du nanomètre au micromètre, est appelé plasma poussiéreux. Initialement, l'intérêt suscité par les plasmas poussiéreux provenait de l'astrophysique, car l'Univers est rempli de grains de poussière se trouvant dans les nuages interstellaires, les queues des comètes [1] et les anneaux planétaires [2]. Les grains modifient les propriétés intrinsèques du plasma habituel (les échelles de temps et de longueur caractéristiques). Par conséquent, ils modifient les modes qui existent dans un plasma ordinaire à deux composantes, tels le mode acoustique poussiéreux et le mode acoustique ionique poussiéreux. Cependant, la plupart des études concernant ces deux modes considèrent des fonctions de distribution des vitesses Maxwelliennes, une situation qui pourrait être insuffisante pour la description des systèmes dotés d'interactions de longue portée, tels que les plasmas et les systèmes gravitationnels, où les états stationnaires hors équilibre existent. On se propose dans la présente communication d'étudier l'onde acoustique ionique poussiéreuse dans le cas d'un plasma non extensif, collisionnel et en présence de l'ionisation.

**Mots clés:** Plasma non extensif, soliton, collisions dans les plasmas, ionisation.**Références:** [1] T. Nitter et O. Havens, *Earth, Moon and Planets* 56, 7 (1992).[2] C. K. Goertz, *Rev. Geophys.* 27, 271 (1989).**CP.106****Non-thermal Plasma Discharge for CO<sub>2</sub> Splitting in CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> Gas Mixture: Kinetic Modelling to Elucidate the Chemistry and Improve the Performance**Larbi SAIDIA<sup>a\*</sup>, Ahmed BELASRI<sup>a</sup> and Salim BAADJ<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique des Plasmas, des Matériaux Conducteurs et leurs Applications (LPPMCA), Département de Physique Energétique, Faculté de Physique, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf

USTO-MB, 31000 Oran, Algérie

\* Email : saaidialarbi@live.fr

**Abstract**

The CO<sub>2</sub> molecule is the most compounds of greenhouse gases and too many constituents of planetary atmosphere, because of that, the investigation of CO<sub>2</sub> splitting in the gas mixture is focused by several experimental and theoretical works [1–10]. The goal of this study is modelling a kinetic approach in a homogeneous DBD discharge of CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> gas mixture to neutralize or transform toxic oxides as CO<sub>2</sub>; this modelling includes the plasma chemistry, the electrical circuit and the Boltzmann equation modules. In the first part, we developed a kinetic model based on a set of chemical reactions that takes into account charged particles, neutral particles and excited particles grouped together in one of several processes involved 113 reactions involving 21 atomic and molecular species in different states (neutral, excited or ionized). The second part concerns the calculating of the temporal evolutions of electrical and chemical characteristics. The influence of certain discharge parameters such as the applied electric voltage, the gas pressure, the capacity of the dielectric, the discharge frequency and the concentration of oxygen in the gas mixture on the density variation of CO<sub>2</sub> compared to the initial density of CO<sub>2</sub> in the discharge (CO<sub>2</sub> conversion) have been analyzed in the third part.

**Keywords:** Non-thermal plasma, CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> gas mixture, CO<sub>2</sub> splitting, Kinetic scheme.



**Thème B**  
**Photonique et Phononique**

## Thème B: Photonique et Phononique Communications Orales

### CO.07

#### Electronic structure, thermodynamic properties and phonon instabilities inducing structural phase transition in ScSb and ScBi : an ab initio study

Hadj Moulay Ahmed MAZOUZ<sup>a,b\*</sup>, Amina AICHE<sup>c,d</sup>, Abdelkader TADJER<sup>c,d</sup>

<sup>a</sup>Département de physique, Faculté des Sciences, Université M'Hamed Bougara de Boumerdes, 35000, Algérie.

<sup>b</sup>Unité de Recherche Matériaux, Procédés et Environnement (UR-MPE), Cité Frantz Fanon, Université M'Hamed Bougara de Boumerdes, 35000, Algérie.

<sup>c</sup>Département des Matériaux et du Développement Durable, Faculté des Sciences Exactes, Université de Sidi Bel Abbès, Sidi Bel Abbès, 22000, Algérie.

<sup>d</sup>Laboratoire de Modélisation et de Simulation en Sciences des Matériaux, Université de Sidi Bel Abbès, Sidi Bel Abbès, 22000, Algérie.

\* email : h.mazouz@univ-boumerdes.dz

#### Abstract

We have performed first principles study to investigate the electronic structure, the phase transition, the lattice-dynamics and the thermodynamic properties of ScSb and ScBi compounds. The ground-state parameters, i.e., lattice constant and the bulk modulus and the electronic structure are calculated using the full potential linearized augmented plane wave approach to the density functional theory within generalized gradient approximation for the exchange and correlation potential. Total energy calculations were also carried out using the pseudopotential method which allowed us to investigate the phonon dispersion spectrum from linear-response to density-functional theory. We studied also mechanism of pressure-induced phase transitions from the rocksalt (B1) to the CsCl(B2) structure. Additionally, we have developed ab initio lattice dynamics calculations to predict the pressure induced dynamical instabilities for ScSb and ScBi. Thermodynamic properties are also reported by using the quasiharmonic approximation.

**Keywords:** First-Principles, Scandium, Phonon, Thermodynamic properties, quasiharmonic approximation.

### CO.11

#### Résolution du problème de diffraction en nano-optique par la Méthode Modale de Fourier

H. YALA

Département de Physique, Faculté des Sciences Exactes, Université A. Mira de Bejaia

Laboratoire de Génie Electrique de l'Université A. Mira de Bejaia

Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou

#### Résumé

Les matériaux photoniques structurés à l'échelle de la longueur d'onde de la lumière ont nourris l'espoir de créer des structures (nano-composants optiques) avec des propriétés nouvelles. Depuis quelques décennies, ils sont devenus un champ de recherche très actif.

La résolution analytique des équations de Maxwell est rare; les solutions n'existent que dans certains cas canoniques où les géométries sont simples et présentant un certain nombre de symétries. Dès lors, l'étude de nanostructures électromagnétiques impose d'avoir recours à la modélisation numérique. Dans le cas particulier qui nous intéresse, à savoir l'optique diffractive à l'échelle nano, les théoriciens n'ont pas cessé de chercher les méthodes de calculs les plus efficaces possibles, car le problème est d'autant plus ardu du fait que les matériaux nano-structurés sont de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde; domaine raisonnable pour lequel il n'existe pas de solutions approchées fiables. Pour ce type de structures, il est nécessaire de résoudre les équations de Maxwell dans toute leur généralité. Un exposé

détaillé de toutes les méthodes existantes dépasse le cadre de cette communication. Néanmoins, nous donnerons un aperçu général des méthodes les plus populaires. Globalement, ces méthodes peuvent être classées en deux catégories : les méthodes opérant dans le domaine temporel (espace direct) telle que la FDTD pour *finite difference time domain* et celles opérant dans le domaine fréquentiel (espace réciproque de Fourier) telle que la méthode modale de Fourier ; FMM pour *Fourier Modal Method*.

Dans cette communication, nous allons nous intéresser tout particulièrement à la FMM. Cette méthode rigoureuse se distingue par sa simplicité de mise en œuvre, son efficacité et la rapidité des codes de calcul qui en sont issus et qui, depuis son introduction dans les années quatre-vingt, n'a cessé d'être améliorée. Elle a donné pleine satisfaction dans la simulation des problèmes de diffraction, de propagation, de guidage et dans les nouvelles thématiques en optique telles que la plasmonique et les métamatériaux. Nous allons exposer cette méthode en détail ; nous allons présenter son mode opératoire, les difficultés rencontrées ainsi que les solutions apportées. Nous présenterons, également, quelques applications importantes.

**Mots clés :** grating diffraction, Fourier modal method.

**Bibliographie:**

- [1]: G. Granet and B. Guizal, *J. Opt. Soc. Am.*, A 13 :1019 (1996).
- [2 ]: P. Lalanne and G. M. Morris, *J. Opt. Soc. Am.*, A 13 :779 (1996).
- [3]:L. Li, *J. Opt.Soc. Am.*, A 13: 1870 (1996).
- [4]: T. Vallius and M. Honkanen, *Opt. Express* **10**, 24 (2002).
- [5]: B. Guizal, H. Yala and D. Felbacq, *OPTICS LETTERS* / Vol. 34, No. 18 (2009)
- [6]: H. Yala, B. Guizal and D. Felbacq, *J. Opt. Soc. Am. A* Vol. 26, No. 12 (2009)

**CO.31**

**Propriétés vibrationnelles du système de nano-alliage de surface ordonnée Au/Cu (111)**

Bilal MENGUELTI<sup>a\*</sup>, Rabah CHADLI<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie

\* *bilal.menguelti@gmail.com*

**Résumé**

Dans ce travail de recherche nous avons effectué un calcul des propriétés vibrationnelles relative à la structure de nano-alliage de surface ordonnées Au/Cu (111). En utilisant la théorie de raccordement, associée au formalisme des fonctions de Green, évaluée dans l'approximation harmonique, les courbes de dispersions des phonons de surface, suivant les directions de hautes symétries,  $\Gamma M$ ,  $MK$ , et  $K \Gamma$ , ainsi que les densités d'états vibrationnelles correspondants, ont été déterminées. Les résultats obtenus révèlent l'apparition de nouvelles branches de phonons de surface, pour cette structure de nano-alliage de surface ordonnée, en comparaison avec le système de surface propre Cu (111). Les spectres des densités d'états vibrationnelles montrent que ces branches proviennent en grande partie de la deuxième couche atomique affectée par la présence des atomes de l'or dans la première couche atomique.

**Mots clés / Keywords :** Nano-alliage, Phonons de surface, LDOS.

## Thème B: Photonique et Phononique Communications Posters

### CP.05

#### Theoretical study on the tautomerization of formamide inside carbon nanotube

Bilal Achouri<sup>a,b</sup>, Yamina Belmiloud<sup>a</sup> and Meziane Brahim<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physico Chimie Théorique et Chimie Informatique (LPCTCI), Faculté de Chimie, Université Science and Technology Houari Boumediene (USTHB), Algiers, Algeria

<sup>b</sup>Centre de Recherche en Analyses Physico Chimiques (CRAPC), Algiers, Algeria

\* email : bilalach86@gmail.com

#### Abstract

Proton transfer (PT) occurring in small biomimetic systems, Formamide-Formamidic acid (FA-FI), is investigated in the gas phase and in single-walled carbon nanotubes by using the density functional theory and the ONIOM approach. Wherefore have we chosen the Formamid (FA) as the simplest real model for exhibiting the tautomerization in DNA. We have used QSPR method (Quantitative Structure-Property Relationship), based on geometry optimization and quantum chemical structural descriptors to illustrate the potential of using the confined space inside CNTs and will provide comprehensive information about CNT. All calculations have been studied using the Density Functional Theory (DFT) quantum calculations with the B3LYP functional.

**Mots clés / Keywords:** Carbon nanotube, Proton transfer, ONIOM, QSPR and DFT

### CP.06

#### Pressure effects on the Structural, Electronic and Optical Properties of ternary BeS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> alloys from first principal calculations

Ghania BELGOURMI <sup>a\*</sup>, Nadjat BENMEKIDECHE <sup>a</sup>, Abdelouahab BENTABET <sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Recherche: Caractérisation et Valorisation des Ressources Naturelles, Université de Bordj Bou Arreridj, 34000, Algeria

\* belgourmi\_1981@yahoo.fr

#### Abstract

In this paper, we aim to investigate the structural, electronic and optical properties of ternary BeS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> alloys using ab initio calculations within both the generalized gradient approximation and the local density approximation as well. In order to master the effect of the substitution atom in various physical properties, we have introduced the atomic concentration “x” on the ternary alloys. In fact, in this study we presented the lattice constant, the bulk modulus, the energy band structure and some optical quantities in function of the pressure. A good agreement has been remarked between our results and both the available theoretical and experimental data.

**Keywords:** Density Functional theory; ternary alloys BeS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub>; Electronic properties; the dielectric function.

### CP.07

#### Investigation of structural, electronic and elastic properties of ternary gallium chalcogenides CsGaQ<sub>2</sub> (Q = S, Se)

Nadjat BENMEKIDECHE <sup>a\*</sup>, Ghania BELGOURMI <sup>a</sup>, Abdelouahab BENTABET <sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire Caractérisation et Valorisation des Ressources Naturelles, Faculté SNVSTU, Université Bordj Bou Arreridj, 34000, Algeria

\* nbenmekideche1@gmail.com

#### Abstract

The first principle, pseudo-potential plane-wave (PP-PW) method has been used to calculate the structural, electronic and elastic properties of CsGaQ<sub>2</sub> (Q = S, Se) crystals in the -mC16 phase. The calculations are based on the density functional theory (DFT). The generalized gradient approximation (GGA) is used for the exchange- correlation energy. The calculated equilibrium lattice constants (*a*, *b*

and  $c$ ), angle  $\beta$  are in good agreement with the available experimental data. We have calculated and analyzed the energy gap, band structure and density of states. The electronic structure calculation demonstrates that crystals are direct-gap semiconductors. The single-crystal elastic constants  $C_{ij}$  are determined using the stress-strain method. The polycrystalline bulk modulus  $B$ , shear modulus  $G$ , Young's modulus  $E$ , Poisson's ratio  $\nu$ , and elastic anisotropy  $A^U$  are determined based on the calculated  $C_{ij}$ . Our results indicate that  $\text{CsGaQ}_2$  ( $Q = \text{S, Se}$ ) can be classified as brittle materials.

**Keywords:** Density functional theory,  $\text{CsGaS}_2$ ,  $\text{CsGaSe}_2$ , electronic structure, elastic constants

### CP.08

#### Thermal conductivity and scattering properties by lamellar structure with different thicknesses

M. Boucherrab<sup>(a)</sup>, R. Tigrine<sup>(a,b)</sup>, A. Khater<sup>(b)</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université de Tizi-Ouzou, 15000 Tizi-Ouzou, Algérie.

<sup>b</sup>Institut des Molécules et des Matériaux du Mans UMR 6283, Université du Maine,

72085 le Mans, France.

\*mali\_bou@yahoo.fr

#### Abstract

In this work, we develop an analytical and numerical formalism to study the scattering properties induced by the embedded nanostructures in inhomogeneous crystalline and the associate thermal conductivity. Also the nature of the defect and this configuration influence the coefficients of reflection, transmission and conductance of elastic wave spectra in the system waveguide model. One solves this problem by the matching approach and Newton dynamical equation which are detailed in order to describe the complete evanescent and the propagating fields in the bulk. The theoretical formalism using simultaneously the matching method, Landauer and Buttiker mathematical framework are used to determine the reflection and transmission coefficients and their associate phononic conductance of perturbed domain. Furthermore the associate thermal conductivity is determined as function temperature and the elastic constant of the behaviour of perturbed domain. Furthermore the numerical calculations are presented and illustrated as function of the different parameters occurring in the model. The fluctuations in the conductance spectra are related to Fano resonances due to the coherent coupling between travelling phonons and the localized vibration modes at the lamellar structures.

**Keywords:** thin films, elastic waves, nanostructures, matching formalism, thermal conductivity, Landauer-Buttiker approaches.

### CP.38

#### Équivalence entre le raccordement de la fonction d'onde et la fonction de Green atomique: la relation de Fisher-Lee généralisée

H. BOUMRAR<sup>a\*</sup>, H. ZENIA<sup>a</sup> et M. HAMIDI<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ), Université de Tizi-Ouzou, Algérie

\*hociboumrar@yahoo.com

#### Résumé

Nous présentons l'équivalence entre les deux approches les plus utilisées pour le calcul des coefficients de transmission des phonons : le raccordement de la fonction d'onde (WFM) et la fonction de Green atomique (AGF). Notre objectif principal est d'extraire des opérateurs calculés dans le formalisme de Green en fonction des matrices de Bloch définies dans le formalisme WFM. Ceci nous permet de construire les matrices des vitesses de groupe qui seront utilisées pour décomposer la formule de Caroli et obtenir les coefficients de transmission individuels. L'avantage de cette décomposition est de généraliser la relation de Fisher-Lee qui donne une vision claire et détaillée de la contribution des branches des phonons acoustiques et optiques à la conductance thermique de l'interface.

**Mots clés / Keywords :** transport mésoscopique, coefficients de transmission individuels, fonctions de Green.

**CP.39****Temperature annealing effect of europium electrodeposited on silicon nitride**A. Brik<sup>a\*</sup>, K. Bekhedda<sup>b</sup>, B. Benyahia, A. Manseri, B. MahmoudiCentre de Recherche en Technologie des Semi-conducteurs pour l'Energétique (CRTSE)  
2 Bd Frantz Fanon, B.P.140 Alger-7 Merveilles, Algiers (Algeria), Tel & Fax: +213 21433511

\*brikafaf@yahoo.com

**Abstract**

In this work, we report on the electrochemical deposition of Eu-doped silicon nanostructures grown on silicon rich SiNx:H films (SRSN). The applied doping process consists in a simple electrochemical deposition technique followed by a high temperature annealing step.

Based on electrochemical relationships known in aqueous solution we realized analyses based on the concentration of the europium solution used.

We used several means of characterizations. We started, first, with the presentation of SEM and DRX characterization results which confirm the successful insertion of Eu<sup>3+</sup> in the silicon nitride.

The characterization by photoluminescence of europium doped based on heat treatment conditions show that oxidation at 900 ° C for one hour under O<sub>2</sub> followed by an annealing at 1000 ° C under N<sub>2</sub> for 2 hours allows having a best luminescence of europium ions.

The results presented in this study indicate that Silicon rich Silicon nitride doped with europium is a promising material candidate to the development of a silicon-based light source, particularly for visible light emitting applications.

**Keywords:** Europium, Siliconnitride, electrochemistry, photoluminescence (PL).

**CP.40****Microscopie assistée par microsphère**Assia Guessoum<sup>a\*</sup>, Nacer Eddine Demagh<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire d'Optique Appliquée LOA, Institut d'Optique et Mécanique de Précision, Université de Setif 1\* email : [assiademagh@yahoo.fr](mailto:assiademagh@yahoo.fr); [assiademagh@univ-setif.dz](mailto:assiademagh@univ-setif.dz)**Résumé**

La microscopie optique est une prouesse scientifique atteinte, qui a révolutionné, particulièrement, les sciences de la vie. La résolution, principale caractéristique des microscopes, est une limite physique due à la diffraction. Cette dernière limite la taille des objets observables à une demi-longueur d'onde ( $\lambda/2$ ) de la lumière de l'éclairage [1]. Cependant, des techniques outre passant cette limite sont apparues. En 2014, le Prix Nobel de chimie a été décerné à Eric Betzig, Stefan W. Hell et William Moerner pour leurs travaux sur la microscopie à déplétion par émission stimulée (STED) pour Stimulated Emission Depletion, qui a donné une nouvelle dimension à la microscopie optique par l'exploitation de molécules fluorescentes. Malgré leur apport, ces techniques ne sont pas totalement invasives. Maintenant, il est possible d'atteindre une résolution latérale sub-lambda, inférieure à 30 nm [2]. Elle repose sur le dépôt des microsphères, dite Microscopie optique assistée par microsphère. Elle consiste à placer des microsphères de taille micrométrique (de ~3 à 80µm) sur la surface de l'échantillon à étudier et l'observation se fait à travers ces microsphères [3]. Dans notre travail nous avons montré que les mesures du « pas » d'un disque Blu ray ( $<\lambda/2$ ) en utilisant le microscope AFM et un microscope optique assisté par microsphères en titanate de baryum et soda lime sont en parfaite accord.

**Mots clés / Keywords :** Microscopie, microsphère, super résolution, limite de diffraction

## CP.41

**Conception of a new topology of wavelengths demultiplexers based on 2D photonic crystals for the separation of wavelengths 1.31 $\mu$ m and 1.55 $\mu$ m**

F. Lallam, H. AbriBadaoui, and M. Abri, L. Benseddik

STIC Laboratory, Faculty of Technology, University of Tlemcen, Algeria.

*fa.lallam72@gmail.com***Abstract**

Photonic crystals (PCs) are promising candidates for the realization of optical interconnections since they make it possible to manipulate light on a sub-micron scale. (PCs) are dielectric structures whose refractive index is periodically modulated at the wavelength scale, influencing the propagation of electromagnetic waves within the structure [1]. Because of this periodicity, the (PCs) have a unique optical property: the photonic band gap (BIP) in which no electromagnetic mode can propagate. It is this property that makes them interesting for many applications in the field of electromagnetic waves, optoelectronics and optical telecommunications. Compared to conventional optical devices, PCs-based optical devices have attracted a lot of interest because of their compactness compared to conventional devices, at their high operating speed, their best containment, their integration and the fact that the performance of the device is not affected by its miniaturization. Optical selective filters are among the most important components of telecommunication systems. They make it possible to extract a precise wavelength of a particular channel in a data stream without affecting the other channels. These are advantageous candidates for the realization of a new generation of demultiplexers [2], [3]. Among several topologies that have been studied, the structure that allowed us to obtain the desired and encouraging results is an optimized  $1 \times 2$  Y-junction, composed of eight selective filters with inclusions with different radii. The design of our dual demultiplexer for 1.31 $\mu$ m and 1.55 $\mu$ m wavelengths was carried out using the FDTD-2D method on the one hand for solving the Maxwell equations in order to study the propagation of electromagnetic waves at within CPs and on the other hand, the Planes Waves method for schematization and analysis of band diagrams in order to make a judicious choice of the geometric and physical parameters of the CPs in order to use them in the composition of the selective filters.

**Keywords :** Photonic crystals, integrated optics,  $W_1^k$ A guide, Demultiplexer,  $1 \times 2$  Y junction, selective filter, FDTD-2D, PWE, triangular lattice.

## CP.72

**Optimizing the Performance of Grating Refractive Index Sensor Based on Guided-Mode Resonance**Sabrina MESLI<sup>a\*</sup>, Mahdi HAMIDI<sup>a</sup>, Fadi Issam BAIDA<sup>b</sup>, Abderrahmane BELKHIR<sup>a</sup>,<sup>a</sup>Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, Algérie<sup>b</sup>Département d'Optique P.M. Duffieux, Institut FEMTO -ST UMR 6175 CNRS, Université de Bourgogne et Franche-Comté, 25030 Besançon Cedex, France.*\* email: sabrina.mesli@ummto.dz***Abstract**

We report in this work the improvement of the sensitivity ( $S$ ) and the figure of merit ( $FOM$ ) for a refractive index sensor based on guided-mode resonance (GMR) through a dielectric grating. Transmission spectra of the GMR sensor are calculated using the Finite-Difference Time-Domain (FDTD) method for a periodic grating of titanium dioxide  $TiO_2$  with varied height  $H$  from 100 to 500 nm. The results show that, for different heights, the sensitivity of the GMR sensor can reach up to 550 nm/RIU while the FOM can reach up to 571 RIU<sup>-1</sup>.

**Keywords:** Guided-mode resonance, Refractive index sensor, Grating, FDTD.

**CP.73****Simulation numérique d'une cellule solaire a hétérojonction InGaP/GaAs avec couche BSF et couche fenêtre.**Mohammed Zakaria MISSOURI <sup>a\*</sup>, Ahmed BENAMARA <sup>b</sup>, Hassane BENSLIMANE <sup>c</sup><sup>a</sup>Laboratoire Physique et Dispositifs à Semi-conducteurs(LPDS), Département des sciences de la matière, Université Tahri Mohamed Béchar 08000, Algérie.<sup>b</sup>Laboratoire de chimie physique des matériaux avancés (LPCMA), Département de Physique, Université de Djilali Liabes, BP 89, Sidi-Bel-Abbès 22000, Algérie.<sup>c</sup> Laboratoire Physique et Dispositifs à Semi-conducteurs(LPDS), Département des sciences de la matière, Université Tahri Mohamed Béchar 08000, Algérie.

\* email : zakienergie08@gmail.com

**Résumé**

La conversion photovoltaïque est la transformation directe d'Énergie solaire photonique en Énergie électrique de type continue (DC), Le problème est de savoir comment exploiter les matériaux capables de ce processus avec un rendement de conversion très rentable.

Les matériaux des colonnes III-V du tableau périodique et leurs alliages sont très attrayants car elles offrent une grande flexibilité dans l'énergie de la bande interdite tout en étant adaptés leurs paramètres de maille qui sont fournies de meilleures propriétés physiques, électriques et mécaniques.

Dans cette étude, nous avons proposé de simuler numériquement par l'interface AMPS 1D un modèle d'une cellule solaire a hétérojonction npp+ à base d'InGaP/GaAs avec couche arrière fortement dopée BSF et une couche avant a une grande bande interdite.

La configuration optimale de cette cellule montre un rendement de 28.817 % sous le spectre AM1.5G et un soleil.

**Mots clés:** Matériaux III-V, Hétérojonction, couche BSF, AMPS 1D.

**CP.74****Absorption enhancement in thin-film amorphous silicon in solar cells**Boumediene SADOUN <sup>\*</sup>, Souheil MOUETSI

Department of Electrical Engineering, Faculty of Sciences and Applied Sciences, University Larbi ben M'hidi of OumElbougghi, Algeria

\* email : boumediene.sadoun93@gmail.com

**Abstract**

Photovoltaic (PV) technology is considered to be a promising technique for solar energy utilization and has already achieved wide applications for space and terrestrial power generation. Photonic crystals, are periodic dielectric structures that have a band gap that forbids propagation of a certain frequency range of light. This property enables one to control light with amazing facility and produce effects that are impossible with conventional optics. PhCare described exactly by Maxwell's Equations, which we can solve by the application of massive computational power. solar cell is a semiconductor component that converts incident illumination into electrical energy. The solar cell is a pn junction whose operation is based on the absorption of solar light output, the generation and collection of charges. In recent years, progress has resulted in better solar cells with a a-Si absorber layer between 2.5 and 3  $\mu\text{m}$  thick, and an energy gap in the 1.2- 1.3 eV range exceeding 20% efficiency and having reached new world record of 20.3% [1]. A a-Si solar cell resulted in a maximum efficiency of 19% [2].

The objective of this work was the study with numerical modeling of a-Si tandem solar cells. In our study, we found that the use of a-Si in the manufacture of solar cell is of great importance in the industrial field. The aim of our work is based by the Rigorous coupled-wave analysis method (RCWA). We used geometric parameters such as period 0.42  $\mu\text{m}$ , thickness 0.55  $\mu\text{m}$  and the free space wavelength 2.95, and we put the substrate on the glass (refractive index is 1.50). We find a noticeable improvement in The visible spectrum between 0.38  $\mu\text{m}$  to 0.78  $\mu\text{m}$ . From this we find that a-Si is an



effective material to improve the absorption process in the solar cell and of course to strengthen the yield.

**Keywords :** absorption, Maxwell's Equations, photonic crystals, solar cell.

### References

- [1] P. Jackson, D. Hariskos, E. Lotter, S. Paetel, R. Wuerz, R. Menner, W. Wischmann and M. Powalla, Prog. Photovolt. Res. Appl. 19(2011)894-897.  
 [2] K. Ramanathan, M.A. Contreras, C.L. Perkins, S. Asher, S.F. Hasoon, J. Keane, D. Young, M. Romero, W. Metzger, R. Noufi, J. Ward, A. Duda, Prog. Photovolt:Res. Appl 11 (2003) 225.

### CP.75

#### Broadband optical parametric generation in nonlinear photonic crystals of 2D-PPLN

Zohra Yellas<sup>a\*</sup>, Mahmoud-Riad Beghoul<sup>a</sup>, Safia Ousaid-Mohand<sup>b</sup> and Azzedine Boudrioua<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire d'Etudes des Matériaux (LEM), Université de Jijel, OuledAissa, 18000, Algérie.

<sup>b</sup>Laboratoire de Physique de Lasers CNRS UMR 7538, Université Paris 13, Sorbonne Paris Cité, Villetaneuse, France

\*email : illaszohra@yahoo.fr

### Abstract

In this work, we numerically study broadband optical parametric generation in two-dimensional nonlinear photonic crystals. This study is based on theoretical analyzes to develop sources able of emitting a broad range of wavelengths. It is found that the parameters of the photonic crystal and more specifically the angle of incidence of the pump beam act on the phase matching conditions to generate any wavelength contained in the range of transparency of the material. The numerical results show that a broadband spectrum can be obtained in the range of 700 nm – 1064 nm by using hexagonal lattice 2D-PPLN structure.

**Keywords :** Nonlinear photonic crystals, Optical parametric generation, 2D-PPLN, Broadband source.

### CP.76

#### Conception par FDTD d'une lame demi-onde dans la gamme optique à base de métamatériau biréfringent

Thinhinane ZEGHDOUDI<sup>\*a</sup>, Zahia KEBCI<sup>a</sup>, Abdelaziz MEZEGHRANE<sup>a</sup>, Abderrahmane BELKHIR<sup>a</sup>

and Fadi Issam BAIDA<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, BP 17 RP, 15000 Tizi-Ouzou, Algérie.

<sup>b</sup> Département d'optique P. M. Duffieux, Institut FEMTO-ST, UMR 6174 CNRS Université Bourgogne Franche Comté, 25030 Besançon cedex France.

\*email : thinhinane.zeghdoudi@ummto.dz

### Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié un réseau périodique sublongueur d'onde composé de deux ouvertures rectangulaire et coaxiale gravées dans un film en argent dans le but de concevoir des lames biréfringentes dans le domaine optique. Cette étude a été réalisée à l'aide d'un code maison FDTD où la dispersion du métal est décrite par le modèle de Drude à deux points critiques (DCP). La particularité du mode TEM de la cavité coaxiale, qui peut être excité à des longueurs d'onde élevées, a permis de concevoir une plaque demi-onde dans le domaine optique.

**Mots clés:** Métamatériaux, biréfringence artificielle, lame demi-onde, FDTD.

**CP.164****Propriétés vibrationnelles d'une interface métallique Cu/Pt (100)**Fazia LEKADIR<sup>a\*</sup>, Rachid TIGRINE<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, université Mouloud MAMMERRI de Tizi-Ouzou<sup>b</sup> Université Ahmed Draia Adrar

\*fazialekadir@yahoo.fr

**Résumé**

La demande du marché dans le domaine des matériaux multifonctionnels est en croissance continue. Face à cette situation, les scientifiques essayent de trouver des matériaux innovants, en combinant différents types de matériaux. La plupart des travaux sont tournés vers l'exploration des interfaces obtenues par l'assemblage de différents films et couches atomiques. Cette voie extrêmement prometteuse s'appuie sur le fait que certaines propriétés des matériaux sont intimement liées à leur structure. Dans cette communication, nous allons présenter une étude vibrationnelle d'une interface métallique de type A/B dans des structures cfc [100]. Nous avons calculé la relation de dispersion pour un guide d'ondes parfait et aussi les états localisés au niveau de cette interface en considérant les différents cas de la constante élastique, après nous avons calculé les mêmes grandeurs pour une interface métallique Cu/Pt, nous avons aussi calculé les densités d'états associées aux sites localisés dans la zone perturbée.

**Mots clés:** Interfaces et surfaces métalliques- Etats localisés et VDOS Dynamiques des nanostructures.

## **Thème C**

# **Nanomatériaux : Propriétés et Applications**

## Thème C Nanomatériaux Propriétés et Applications Communications Orales

### CO.01

#### Investigation of the physical properties of Fe/Si for use in a Cu/Fe/Si solar cells contact

Mourad MEBARKI<sup>a,\*</sup>, Abdelhamid LAYADI<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Centre de Recherche en Technologie des Semi-conducteurs pour l'Energétique (CRTSE), 02, Bd Frantz Fanon, BP 140 Alger 7- Merveilles 16038, Algeria

<sup>b</sup>L.E.S.I.M.S, Département de Physique, Université Ferhat Abbas, Sétif 1, 19000 Sétif, Algeria

\*email : [mouradph@gmail.com](mailto:mouradph@gmail.com), [Mebarki.Mourad@crtse.dz](mailto:Mebarki.Mourad@crtse.dz)

#### Abstract

One of the drawbacks of the copper metallization, i.e. Cu/Si, for solar cells is the tendency of the metal to diffuse into silicon. This can deteriorate the P/N junction. Thus, a diffusion barrier is necessary. Iron has been found to be a potential candidate to be used as a barrier between Cu and Si. Before the fabrication of the Cu/Fe/Si contact, it is useful to investigate the properties of the Fe/Si first and this is the objective of the present work. We have studied the variation of the electrical properties with the Fe thin film thickness  $t$  and the deposition rate. The resistivity  $\rho$  values range from 8 to 36  $\mu\Omega\cdot\text{cm}$ . Interesting behaviors of the square resistance  $R_L$ ,  $\square\square\square$  and the coefficient  $R$  are seen as a function of  $D/t$ , where  $D$  is the grain size. Also, these nanometric Fe films are characterized by a uniform surface with a relatively low surface roughness, a small strain (less than 1% in magnitude) and a sharp interface with no interdiffusion between Fe and Si; these are also good qualities for Fe to be used as a barrier between Si and Cu.

**Keywords** :electrical properties, Fe, silicon, solar cells, contact.

### CO.02

#### Propriétés structurales électroniques et magnétiques des petits agrégats d'argent purs et dopés par un atome de brome

Yamina CHEBALLAH<sup>a,\*</sup>, Hamza KELLOU<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, B.P. N°17 RP, 15000 Tizi-Ouzou, Algérie.

\*email : [Yamina\\_Cheballah@yahoo.fr](mailto:Yamina_Cheballah@yahoo.fr)

#### Résumé

Ce travail porte sur l'étude ab-initio des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des agrégats d'argent purs et dopés par un seul atome de brome à l'état libre. Les calculs ont été effectués à l'aide du code VASP, basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité. Nos résultats montrent que le processus de croissance en trimères est présent dans les structures étudiés. De plus, l'atome de brome a tendance à s'adsorber dans les positions pontées. Les résultats de l'affinité électronique et du potentiel d'ionisation, en fonction de la taille de l'agrégat ( $n$ ), ont mis en évidence la grande stabilité des agrégats dopés comparativement aux agrégats purs pour  $n$  pair ainsi que les agrégats dopés pour  $n$  impair. Le moment magnétique total des agrégats  $\text{Ag}_n\text{Br}$  diminue pour  $n$  impair et inversement pour  $n$  pair, tandis qu'il augmente pour  $n$  impaire et inversement pour  $n$  pair dans le cas des agrégats  $\text{Ag}_n$ .

**Mots clés** :bromure d'argent, agrégats, calculs ab-initio, structure électronique.

## CO.12

**Study of a subwavelength C-shaped waveguide for a nano coupler design**Fadhila CHEHAMI<sup>a\*</sup>, Abderrahmane BELKHIR<sup>a</sup>, Omar LAMROUS<sup>a</sup><sup>a</sup> *Laboratoire de Physique et Chimie Quantique Université Mouloud Mammeri Tizi Ouzou BP N°17 RP 15000 Algerie**\*email: fadhila.chehami@ummto.dz***Abstract**

This study presents the design and simulation of a tapered coupler formed with C-shaped waveguides. First, the effect of geometrical parameters of a C-shaped waveguide on the cutoff wavelength of its fundamental mode TE<sub>10</sub> was investigated. Second, conditions necessary to coupling between two C shaped cavities were determined. Finally, transmission and confinement calculations are carried out for different values of the number and height of the different wave-guides forming the tapered coupler. The results obtained show that it is possible to guide and confine the light using these couplers.

**Keywords:** C-shaped waveguide, fundamental mode TE<sub>10</sub>, confinement

## CO.14

**TiO<sub>2</sub>:Eu<sup>3+</sup> films for temperature sensor applications derived by sol-gel technique**Abdelkader Nebatti<sup>\*,1-3</sup>, Christian Pflitsch<sup>1</sup>, Burak Atakan<sup>1</sup><sup>1</sup> *Thermodynamics, IVG, Mechanical Engineering, University of Duisburg-Essen, Campus Duisburg, Lotharstr.1, D-47057 Duisburg, Germany.*<sup>2</sup> *Laboratoire de Théorie et Simulation des Matériaux, Université Oran I Ahmed Ben Bella, Oran, Algeria*<sup>3</sup> *University Center Belhadj Bouchaïb, Ain Témouchent, Algeria**E-mail: abdelkader.nebatti@daad-alumni.de***Abstract**

It is well known that thermographic phosphors can be used as an optical method for the surface temperature measurement. For this application, the temperature-dependent luminescence properties of europium (III)-doped anatase (TiO<sub>2</sub>: Eu<sup>3+</sup>) thin films were studied. The films were prepared by the sol-gel method using dip coating technique. The structures of the films were determined by X-ray diffraction (XRD). The excitation and the emission spectra indicate that the red characteristic emission of TiO<sub>2</sub>: Eu<sup>3+</sup> occurring afterultraviolet excitation due to <sup>5</sup>D<sub>0</sub> → <sup>7</sup>F<sub>2</sub> electric dipole transition is the strongest. The decay time constant of the exponential emission decay under UV excitation with a Nd:YAG laser (355 nm, f=10Hz) showed temperature dependency in the range from 200°C up to 350°C. Temperature dependency was measured for emission from the transition <sup>5</sup>D<sub>0</sub> → <sup>7</sup>F<sub>2</sub>. The results demonstrate that anatase doped europium (III) can be considered as a thermographic phosphor. Finally, it has been found that the lifetime did not show a significant dependency on europium concentration.

**Keywords:** Anatase, Europium, Phosphorescence lifetimes, Surface temperature measurement. Thermographic Phosphor.

**CO.16****Analyse et caractérisations structurales des couches minces de ZnO/Si déposées par pulvérisation cathodique à magnétron: par diffraction des rayons X (DRX) et par microscopie électronique à balayage (MEB)**Leila GHALMI <sup>a</sup>, Souhila BENSMAINE<sup>b</sup><sup>a,b</sup>Unité de Recherche Matériaux et Énergies Renouvelables (URMER). Université de Tlemcen (UABT). BP n°119. Tlemcen. 13000. Algérie.\* e-mails : [Ghalmileila2017@gmail.com](mailto:Ghalmileila2017@gmail.com); [s\\_bensmaine@yahoo.fr](mailto:s_bensmaine@yahoo.fr)**Résumé**

L'oxyde de zinc ZnO est un matériau binaire, semi-conducteur à large gap direct 3,3 eV. Vu ses bonnes propriétés optoélectroniques, les couches minces trouvent plusieurs applications telles que : cellules solaires, capteurs piézoélectrique, guides d'ondes...etc.

Les films minces ZnO peuvent être élaborés par plusieurs techniques, il faut citer : spray pyrolyse, évaporation thermique, pulvérisation cathodique, sol-gel, ablation laser et autres. Nos couches ont été déposées par la pulvérisation cathodique à magnétron sur des substrats de silicium.

Dans ce travail, nous avons fait une étude analytique et morphologique sur des structures ZnO/Si avec deux types de caractérisations structurales dont la première par diffraction des rayons X, disponible au sein de notre Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables URMER de Tlemcen et la deuxième par la microscopie électronique à balayage MEB, installé au niveau de notre département de physique, faculté des sciences, université de Tlemcen. Nous avons constaté que tous les films ZnO constituant les structures ZnO/Si, possèdent une bonne cristallinité avec un aspect colonnaire bien déterminé. Les colonnes sont perpendiculaires à la surface du substrat selon l'orientation (002).

**Mots clés :** L'oxyde de zinc ZnO, Les couches minces, la pulvérisation cathodique à magnétron, la diffraction des rayons X (DRX), la microscopie électronique à balayage (MEB).

**CO.19****Nanocrystalline nickel synthesis by pulsed current**Amel BOUKHOUÏETE<sup>a\*</sup>, Sihem ATAILIA<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Métallurgie Physique et Propriété des Matériaux . Université Badji-Mokhtar, Annaba.\* email : [amelboukhouiete@yahoo.fr](mailto:amelboukhouiete@yahoo.fr)**Abstract**

The synthesis of nickel by pulse electrodeposition has attracted much attention during the last decades. Pulse electrodeposition has been reported to improve the deposition process and deposit properties such as porosity [1], ductility [2], hardness [3] and surface roughness [3]. It has been reported that pulse plating strongly modifies the properties, the structure, the surface morphology and the macroscopic characteristics of nickel coatings. In the present research nickel deposits were produced by pulse current electrodeposition from Watts bath. The optimization of the conditions of deposition was established and the influence of pulse parameters, on the grain size, surface morphology and crystal orientation was determined. The morphology of the coatings was characterised by observations in scanning electronic microscopy (SEM). X-ray diffraction in symmetric mode was also used to evaluate the structure and principal crystallographic orientations of the deposits. The results obtained, showed that the development in pulsed induced a marked improvement in the morphology and grain refinement.

**Keywords :** Nickel Coating, Pulsed current, Morphology, Microstructure

**References**

- [1] I. Popov, D. N. Keca, B.I. Vuksanovic, *Journal of Applied Electrochemistry* 7 (1977) 185.
- [2] C. J. Raub, A. Knodler, *Plating and Surface Finishing* 65 (9)(1978) 32.
- [3] J. Puijpe, F. Leaman, *Theory and Practice of Pulse Plating*, AESF Publication, Orlando, 1986.

**CO.23****Ab initio investigation using DFT method of Germanium doped clusters**M. LASMI<sup>a</sup>, S. MAHTOUT<sup>a</sup>, M.A. ROUMILI & F. RABILLOUD<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de physique Théorique, Faculté des sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie.<sup>b</sup>Institut Lumière Matière UMR5306 CNRS Université Claude Bernard Lyon1 Domaine Scientifique de la Doua 10 rue Ada Byron 69622 Villeurbanne France\* email : [mustaphalasm2017@gmail.com](mailto:mustaphalasm2017@gmail.com)**Abstract**

In this work we investigate the structural, electronic and magnetic properties of pure germanium clusters as well as the effect of substituting one germanium atom by a chosen transition metal one. By using density functional theory [1], within generalized gradient approximation (GGA) for the exchange-correlation part using the PBE parameterization [2] implemented in SIESTA code [3] we study the relation between the electronic, the magnetic properties, the size and the shape of the clusters. We find that the binding energy increases by increasing the clusters size which means that the system continues to gain energy during the growth process. For fixed cluster size, the binding energy depends on the size and the species of doping metal atom. We also find that the HOMO-LUMO gap basically decreases by increasing the size of the clusters. For a given cluster the substituting of one germanium atom by a transition one leads to decrease the HOMO-LUMO gap. Analysing the ionisation potential and the electronic affinity of different clusters, we observe that they decrease and increase, respectively, by increasing the clusters size. Through the magnetic properties of the clusters, analysed by the calculation of the total spin magnetic moment and the total (DOS) and partial (PDOS) densities of states, depend on the shape, the size, the nature and the position of the doping metal transition atom. The chemical hardness shows that the clusters with large size are chemically less stable and more reactive. In addition, the inclusion of the dopant atom leads to reduce this stability.

**Mots clés / Keywords : A-b initio study, DFT, germanium clusters, SIESTA code.****CO.24****Structural, electronic and magnetic properties of semiconductor doped transition metals using dft study**M.A. ROUMILI<sup>1</sup>, S. MAHTOUT<sup>1</sup>, M. LASMI<sup>1</sup>, K. BADDARI<sup>2</sup> and F. RABILLOUD<sup>3</sup><sup>1</sup> Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie.<sup>2</sup> Département of Geophysics, University of Bouira, Algeria<sup>3</sup> Institut Lumière Matière, UMR5306 Université Lyon1-CNRS, Université de Lyon, 69622 Villeurbanne Cedex, France  
[roumilimoho92@gmail.com](mailto:roumilimoho92@gmail.com), [mahtout\\_sofiane@yahoo.fr](mailto:mahtout_sofiane@yahoo.fr)**Abstract**

The equilibrium geometries, electronic and magnetic properties  $MP_n$  ( $M = \text{Rh, Ir}$ ;  $n = 1-15$ ) clusters have been investigated by using the first principles density functional theory approach within the generalized gradient approximation (GGA) implemented in SIESTA simulation package [1, 2]. The relative stabilities have been studied in terms of the binding energies, the second-order difference of energies, the HOMO-LUMO gaps, the vertical ionization potentials and electronic affinities and the chemical hardness for all pure and doped structures. The obtained results show that the binding energies generally increase with the increasing of cluster size which indicating that the clusters continue to gain energy during the growth process. The theoretical HOMO-LUMO gaps of the most stable  $MP_n$  clusters are generally decreases as the cluster size increases. This indicates that the  $MP_n$  clusters with large size seem to be approaching the gap closure characteristic of a metallic state which is enhanced by the doping M atom. The vertical electron affinity (VEA), the vertical ionization potential (VIP) and chemical hardness ( $\eta$ ) of  $MP_n$  clusters show that some  $MP_n$  clusters have specific properties and are also discussed. The magnetic properties of  $MP_n$  clusters are discussed according to the value of the total

magnetic moment calculated for the lowest energies structure, while the doping of the M atom increases the magnetic moments of the P n clusters.

**Keywords:** DFT, Phosphorus, Rhodium, clusters, electronic and magnetic properties.

#### References

- [1] P. Hohenberg and W.Kohn, Phys.Rev. 136 B, 1964, 864-871.  
 [2] W. Kohn and L.j.Sham. Phys. Rev. 140 (41): 11133-11138, Nov 1965.

### CO.25

#### Experimental investigation of carriers thermal distribution mechanisms in InAs nanostructures grown on vicinal InP(001) substrate

Fatiha BESAHAOUI<sup>a\*</sup>, M'hamed BOUSLAM<sup>a</sup>, Michel GENDRY<sup>b</sup>, Faouzi SAIDI<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire (Matériaux), Ecole Nationale Polytechnique d'Oran (ENPO), B.P. 1523, Oran M'naouar, Oran, Algeria.

<sup>b</sup>Université de Lyon, Institut des Nanotechnologies de Lyon (INL), UMR CNRS 5270, Ecole Centrale de Lyon, 36 Avenue Guy de Collongue F-69134 Ecully, France.

<sup>c</sup>Laboratoire de Micro-Optoélectronique et Nanostructures, Université de Monastir, Faculté des Sciences, 5019 Monastir, Tunisia.

\*email : fatiha.besahraoui@yahoo.fr

#### Abstract

We have investigated the optical properties of InAs quantum nanostructures grown on InP vicinal substrate. This study is carried out with the help of Photoluminescence Spectroscopy (PLS) established in our laboratory. From the PL spectra measured as a function of temperature from 12 K-300 K, we have observed a fast redshifting of the PL peaks and an anomalous decrease of the corresponding FWHM with increasing temperature. This behavior is attributed to an efficient thermal relaxation process of photogenerated carriers in InAs quantum nanostructures. This result is highlighted through a theoretical study of PL peaks energy as a function of temperature. From experimental and theoretical results, we have evidenced the contribution of LA-phonons in the Photoluminescence InAs quantum islands (QIs) via the piezoelectric potential, especially in high temperatures range. We have attributed this behavior to the growth mechanisms of a strained InAs/InP QIs and/or to the topography of the vicinal InP(001) substrate which favours the presence of stepped phonons polarized along the steps. These vibrational modes can further interact with the excitons at high temperatures.

**Keywords :** Quantum confinement, InAs nanostructures, Photoluminescence, vicinal substrate.

### CO.26

#### Les nanoparticules d'argent, synthèse et application antibactérienne

M. Amraoui<sup>a</sup>, M. Remram<sup>a\*</sup>, A.M Jurdyc<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire LEMEAMED, Université des Frères Mentouri Constantine1, 25000 Constantine, Algeria

<sup>b</sup>Institut Lumière Matière, UMR5306 Université Lyon1-CNRS, Villeurbanne Cedex, France

\*email.mohamedremram@gmail.com

#### Résumé

Nous avons testé l'activité antibactérienne de nanoparticules d'argent synthétisées avec différentes concentrations de précurseur de nitrate d'argent. La caractérisation morphologique et optique, par MET, DLS et spectroscopie, a révélé des nanoparticules de formes sphéroïdales, de tailles voisines de 10 nm et de longueurs d'onde de résonance des plasmons de surface autour de 440 nm.

Les nanoparticules d'argent ont été synthétisées à la température ambiante par réduction chimique du nitrate d'argent à différentes concentrations du précurseur: 0,0025 M, 0,0030 M, 0,0035 M. [2]



Ces nanoparticules d'argent associées à différents antibiotiques ont montré une augmentation significative de l'action sur les souches hospitalières de **Staphylococcus aureus** résistants à plusieurs antibiotiques a été évaluée. Cet effet amplificateur est dû à la petite taille des nanoparticules d'argent allant de 8 à 10 nm

**Mots clés:** Nanoparticules d'argent (AgNP), Synthèse, Caractérisation, Activité antibactérienne

## CO.27

### Evolutions des densités de dislocations en présence du vieillissement dynamique

MEHENNI Madjid et AIT-AMOKHTAR Hakim

Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse (LPCMC),  
Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie.

E-mail: [madjidmerdj@yahoo.fr](mailto:madjidmerdj@yahoo.fr) (MEHENNI Madjid)

#### Abstract

Les matériaux métalliques déformés dans un certain domaine de vitesses de déformation et de températures peuvent présenter un écoulement plastique instable résultant du phénomène de vieillissement dynamique des dislocations mobiles (effet Portevin-Le Chatelier). A vitesse de déformation imposée, pour une température donnée, cette instabilité se manifeste par des décrochements de contrainte sur la courbe de déformation et par des bandes de déformation localisée sur la surface du matériau déformé.

A partir des caractéristiques des instabilités plastiques, déterminées en traction uni-axiale et en utilisant la thermographie infrarouge, nous analysons à travers l'intensité du vieillissement dynamique les évolutions des densités de dislocations mobiles et de la forêt et les paramètres microscopiques associés. L'étude a été menée sur un alliage Al-4.5%Mg déformé à température ambiante avec une vitesse de déformation imposée de  $2.38 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Dans ces conditions, les bandes de localisation de la déformation passent du type B aux faibles déformations au type C aux déformations élevées. L'analyse de la courbe de déformation et des champs de températures de la surface de l'échantillon, enregistrés à l'aide d'une caméra infrarouge au cours de la déformation, et l'usage de concepts théoriques nous ont permis d'obtenir les évolutions au cours de la déformation des densités de dislocations, mobiles et de la forêt, le libre parcours moyen des dislocations mobiles et leur vitesse moyenne. On met en évidence le fait que l'accélération de la déformation locale, associée à une localisation, est accompagnée par une décharge élastique du reste de l'échantillon jusqu'à ce que le déplacement de la traverse mobile de la machine correspond au déplacement total produit. Les résultats obtenus sont interprétés et comparés aux résultats rapportés dans la littérature.

**Mots clés:** Dislocations ; vieillissement dynamique ; localisation de la déformation ; thermographie infrarouge.

#### Références bibliographiques

- [1] Mehenni H. Ait-Amokhtar C. Fressengeas, Spatiotemporal correlations in the Portevin-Le Chatelier band dynamics during the type B - type C transition, Mater. Sci. Eng. A 756 (2019) 313-318.
- [2] L. Ziani, S. Boudrahem, H. Ait-Amokhtar, M. Mehenni, B. Kedjar, Unstable plastic flow in the Al-2%Mg alloy, effect of annealing process, Mater. Sci. Eng. A 536 (2012) 239-243.
- [3] H. Ait-Amokhtar, C. Fressengeas, S. Boudrahem, The dynamics of Portevin-Le Chatelier bands in an Al-Mg alloy from infrared thermography, Mater. Sci. Eng. A. 488 (2008) 540-546.
- [4] L.P. Kubin, C. Fressengeas, G. Ananthakrishna, in: F.R.N. Nabarro, M.S. Duesbery (Eds.), Dislocations in Solids, vol. 11, Elsevier Science B.V., Amsterdam, 2002, p. 101.

**CO.28****Electronic Magnetic and Structural properties of 3d transition metal compounds: First Principle Calculations**

R.Moussouni\*, F.Benissad, A.Houari

*Laboratory of theoretical physics, University of Bejaia, Algeria**\*email :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 (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 [1] with the generalized gradient approximation (GGA)[2]

**Mots clés / Keywords :** DFT, Magnetism, ASW, PAW,

**CO.29****Using first principles density functional theory approach to model the thermal conductivity of diamond-like materials**S. BENSALÉM<sup>a\*</sup>, A. BOUHEMADOU<sup>b</sup>, A. HADJ ARAB<sup>a</sup>, N. BELHAOUAS<sup>a</sup><sup>a</sup>*Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER, BP 62 Route de l'Observatoire Bouzaréah, 16340 Algiers, Algeria*<sup>b</sup>*Laboratoire de Développement de Nouveaux Matériaux et leurs Caractérisations, Université Ferhat Abbas-Sétif 1, 19000 Sétif, Algeria**\*email :bensalemse@gmail.com***Abstract**

The thermal conductivity of the quaternary semiconductors CZTX (X=S, Se) and CIITSe (II=Cd, Hg) is investigated using the density functional theory (DFT). Based on the calculated elastic constants of the single crystal, the mechanical parameters are deduced through the usual way, then the thermal conductivity is estimated. We have found that the calculated thermal conductivities, using two empirical formulas, are in good agreement with experimental data. Consequently, the employed models are authentic theoretical approach to insight the thermal conductivity of those promising materials for photovoltaic and thermoelectric applications.

**Keywords :**

DFT, photovoltaic conversion, thermoelectric effect, thermal conductivity, quaternary semiconductors.

**CO.33****Magnetic Properties of Nanostructured FeCoP Powder Mixture**Hanane BERKANI<sup>a,b\*</sup>, Rachid SIAB<sup>a,b</sup>, Wassila TEBIB<sup>a</sup>, Locif REDOUANI<sup>a</sup>, Saida BOUKEFFA<sup>a</sup>, Ali HAFSA<sup>a</sup><sup>a</sup>*Laboratory of Physico-Chemistry of Materials (LPCM), Department of Physics, Faculty of Science and Technology, Eltarf. University, P.B. 73, Eltarf 36000, Algeria.*<sup>b</sup>*Khenchela University P.B. 1252, Khenchela 40004, Algeria.**\*hananeberkani25@gmail.com***Abstract**

Ball milling technique was used to study the effect of phosphorus addition on the iron cobalt powder mixtures in a high-energy planetary ball mill under an inert atmosphere. Structural, microstructural and magnetic properties were followed by X-ray diffraction (XRD) and vibrating sample magnetometry (VSM). For the FeCoP powders, a nanocrystalline bcc FeCo and  $\alpha$ -Fe in addition to

orthorhombic FeP<sub>2</sub> and Co<sub>2</sub>P type phases were detected after 1 h of milling by the Rietveld refinement of the obtained diffractograms. Further milling time (up to 2 h) gives rise to the proportion of the  $\alpha$ -Fe phase in addition to different solid state transformations. Higher powders milling time (3 h) exhibit higher, coercive field, H<sub>c</sub> and remanence-to-saturation ratio than those obtained at lower milling times. The highest value of the saturation magnetization, M<sub>s</sub>, is observed after one hour of the milling time.

**Keywords:** Mechanical alloying, FeCoP alloy, XRD, Rietveld refinement, VSM.

### CO.36

#### Milling Effect On The Structural, Microstructural and Magnetic Properties of Fe-Cu-Zn Nanomaterials.

Saida BOUKEFFA<sup>a,\*</sup>, Wassila TEBIB<sup>a</sup>, Locif REDOUANI<sup>a</sup>, Ali HAFSA<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratory of Physico-Chemistry of Materials (LPCM), Faculty of Science and Technology,*

*Eltarf University, P.B. 73, Eltarf 36000, Algeria*

\* *email : [saidamima36@gmail.com](mailto:saidamima36@gmail.com)*

#### Abstract

The diffusion process at the nanoparticle level plays an important role in the formation of the new phases. The nanostructure powders of brass-based alloys (Cu-Zn-Fe) were studied by high-energy ball milling of iron-doped brass powders during different milling times. The powders obtained were studied by X-ray diffraction (XRD) and the vibrating sample magnetometer (VSM) of results of the X-ray diffraction showed the formation of the several phases: Fe<sub>4</sub>Zn<sub>9</sub>, Fe<sub>0.7</sub>Zn<sub>0.3</sub>, Cu<sub>5</sub>Zn<sub>8</sub>, Cu<sub>0.255</sub>Zn<sub>0.745</sub>, Cu<sub>0.8</sub>Fe<sub>0.2</sub>, Cu<sub>0.003</sub>Fe<sub>0.997</sub> in addition to  $\alpha$ -Fe. The magnetic study has shown that the coercive field, H<sub>c</sub>, increases rapidly and the saturation magnetization, M<sub>s</sub>, decrease after 3 h of milling. The remanence-to-saturation ratio increases gradually with milling time.

**Keywords:** Brass alloy, XRD, VSM, Rietveld, MAUD.

### CO.38

#### Etude par DFT des transitions de phases dans le CaCO<sub>3</sub> : effet des vibrations du point zéro

R. Belkfsi<sup>\*</sup> and I. Belabbas

*Equipe de Cristallographie et Simulation des Matériaux, Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse, Université Abderrahmane Mira, Bejaia, 06000 Algérie*

\*E-mail : [belkfsi.reguia@yahoo.com](mailto:belkfsi.reguia@yahoo.com)

#### Résumé

Dans ce travail, nous avons mené une étude par simulation atomistique, basée sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) [1,2], implémenté dans le code ABINIT [3], sur les transitions de phases des polymorphes du carbonate de calcium, à savoir la calcite-III, calcite-IIIb et calcite-VI.

Nous avons pris en compte les vibrations du point zéro dans l'évaluation de l'enthalpie libre ce qui a conduit à des modifications dans diagramme de phases du CaCO<sub>3</sub> entre 0 et 30 GPa. Pour les trois polymorphes étudiés, nous avons obtenue la séquence de stabilité suivante : calcite-IIIb → calcite-III → calcite-VI, avec des transitions de phases à 7 GPa et 21 GPa.

**Mot clés / Keywords :** calcite-III, calcite-IIIb, calcite-VI, transitions de phases, DFT, DFPT, ABINIT

#### Références

- [1] P. HOHENBERG AND W. Kohn, "Inhomogeneous Electron Gas\*," vol. 136, no. B861-71, 1964.
- [2] W. Kohn And L.J. Sham, *Phys. Rev.*, vol. 140, pp. A1133-8, 1965.
- [3] C. D. Gonze X, Amadon B, Anglade PM, Beuken JM, Bottin F, Boulanger P, Bruneval F, H. Caracas R, Cote M, Deutsch T, Genovese L, Ghosez P, Giantomassi M, Goedecker S, O. G. DR, Hermet P, Jollet F, Jomard G, Leroux S, Mancini M, Mazevet S, Oliveira MJT, Z. G. Pouillon Y, Rangel T, Rignanese GM, Sangalli D, Shaltaf R, Torrent M, Verstraete MJ, and Z. JW, "Comput. Phys. Commun.," vol. 180, 2582., 2009.

**CO.42****Morphological, structural and optical characterization of porous TiO<sub>2</sub> thin films deposited by spin coating method**Rezika. Zedek<sup>a\*</sup>, Djedjiga. Zalouk<sup>b</sup><sup>a</sup>Mouloud Mammeri University (UMMTO), BP 17 RP, 15000 Tizi-Ouzou, Algeria<sup>b</sup>M. Bouguerra Boumerdes University 35000

\*rezika.zedek2010@yahoo.fr

**Abstract**

Background: thin films of titanium dioxide are currently the focus of intensive research in to photovoltaic application, and have been specific surface area important for photons piegeage and also interesting physico-chemical properties. In this work, TiO<sub>2</sub> thin films were prepared by sol gel method, and have been deposited by spin coating technique onto glass substrate (TiO<sub>2</sub>/ glass). In this work, we report the effect of the polymer additive to different morphological, structural and optical properties of the films. These films were characterized by scanning electron microscopy (SEM), X-ray energy dispersive spectrometer (EDX), X-ray diffraction (XRD) and UV / Visible spectroscopy. The morphological characteristics showed the formation of dense and homogenous porous layer of thickness 1µm and nano-pores of size around 0.4µm with differents diameter. The X-ray diffraction spectra have shown the anatase phase. The absorption spectra of titanium dioxide thin films indicated that there are two parts, the first is opaque in the UV ranges and the second is transparent in the visible wavelength spectrum region.

**Keywords:** Thin layers; spin coating; TiO<sub>2</sub>, morphological; structural and optical characteristics.

## Thème C Nanomatériaux Propriétés et Applications

### Communications Posters

#### CP.09

#### Half-Metallic Ferromagnetism Related to Spintronic Applications in 3d (Cr, and Co) doped CaS

Amina AICHE\*<sup>1,2</sup>, Abdelkader TADJER<sup>1,2</sup>, Hadj Moulay Ahmed MAZOUZ<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Materials and Sustainable Development Department, University Djillali Liabes of Sidi Bel Abbes, Algeria.

<sup>2</sup>Modelling and Simulation in Materials Science Laboratory, University Djillali Liabes of Sidi Bel Abbes, Algeria.

<sup>3</sup>Department of physics, Faculty of Sciences, University M'Hamed Bougara of Boumerdes, 35000, Boumerdes, Algeria.

<sup>4</sup>UR-MPE, University M'Hamed Bougara of Boumerdes, 35000, Boumerdes, Algeria.

email: aminaaiche@gmail.com

#### Abstract

The electronic structure and magnetic properties of  $\text{Ca}_{1-x}\text{TM}_x\text{S}$  (TM =Cr and Co) in the rock-salt structure at concentration ( $x=0.0625$ ) were studied using full potential linear augmented plane wave (FP-LAPW) method within the spin density functional theory. Features such as lattice constant, bulk modulus, spin-polarized band structure, total and partial densities of states and magnetic moment have been computed. We predict the values of the exchange constants and the band edge spin splitting of the valence and conduction bands.

The electronic structures show that  $\text{Ca}_{1-x}\text{Cr}_x\text{S}$  and  $\text{Ca}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}$  at concentration  $x=0.0625$  compounds are half-metallic ferromagnets with spin polarization of 100% which makes them a new potential candidates for spintronic applications.

**Keywords:** Density functional theory, First principles calculations, Spintronics, Half-metallic ferromagnetism.

#### CP.10

#### Etude computationnelle du dinitrofluorenone par les différentes méthodes quantiques

Mohammed Arab AIT TAYEB<sup>a</sup>, Hichem Mahi BOUMEDAL<sup>a</sup>, Noureddine TCHOUAR<sup>a</sup>, Abdenacer IDRISSE<sup>b</sup>,  
Oussama ELAFFIFI<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Département de Chimie-Physique, Faculté de Chimie, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran (USTO)  
31036, Algérie

<sup>b</sup> LASIR UMR 8516, Université de Lille Sciences et Technologies, UFR de Chimie Bât C8, Villeneuve d'Ascq 59650,  
France

\* email : aittayeb.mohamed\_l2012@yahoo.fr

#### Résumé

En vue du développement de la recherche, l'homme se sert de la technologie existante pour chercher de nouvelles ressources ou des méthodes de génération d'énergie sans oublier le développement des modèles existants.

La Dinitrofluorenone (DNF) est une molécule tricyclique contenant 2 groupements (-NO<sub>2</sub>), elle est connue pour être largement utilisée dans différents domaines tel que la chimie médicinale, l'environnement et même dans le domaine de l'énergie renouvelable en tant que matériau accepteur de charges. Dans cette étude nous nous intéressons à la 2,7-DINITRO-9-FLUORENONE qui est une des différentes conformations de la DNF, une recherche approfondie a été effectuée afin d'étudier théoriquement cette molécule. Différentes propriétés géométriques et électroniques ont été déterminées.

**Mots clés / Keywords :** DNF, Nitrofluorenone, PM6, DFT, Modélisation Moléculaire.

## CP.11

**Effect of rapid thermal annealing on CuO nanoparticles prepared by Sol-Gel method**

Kenza ALMI<sup>a\*</sup>, Said LAKEL<sup>b</sup>, Amina OUAHEB, Zahra Benadi  
<sup>(a)</sup>Laboratoire de Génie Energétique et Matériaux, LGEM, U. Biskra  
<sup>(b)</sup>Laboratoire des Matériaux Semi Conducteurs et Métalliques, LMSM, U. Biskra  
\*email :almi.kenza@yahoo.fr

**Abstract**

This study investigates the influence of rapid annealing treatment on the CuO nanoparticle properties. This latter was prepared via the sol-gel chemical method. Morphological, structural and optical characterization of the obtained nanoparticles was carried out using a Scanning electric microscope (SEM), X-ray diffraction (XRD) and UV-Visible spectrophotometer respectively. The results of XRD show that all samples have monoclinic polycrystalline structure; the crystallite size varies from 25.11 to 26.04 nm, where we have noticed an increase followed by a decrease of the crystallite size as result of the increasing temperature over 400°C. Optical results show that transmittance of the nanomaterial can exceed 75% beyond 400°C. Regarding the band gap, we noticed an increase from 3.67 to 3.93eV which is in opposition to what is shown by usual annealing method. As a result, the rapid annealing treatment influences very much on the CuO nanoparticles properties.

**Keywords :** CuO nanoparticles, nanoparticle elaboration methods, annealing methods.

**References**

- [1] Kuskvosky.I.L.& Tian. C.L, Phy. Rev, vol.29, p.1-8 (2001).
- [2] Rakhshan. A.E, Solid State Electronic, vol.29, No.1, p.7-17 (1986).
- [3] Serin. N, Horzum. S, Sem.Sci. Tech. J, Vol.20, p.398-410 (2005).

## CP.12

**Dielectric, Piezoelectric, Elastic and Acoustic Responses of Sn-doped PbTiO<sub>3</sub> as Potential Ferroelectric Materials for Acoustic Wave Applications**

Abdenacer Assali<sup>a\*</sup>, F. Arab<sup>a</sup>, F. Kanouni<sup>a</sup>, F. Laidoudi<sup>b</sup>  
<sup>a</sup>Equipe Cristaux Photoniques, Unité de Recherche en Optique et Photonique (URO-P-Sétif), Centre de Développement des Technologies Avancées, P.O Box 17 Baba-Hassen, 16303 Algiers, Algeria.  
<sup>b</sup>Research Center in Industrial Technologies CRTI, P.O.Box64 Cheraga, Algiers, 16014 Algeria.  
\*email :assali\_nacer@yahoo.fr

**Abstract**

Ferroelectric perovskite Lead Titanate (PbTiO<sub>3</sub>) have recently attracted enormous interest for use in development acoustic sensors, accelerators, filters and resonators. In this work, we investigate the dielectric, piezoelectric, elastic and acoustic properties of PbTiO<sub>3</sub> doped with Sn (0≤x≤1) for possible application in acoustic wave devices using Ultrasoft Pseudo-Potentials (US-PP) method. The elastic constants  $C_{ij}$  and other relevant quantities, such as the bulk modulus ( $B$ ), shear modulus ( $G$ ), Young's modulus ( $Y$ ), anisotropy factor, Poisson's ratio ( $\nu$ ), Debye temperature ( $\Theta_D$ ), melting temperature ( $T_M$ ), longitudinal ( $\nu_l$ ), transverse ( $\nu_t$ ) and average ( $\nu_m$ ) sound velocities were determined for the studied compounds. Our results are found to be in reasonable good agreement with the experimental data. The results showed high values of  $C_{ij}$ ,  $B$ ,  $G$  and  $Y$  when the Sn content increasing up to 0.5 leads to increase the stiffness and hardness of compounds. From the obtained elastic constants we suggest that these compounds are dynamically and mechanically stable in perovskite phase. Acoustic wave velocities,  $\Theta_D$  and  $T_M$  quantities are much larger than those of other classic ceramics and found to be increases with increasing Sn content. We find that the three piezoelectric strain constants  $d_{15}$ ,  $d_{31}$  and  $d_{33}$  of PbTiO<sub>3</sub> are significantly enhanced up to 120.9 pC/N (~66%), 34.7 pC/N (~23%) and 172.4 pC/N (~97%), respectively, when  $x$  up to 0.5. Our compound exhibit highly static dielectric tensors of  $\epsilon_{11}=131.5$  and  $\epsilon_{33}=13.6$  for  $x=0.5$ . Pb<sub>0.5</sub>Sn<sub>0.5</sub>TiO<sub>3</sub> appears as a promising new piezoelectric material to develop high-performance acoustic sensor devices.

**Keywords:** Acoustic and dielectric responses, piezoelectricity, acoustic sensors, DFT theory, PbSnTiO<sub>3</sub>.

**CP.13****Theoretical review of the structural and electronic properties of coiled carbon nanotubes**Lina Linda BECHOHRA<sup>a\*</sup>, Safia KELLOU-TAIRI<sup>a</sup>, Hamza AZZAZ<sup>b</sup>, Karim REZOUALI<sup>c</sup><sup>a</sup> *Laboratoire de Physico-Chimie Théorique et Chimie Informatique, USTHB, BP 32 Bab Ezzouar, Algerie*<sup>b</sup> *Laboratoire des Sciences et de Génie des Matériaux, USTHB, BP 32 Bab Ezzouar, Algerie*<sup>c</sup> *Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Science Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algerie*\* *email: lynabechohra@gmail.com***Abstract**

Coiled carbon nanotube (CCNT) structure is the result of the periodic insertion of the pentagon and heptagon pairs (defect) into the carbon hexagonal network of the nanotube causing positively and negatively curved surface. Based on theoretical studies, regular coiled nanotubes exhibit exceptional electronic, mechanical, electrical, optic and magnetic properties due to the combination of their peculiar helical morphology and the fascinating properties of nanotubes.

Although coiled carbon nanotubes provide attractive features, there is little both theoretical and experimental research. In the present work, we attempted to clarify essential aspect of the electronic behavior of CCNTs and summarize results obtained until now.

**Keywords:** coiled carbon nanotube, pentagon/heptagon pairs (defect), carbon hexagonal network, structure, electronic properties.

**CP.14****Elaboration and study of structure, microstructure and electric properties of Barium-Strontium doped manganite prepared at different sintering temperature**Faiza MERICHE<sup>a\*</sup>, Nabil MAHAMDILOUA<sup>b\*</sup>, Ibtihal BELAL<sup>a</sup>, Fatih DENBRI<sup>b</sup>, Samia BOUDJAOUI<sup>b</sup>, Nevin SOYLU<sup>c</sup>, Sevgi Polat ALTINTAS<sup>c</sup>, Ahmet VARILCI<sup>c</sup>, Cabir TERZIOGLU<sup>c</sup><sup>a</sup> *LEM Laboratory, Department of Physics, Jijel University, BP 98 Jijel 18000, Algeria.*<sup>b</sup> *LEND, Faculty of Science and Technology, Jijel University, BP 98 Jijel 18000, Algeria.*<sup>c</sup> *Department of Physics, Faculty of Arts and Sciences, AIB University, Bolu 14280, Turkey*\* *email : fzmeriche@gmail.com, mahamdioua.nabil@gmail.com***Abstract**

In this work, we prepared bulk manganite  $\text{La}_{0.6}\text{Y}_{0.1}\text{Ba}_{0.1}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$  samples by conventional solid state reaction technique with the aim of understanding the influence of sintering temperature on their structural, microstructural and electrical properties. Crystal structure and phase purity were verified by XRD technique. The recorded diffractograms refined by Jana2006 program demonstrate that  $\text{La}_{0.6}\text{Y}_{0.1}\text{Ba}_{0.1}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$  samples were crystallized in single phase with Pnma space group. Morphology of the surfaces examined by SEM microscope demonstrates the grain growth with increasing sintering temperature. The electrical properties studied via the resistivity measurements, were carried out from 28 to 300K by the standard four-probe method.

**Keywords :** Manganites, structure, microstructure, electrical properties, sintering temperature.



## CP.15

**Synthesis and characterization of PANI-WO<sub>3</sub> nanocomposite and its electrochemical behavior  
PANI-WO<sub>3</sub> matériaux composites**Mohamed Sif Eddine Belardja<sup>1</sup>, Faiza Chouli<sup>1</sup>, Abdelghani Benyoucef<sup>1,2</sup>*1. Laboratoire de Génie des Procédés et Chimie des Solutions, Université de Mascara. Bp 763 Mascara 29000 (Algeria)**belardja\_med\_seifeddine@yahoo.com**2. Laboratoire de Matériaux, Applications et Environnement, Université de Mascara. Bp 763 Mascara 29000 (Algeria)  
a.benyoucef@univ-mascara.dz***Abstract**

Materials hybrids were successfully synthesized by the oxidative polymerization of aniline monomer with WO<sub>3</sub> nanoparticles, in the presence of hydrochloric acid as a dopant with ammonium persulfate as an oxidant. The nanocomposite is identified by X-ray diffraction, Fourier transform infrared spectroscopy and UV-vis spectroscopies. Electrochemical properties were studied. The presence of PANI on WO<sub>3</sub> in samples was confirmed by X-ray diffraction. The thermal stability of samples nanocomposites were evaluated using the Thermogravimetric Analysis. To further explore the advantages of these materials hybrids for real applications, we investigated the electrochemical properties of these samples electrodes, the PANI-WO<sub>3</sub> nanocomposite presented good electrochemical response.

**Keywords** : Conducting polymer, PANI, WO<sub>3</sub>, Nanocomposite, Nanoparticle, Polymerization.

## CP.16

**Effet de l'épaisseur du film mince de CZTS sur les propriétés physiques et électrique obtenus par immersion pour l'application de cellules solaires**Mohamed Cherif Benachour<sup>a,b\*</sup>, Rabeh Bensaha<sup>b</sup>*<sup>a</sup>Centre de recherche en technologies industrielles CRTI, Unité de développement et d'applications d'Aliments / Couches minces (UDCMA), BP 64, Cheraga 16014, Sétif, Algérie**<sup>b</sup>Laboratoire de céramique, Université Frères mentouri-Constantine-1, route Ain El-Bey, 25000 Constantine, Algérie**\* email : benachour25cherif@gmail.com***Résumé**

L'influence de l'épaisseur des couches minces de Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> (CZTS) cristallin revêtu sur ses propriétés a été étudiée, allant de 350 à 800 nm. Les échantillons obtenus ont été préparés par la méthode Sol-gel et ont été étudiés par plusieurs techniques telles que la diffraction des rayons X (DRX), la spectroscopie UV-vis et la méthode de mesure à deux sondes. Confirmés par l'analyse DRX qui révèle la formation d'une phase tétragonale de kesterite avec une orientation préférentielle dans la direction (112). L'analyse optique révèle que les couches ont un coefficient d'absorption relativement élevé dans le spectre visible avec une réduction de la bande interdite de 1,94 à 1,53 eV avec l'augmentation de l'épaisseur qui est assez proche de la valeur optimale pour une cellule solaire. L'analyse électrique montre une diminution de la résistivité de (1.6117.10<sup>-1</sup> Ω.cm) à (0.4282.10<sup>-1</sup> Ω.cm), conduit à une optimisation de la conductivité électrique des couches avec l'augmentation de l'épaisseur.

**Mots Clés** : CZTS, Sol-gel, couche mince, cellule solaire, épaisseur.



## CP.17

**The different properties of Arsenic-doped germanium clusters by DFT Study**MeriemBENAIDA<sup>a\*</sup>, Kamal Eddine AIADI<sup>a</sup>, Sofiane MAHTOUT<sup>b</sup>, Soumaia DJAADI<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Développement des Energies Nouvelles et Renouvelables en Zones Aride, Université de Ouargla, 30000 Ouargla, Algeria.<sup>b</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algeria.

\*email :meriembenaida@gmail.com

**Abstract**

In this work we report the different properties of one Arsenic atom doped Germanium clusters  $\text{AsGe}_n$  ( $n=1-20$ ) by using the first principles Density Functional Theory (DFT) within the generalized density functional approximation (GGA) implemented in SIESTA program. The lowest-energy isomers are determined by considering a large number of structures for each cluster size. The lowest-energy isomers reveal three-dimensional structures starting from  $n = 5$ . Their relative stability versus atomic size is examined based on the calculated binding energy where it increases as the cluster size increases which indicates that the clusters continue to gain energy during the growth process and always for  $\text{AsGe}_n$ , we observe that the binding energies are lower than those for  $\text{Ge}_{n+1}$ . This means that doping with As atoms has no immediate effects on enhancing the stability of germanium cluster at small size. Besides, both were studied and discussed fragmentation energy, and second-order difference of energy, the calculated HOMO–LUMO energy gap, vertical ionization potential, vertical electron affinity, chemical hardness and magnetic properties.

**Keywords:** Density functional theory; As–Ge clusters; structural properties; electronic properties.

## CP.18

**Ab-initio investigation of structural, electronic, magnetic, and thermodynamic properties of the new ferromagnetic full-Heusler alloys  $\text{Pd}_2\text{PrX}$  ( $X=\text{Cl}, \text{F}$ )**Saadiya Benatmane<sup>1,2\*</sup>, Bachir Bouhafs<sup>2</sup><sup>1</sup> Faculté des Sciences et techniques, Département des sciences et techniques, Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem, 27000, Mostaganem, Algérie.<sup>2</sup> Laboratoire de Modélisation et Simulation en Sciences des Matériaux, Université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès, Sidi Bel-Abbès, 22000, Algérie.\*email: [b.saadia@live.fr](mailto:b.saadia@live.fr)**Abstract**

A multitude of research interest on the class of half-metallic ferromagnets HMF like Heusler alloys, manganites and transition metal oxides [1]. The existence of HMF is apparent from its band structure in full-Heusler compounds  $\text{X}_2\text{YZ}$ , where X and Y represent two different transition metals (or a transition (T) metal with a rare earth (RE) metal), and Z represents a *p* element of the 3rd, 4th, or 5th main group. In this Paper We have performed ab-initio calculations with spin polarization using plane-wave pseudo potential technique based on the density-functional theory (DFT) [2], the exchange-correlation potential was treated with the generalized gradient approximation (PBE-GGA)[3], whereas for the treatment of strong on-site  $4f$  electron–electron interactions on Pr the PBE-GGA+U approximation [4] (where U is the Hubbard Coulomb energy term) are applied for the calculation of the structural, electronic, elastic and magnetic properties of  $\text{Pd}_2\text{PrX}$  ( $X=\text{Cl}, \text{F}$ ).

Our results predicted that our compounds in  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ -type structure were more stable than  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ -type structure with an optimized lattice parameter of 6.85 and 6.58 Å with GGA-PBE+U, 6.82 and 6.57 Å with GGA-PBE for  $\text{Pd}_2\text{PrCl}$  and  $\text{Pd}_2\text{PrF}$  respectively. Electronically,  $\text{Pd}_2\text{PrCl}$  and  $\text{Pd}_2\text{PrF}$  exhibit half-metallicity with small band gaps of 0.06 and 0.25eV respectively with GGA-PBE+U in the spin-down channels whereas spin-up channels are conducting. The calculated total magnetic moment of  $2.00\mu\text{B}$  per formula unit is very close to integer value and agree well with the Slater- Pauling rules [5] ( $M_{\text{tot}}=32-Z_{\text{tot}}$ ), where the partial spin moment of Pr which mainly contribute to the total magnetic moment. The

Thermodynamic properties were also analyzed using the quasi-harmonic Debye model [6]. Both the compounds are found structurally stable. However, elastic properties show that our compounds are ductile and anisotropic.

**Keywords:**DFT, electronic properties, structural properties, full-heusler, half-metallicity, elastic properties, thermodynamic properties.

### References

- [1] F. Heusler, *Verhandl Deuts Phys Ges*, 5 219 (1903).
- [2] P. Hohenberg, W. Kohn, *Physical Review*, 136 B864 (1964).
- [3] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett*, 77 (1996) 3865.
- [4] V.I. Anisimov, J. Zaanen, O.K. Andersen, *Physical Review*, B 44 (1991) 943.
- [5] J. Kübler, *Physica B+C*, 127 (1984) 257.
- [6] M. Blanco, E. Francisco, V. Luana, *Comput. Phys. Commun*, 158 (2004) 57.

### CP.19

#### Une étude comparative de trois types de nanofils sur Substrat en Silicium-Germanium pour des applications photovoltaïques

Fatiha BENBEKHTI<sup>a\*</sup>, Souaad TAHRAOUI<sup>b</sup>, Habiba Houari<sup>c</sup>, Hayate KHOUANI

<sup>a</sup>Djillali Bounama, université de Khemis Miliana, Thniet El had, Khemis Miliana, Algérie

<sup>b</sup>Hassiba Benbouali, université de Chlef, N19, Ouled Fares, Chlef, Algérie

<sup>c,d</sup>Université Abou bekr Belkaid, Tlemcen, N 119, Rue Abi Ayad, Tlemcen, Algérie

\*email : fatiha.benbekhti@univ-dbkm.dz

### Résumé

Les cellules solaires sont des systèmes prometteurs pour produire de l'énergie propre et renouvelable, d'une manière durable et respectueuse de l'environnement. Miniaturisation est l'une des étapes clés du procédé pour la fabrication des cellules solaires à grande efficacité et à faible coût. L'utilisation des nanofils représente une approche intéressante permettant la réduction du coût et la taille et l'amélioration d'efficacité photovoltaïque. Le silicium et le germanium ont des similitudes structurelles dans la cristallographie et de l'électronique. En outre, le germanium est un matériau compatible avec la technologie d'intégration à base de silicium, ce qui en fait un matériau intéressant pour les applications photovoltaïques. L'objectif principal de cet article est l'intégration de trois types de nanofils sur un substrat de silicium-germanium microcristallin. Une simple jonction p-i-n a été créée et simulée en utilisant Tcad-Silvaco Athéna, en utilisant des paramètres de cellules solaires réels (tels que des épaisseurs de couche, les niveaux de dopage et les propriétés des matériaux) documentés dans divers documents. Les résultats obtenus par simulation, sont expliqués et commentés dans leurs paramètres clés.

**Mots clés :** Silicium, Germanium, nanofils, simulation, optimisation.

## CP.20

**Contribution of Heusler alloys cobalt-manganese based  $\text{Co}_2\text{MnAl}$  and  $\text{Co}_2\text{MnGa}$  Spintronic application**Omar BENGUERINE <sup>a\*</sup>, Zakia NABI<sup>a</sup>, Badra BOUABDALLAH<sup>a</sup><sup>a</sup>*Modelling and Simulation in Materials Science Laboratory, Department of Physics, University of Sidi Bel-Abbes, Algeria*<sup>\*</sup> *email* : benguerine.omar@gmail.com.**Abstract**

The rapid advancement of spintronics in recent years has intensified the research in the Heusler alloys. The magneto-electronic (spintronic) devices are mostly dependent on an imbalance in spin carriers, namely majority and minority spins, with 100% spin polarization at Fermi level for the ideal materials. One important class of materials suitable for such applications is some of the Heusler compounds also known to be Half-metallic ferromagnets (HMFs).

In this study, we present the results of first principles calculations of structural, electronic and magnetic properties of the full Heusler cobalt-manganese based  $\text{Co}_2\text{MnGa}$  and  $\text{Co}_2\text{MnAl}$  in stoichiometric composition ( $\text{X}_2\text{YZ}$ ).

The calculations were performed using the full potential linear augmented plane wave method (FP-LAPW) within the framework of the density functional theory (DFT) as implemented in the wien2k code. For the exchange-correlation potentials, we have used the generalized gradient approximation (GGA-PBE).

Our results of structural, electronic and magnetic properties at equilibrium are in good agreement with the other calculations.

**Mots clés / Keywords** : Spintronic, Heusler alloys, FP-LAPW, Wien2K.

## CP.21

**Ab initio Study into the Structural, Elastic, Electronic and Magnetic Properties of  $\text{Cu}_2\text{MnZ}$  ( $\text{Z} = \text{Si}, \text{Al}$ ) ternary Compounds**Boucif BENICHOUS<sup>a\*</sup>, Halima BOUCHENAF<sup>b</sup>, Zakia NABI<sup>c</sup>, Badra BOUABDALLAH<sup>c</sup><sup>a</sup>*Department of Electronics, Faculty of Technology, Hassiba Benbouali University of Chlef, 02000, Algeria*<sup>b</sup>*Department of Physics, Faculty of Sciences Exact and Informatics, Hassiba Benbouali of Chlef, 02000, Algeria*<sup>c</sup>*Department of Physics, Faculty of Sciences Exact, Djillali Liabès University of Sidi Bel Abbès, 22000, Algeria*<sup>\*</sup> *email* : boucif\_benichou@yahoo.fr**Abstract**

In this work, we have investigated extensively the structural, elastic and mechanical, electronic and magnetic properties of  $\text{Cu}_2\text{MnZ}$  ( $\text{Z} = \text{Si}, \text{Al}$ ) ternary Heusler alloys using the full-potential linearized augmented plane-wave method (FP-LAPW) based on the spin density functional theory (DFT) implemented in WIEN2k code within the generalized gradient approximation of Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE) for exchange-correlation functions. The spin-polarized band structure and density of states reveal that the full Heusler alloys under study are ferromagnetic metallic compounds. Elastic constants and various combinations of elastic moduli label  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  alloy as ductile and anisotropic in nature, whereas  $\text{Cu}_2\text{MnSi}$  is not mechanically stable.

**Keywords** : ab-initio, Electronic and magnetic properties, Heusler alloys, FP-LAPW method, DFT.

## CP.22

**Formation et stabilité de petits clusters de lacunes sur la surface (111) de nickel**

Thinhinane Bennour\*, Lynda Lounis, Nadjia Cherbal, Hand Zenia, El Hocine Megchiche  
Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ), Université Mouloud MAMMERRI, 15000 Tizi-ouzou  
\*email : bennourthinhinane@gmail.com

**Résumé**

Nous présentons les résultats de notre étude théorique de type *ab initio* sur la formation et la stabilité de clusters de lacunes  $V_n$  ( $n=1-3$ ) sur la surface parfaite d'orientation (111) de nickel. L'objectif de cette étude est de vérifier non seulement la stabilité de ces clusters de lacunes, mais aussi les configurations géométriques les plus stables parmi les nombreuses conformations qu'ils peuvent prendre. Plus fondamentalement, ce travail est un prélude à l'étude de l'influence de lacunes présentes en surface de nickel sur le processus d'adsorption de d'oxygène. Nous trouvons que l'énergie de formation des clusters de lacune sur la surface est bien inférieure comparée à celle correspondant à leur formation dans le volume. Ceci s'explique par la réduction de nombre de coordination à la surface. Pour la bilacune et la trilacune nous trouvons également qu'elle sont beaucoup plus stable à la surface comparativement au volume.

**Mots clés :** nickel, surface, lacunes, DFT

## CP.23

**Magnetic and thermoelectric properties of  $Ba_2CeCoO_6$  double perovskite**

BESBES Anissa<sup>a</sup>, DJELTI Radouan<sup>b\*</sup>, BESTANI Benaouda<sup>a</sup>

<sup>a</sup>SEA2M Laboratory, University of Mostaganem (UMAB) - Algeria

<sup>b</sup>Technology and Solids Properties Laboratory, University of Mostaganem (UMAB) - Algeria

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

**Abstract**

The magnetic and thermoelectric properties of a double perovskite  $Ba_2CeCoO_6$  have been calculated by using the first principle density function theory (DFT). The FP-LAPW method within the (GGA) and (mBJ) approximations is chosen in the computational approach. The  $Ba_2CeCoO_6$  crystallize in cubic structure with space group  $Fm\bar{3}m$ , where the lattice constant is 8.2984 Å. These compound exhibits the half-metallic ferromagnetic properties. A value of 1  $\mu_B$  is found for the total magnetic moment with an important contribution from Co atoms. We calculated the thermoelectric properties of  $Ba_2CeCoO_6$  using the Boltzmann transport equations within the DFT. Such properties are explained in terms of electrical conductivities, thermal conductivities, Seebeck coefficient, and the merit factor. Ranging from 100 to 1200 K; the figure of merit value is between [0.94-0.99] indicating that  $Ba_2CeCoO_6$  is a good candidate for thermoelectric applications at high and low temperature.

**Keywords:** First-principles calculations; Double Perovskite oxide; Half-metallic; Ferromagnetic; Thermoelectric properties.

## CP.24

**Photodegradation of a pharmaceutical compound using heterogeneous photo-Fenton system under UV illumination**Nour Bouanimba<sup>a</sup>, Ibrahim Mouhoub<sup>b</sup>, Nassima Laid<sup>c</sup> and Tahar Sehili<sup>d</sup><sup>abcd</sup>Laboratoire des Sciences et Technologie de l'Environnement (LSTE), Département de Chimie, Faculté des Sciences Exactes, Université des Frères Mentouri Constantine, Algeria<sup>a</sup>E-mail:nourbouanimba@gmail.com**Abstract**

Recently, great attentions have been given to pharmaceutical residues known by their potential effect on the environmental pollution, mostly because of their high bioactive chemical content. Also, pharmaceutical products are considered as emerging pollutants in waste wastewaters since they still remain unregulated.

Advanced Oxidation Processes (AOPs) comprise a series of methods including photocatalysis electrochemical, ozonation, oxidation, Fenton and Fenton-like processes.

Heterogeneous photo-Fenton system approach for wastewater treatment has favored the development of emerging and very promising technologies (i.e., Magnetite/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) on behalf of environment preservation. These techniques are based on the in situ hydroxyl radicals ( $\bullet$ OH) generation during the treatment reaction, which are strong oxidants that can non-selectively react with organic compounds leading to their mineralization to H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> and inorganic ions.

Iron oxides are commonly found in nature and can also be easily synthesized in the laboratory. Magnetite (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>), maghemite ( $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), goethite ( $\alpha$ -FeOOH) and hematite ( $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) are the most common forms.

This study describes the removal of Cyproheptadine (CPH), a pharmaceutical compound, by a heterogeneous photo-Fenton system with iron oxide Magnetite nanoparticles Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (Fe<sup>2+</sup>/Fe<sup>3+</sup> species) (MGN). The structural properties of the MGN were determined by X-ray diffraction (XRD) and the crystallite size was calculated and found to be 163 nm. The efficiency of heterogeneous photo-Fenton process was investigated. Thereafter, the influence of the basic operational parameters on the heterogeneous photo-Fenton system such as initial pH of the solution, initial pollutant concentration, hydrogen peroxide concentration, catalyst loading on the degradation efficiency of a pollutant were studied.

The results show that the increasing of the solution pH rapidly decreased the rate of CPH degradation. Conversely, CPH removal efficiency increased with increasing MGN concentrations up to 2 g L<sup>-1</sup>. The increase in the CPH concentration had a slightly negative effect on its degradation efficiency.

**Keywords:** Iron oxide; Magnetite; Pharmaceutical compound; Heterogeneous Photo-Fenton; H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.

## CP.42

**Structural and magnetic properties of FeSe<sub>2</sub> and Fe<sub>3</sub>Se<sub>4</sub> nanostructures synthesized by HEBM**B.HIND<sup>\*a</sup>, O.AMARA<sup>b</sup><sup>a</sup> Département de Physique, Faculté de Science, Université 20 Août 1955-Skikda, Algérie. Laboratoire de Physicochimie des Surfaces et Interfaces, Université du 20 Aout 1955, BP26, 21000 Skikda, Algeria<sup>b</sup> Département de Physique, Faculté de Science, Université 20 Août 1955-Skikda, Algérie. Laboratoire de Physicochimie des Surfaces et Interfaces, Université du 20 Aout 1955, BP26, 21000 Skikda, Algeria<sup>\*</sup>email : bougharebhind@gmail.com**Abstract**

The semi conductor Fe<sub>25</sub>Se<sub>75-x</sub>Te<sub>x</sub> has been prepared by mechanical alloying. Structural of the milled powders were characterize by X-ray diffraction (XRD), change magnetic behavior as a function of milling time have been studied by Mossbauer spectrometry and VSM spectroscopy. Marcasite phases Fe(Se, Te)<sub>2</sub> powders were elaborated by mechanical alloying technical at haut energy (MA) after the various milling times. The morphological, compositional, structural and magnetic behavior have been

investigated by . After 24 h of milling the DRX patterns proves that there are two coexisting phases with having good crystalline were obtained , the major percent correspond to  $\text{Fe}(\text{Se},\text{Te})_2$  orthorhombic phase and the minor percent correspond to  $\text{Fe}_3(\text{Se},\text{Te})_4$  monoclinic phase.

**Mots clés / Keywords:** FeSeTe compounds, Nanomaterials, High Energy Ball Milling, DRX

### CP.43

#### Thermoelectric, electronic and magnetic properties of full-heusler materials $\text{Cs}_2\text{CrGe}$

S.CHERID<sup>a</sup>, R. BENTATA<sup>a</sup>, S. BENTATA<sup>a,b</sup>, F. BENDAHEMA<sup>a</sup>, S. HAID<sup>a</sup>

AND R. DJELTI<sup>a</sup>

<sup>a</sup>TPS Laboratory – Faculty of Sciences and Technology – Mostaganem University, Algeria

<sup>b</sup>Mustapha Stambouli University - Mascara.

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

#### Abstract

The thermoelectric, electronic and magnetic properties of full-Heusler alloys  $\text{Cs}_2\text{CrGe}$  are examined in this study using FP-LAPW method based on density functional theory. Results of our calculations predict that the  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ -type structure is more stable than the  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ -type structure and the ground state of these alloys is ferromagnetic. The total magnetic moment calculated, is an important in conformity with the Slater-Pauling curve for full-Heusler alloys. Band structure of  $\text{Cs}_2\text{CrGe}$  shows half metallic in spin-down for GGA and mBJ-GGA.

**Keywords:** Full-Heusler, Half-metallic ferromagnetic, FP-LAPW method, GGA, mBJ

#### References

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Hvasnicka, J. Luitz, WIEN2K, Vienna University of Technology, Austria, 2001.
- [2] A.R. Shojaei, A.Vaez, Z. Nourbakhsh, Z.S. Madanian, Thin Solid Films 556 (2014) 425-433.
- [3] E. Sjusted, L. Nordstrom, D.J. Singh, Solid State Commun. 114(2000) 15.

### CP.44

#### Reinforcement of PANI with MWNTs for Supercapacitors

F. Djefafalia<sup>a,b,\*</sup>, O. Guellati<sup>a,b,\*</sup>, A. Nait-Merzoug<sup>a,b</sup>, A. Harat<sup>a</sup>, S. Detriche<sup>c</sup>, Z. Mekhalif<sup>c</sup> and M. Guerioune<sup>a</sup>

<sup>(a)</sup>Laboratoire d'Etude et de Recherche des Etats Condensés (LEREC), Département de Physique, Université Badji-Mokhtar de Annaba, BP. 12, 23000 Annaba, ALGERIA.

<sup>(b)</sup> Université Mohamed Cherif Messadia de Souk-Ahras, Fac. Sci, BP.1553, 41000 Souk-Ahras, Algeria.

<sup>(c)</sup> Laboratoire de Chimie et d'Électrochimie des Surfaces (CES), FUNDP rue de Bruxelles 61, B-5000 Namur, Belgium.

\* [djefafaliafahima@gmail.com](mailto:djefafaliafahima@gmail.com) and [guellati23@yahoo.fr](mailto:guellati23@yahoo.fr)

#### Abstract

Electroactive materials are crucial for the electrochemical performance of supercapacitors. In view of the high specific surface area, high conductivity of MWNTs and the high pseudocapacitance of polyaniline (PANI), their combination has become a research hotspot.

In this work, by controlling hydrothermal conditions (Temperature/Time), nanostructured polyaniline (PANI) reinforced by MWNTs has been synthesized as electroactive nanomaterials for advanced supercapacitors. Then, these PANI/MWNT nanocomposites properties was proved using x-ray diffraction (XRD), Fourier-Transform Infra-red (FTIR), Raman spectroscopy, Field Emission Scanning Electron Microscopy (FE-SEM) and Transmission Electron Microscopy (TEM) techniques, Brunauer–Emmett–Teller (BET) method, Thermal-Gravity analysis (TGA) and (XPS) analysis.

**Keywords:** Polyaniline, multi wall carbon nanotube, hydrothermal method, energy storage, supercapacitors.



**CP.45****Propriétés structurales, électroniques et magnétiques de la pérovskite Double Sr<sub>2</sub>MnReO<sub>6</sub>**BenbellaDJELTI<sup>a\*</sup>, Samir BENTATA<sup>b</sup>, Wissam BENSTAALI<sup>a</sup><sup>a</sup> *Laboratoire de Technologie et Propriétés du Solide, Université Abdelhamid Ibn Badis, Mostaganem, Algérie*<sup>b</sup> *Université Mustapha Stambouli, Mascara*\* email : [b.djelti@yahoo.fr](mailto:b.djelti@yahoo.fr)**Résumé**

En se basant sur la DFT implémentée dans le code Wien2K, les propriétés structurelle, électronique, et magnétique de la double pérovskite Sr<sub>2</sub>MnReO<sub>6</sub> ont été étudiées en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées sous un potentiel total (FP-LAPW) avec les approches du gradient généralisé (GGA) et GGA+U et (mBJ+GGA+U). L'étude a été faite dans la phase cubique (groupe d'espace #225 *Fm-3m*). L'optimisation a montré que ce matériau cristallise dans un état ferrimagnétique (FiM), Les calculs par GGA (GGA+U) ont donné une énergie minimale de l'état fondamental de -49354.172765 Ry (-49354.167916 Ry), un paramètre de maille  $a=7.793\text{Å}$  (7.875Å) correspond à un volume de 798.43 a.u.<sup>3</sup> (823.95 a.u.<sup>3</sup>), un module de compressibilité  $B=134\text{ Gpa}$  (179 Gpa). La densité d'états électroniques (DOS) complètement polarisée au niveau de Fermi (matériau demi-métallique) et le moment magnétique de spin de valeur entière confirmant la possibilité de son exploitation en domaine spintronique..

**Mots clés / Keywords :** Spintronique, pérovskite double, DFT, GGA, GGA+U, mBJ+(GGA+U) et Wien2k....

**CP.46****Experimental investigation and First-principles calculations on the physical properties of CuGaTe<sub>2</sub> for solar cells application**Moufidi HADJAB<sup>a,b,\*</sup>, Ammar KASSAA<sup>a</sup>, Smail BERRAH<sup>b</sup>, Fayçal BOUZID<sup>a</sup>, Miloud IBRIR<sup>c</sup>, Abderrahim HADJ LARBI<sup>a</sup>, Samah BOUDOUR<sup>a</sup>, Hamza BENNACER<sup>d</sup>.<sup>a</sup> *Research Center in Industrial Technologies CRTI, B. O. Box 64, Cheraga 16014, Algiers - Algeria.*<sup>b</sup> *Mastery Renewable Energies Laboratory LMER, University of A. Mira, Bejaia 6000, Algeria.*<sup>c</sup> *Laboratory of Physics of Materials and its Applications, Mohamed Boudiaf University, Msila 28000, Algeria.*<sup>d</sup> *Electronic Department, Technology Faculty, Mohamed Boudiaf University of Msila 28000, Algeria.*\* email : [moufidi84@yahoo.fr](mailto:moufidi84@yahoo.fr)**Abstract**

Nanostructured chalcopyrite CuGaTe<sub>2</sub> powder (Fig. a and b) has been obtained by mechanical alloying process (Fig. c). The X-Ray diffraction analysis (XRD) has shown the powder was poly-crystallized with tetragonal structure with (112) preferential orientations. Preliminary, the first principles calculations of the physical properties have been achieved using The Density Functional Theory (DFT) [1]. The simulation have been quantified using Wien2k[2] quantum computational package by employing the Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave method. Structural and electronic properties of chalcopyrite semiconducting material CuGaTe<sub>2</sub>(Fig. d) have been investigated using LDA[3] for the exchange-correlation potential. The electronic structures and linear optical parameters have been studied using both modified semi-local Becke-Johnson potential mBJ and TB-mBJ [4]. Computational results are in good agreement with those acquired experimentally. The viability of powder in realization of ultra-thin-film solar cells with high performance has been proposed after simulation. The studied material exhibits capability to become a promising candidate for fabrication of optoelectronic and photovoltaic devices.

**Keywords:** Chalcopyrite, CuGaTe<sub>2</sub>, Nanostructure, DFT, Optoelectronic properties.

**CP.47****Investigation of DFT+U effect of Holmium rare-earth on the electronic, magnetic and the half-metallic ferromagnetic properties' of double perovskite Compound**Slimane HAID<sup>a,\*</sup>, Bouabdellah BOUADJEMI<sup>a</sup> and Samir BENTATA<sup>a,b</sup><sup>a</sup> *Laboratory of Technology and Solid's Properties Faculty of Sciences and Technology, Abdelhamid Ibn Badis University, BP 227, Mostaganem, 27000, Algeria.*<sup>b</sup> *Mustapha Stambouli University, BP 305, Mascara, 29000, Algeria.*\* email : [slimane.haid@univ-mosta.dz](mailto:slimane.haid@univ-mosta.dz)**Abstract**

The Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave method (FP-LAPW)<sup>[1]</sup> within the framework of Density Functional Theory (DFT) have been employed to study the structural, magnetic and electronic properties of double perovskite-based rare earth compound Ba<sub>2</sub>HoReO<sub>6</sub>, those properties were determined by generalized gradient (PBE-GGA)<sup>[2]</sup> and GGA + U<sup>[3]</sup> approximations for the exchange-correlation functional. According to obtained results, Ba<sub>2</sub>HoReO<sub>6</sub> ordered double perovskite compound shows a half-metallic behavior with the indirect energy-gap value equal to 0.32 eV in spin down bands, located at (L<sub>V</sub>-Γ<sub>C</sub>) direction with integer magnetic moment amounts to 6.0 μB using GGA approximation. On the other hand, using GGA + U approximation, Ba<sub>2</sub>HoReO<sub>6</sub> has a metallic behavior when U=2, 4 and 6 eV. While its character changes when U=8eV, and then become half-metallic behavior with direct energy-gap equal to 1.93eV in spin-up bands, located at (Γ<sub>V</sub>-Γ<sub>C</sub>) direction, with magnetic moment amounts to 2.0 μB at U=8eV. The results obtained concerning these different properties are the first prediction of Holmium rare-earth based double perovskite Ba<sub>2</sub>HoReO<sub>6</sub>. Our compound is identified as potential candidate for spintronic applications and high-performance electronic devices.

**Keywords:** Ba<sub>2</sub>HoReO<sub>6</sub>, DFT+U, Half-metallic and Spintronic applications.**CP.48****Effects of Sn content (at.%) on the structural, mechanical and tribological properties of Ti-Nb-Sn Alloys**N. Hezil<sup>1\*</sup>, M. Fellah<sup>2,3</sup>, M. Abdul Samad<sup>4</sup>, M. Abdurabou Hussein<sup>4</sup>, R. Djellabi<sup>5</sup>, A. Montagne<sup>6</sup>, A. Mejias<sup>6</sup>, S. Kossman<sup>6</sup>, A. Iost<sup>6</sup>, A. Obrosov<sup>7</sup> and S. Wiess<sup>7</sup><sup>1</sup> Mater sciences Department, ABBES Laghrour - Khenchela University P.O 1252, 40004, Algeria. [hezil\\_n@yahoo.fr](mailto:hezil_n@yahoo.fr)<sup>2</sup> Mechanical Engineering Department, ABBES Laghrour- Khenchela University P.O 1252, 40004, Algeria.<sup>3</sup> Tribology and Materials, Laboratory of Foundry, Annaba University BO, 12 CP 23000. Algeria,<sup>4</sup> Mechanical Engineering Department, KFUPM. Box 1180, Dhahran - 31261, KSA.<sup>5</sup> Key Laboratory of Drinking Water Science and Technology, Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, PR China<sup>6</sup> Arts et Metiers ParisTech, MSMP, 8, Boulevard Louis XIV, 59046 Lille Cedex, France,<sup>8</sup> Department of Physical Metallurgy and Materials Technology, Brandenburg Technical University, 03046 Cottbus, Germany**Abstract**

A Ti alloys development with various constituents' addition has been reported. Some studies have shown that Ti-(20-50at.%)Nb alloys exhibit a Young's modulus of about 61 GPa. The increase on Nb content tends to stabilizes the β-titanium phase and decrease the Young's modulus. Many authors showed that the β-phase was almost retained at Nb content superior to 30 wt.%. Additionally, some alloying elements such as Al, Ta, Pd, Sn, have been selected to improve mechanical properties of binary Ti-Nb system. Recently, a metastable β-type Ti-33Nb-4Sn alloy, was developed for biomedical applications. The addition of Sn to Ti-Nb alloys lets the phase transformations control, mostly the ω phase precipitation.



The present work aims to evaluate the effect of Sn addition on the structure, mechanical properties and tribological behavior of ball milled Ti-Nb-xSn alloys (X=1-30 at. %). The structural properties were investigated via optical microscopy (OM), Scanning Electron Microscopy (SEM) and X-ray diffractometry (XRD). The mechanical properties were investigated using, Vickers microhardness, Berkovich nanoindentation and compression tests. The tribological behavior was evaluated using a ball on plate type Oscillating tribometre under wet condition using Hank's solution at room temperature. The results obtained suggested that the structural, mechanical and tribological behaviors of the Ti-Nb-Sn samples are directly sensitive to the Sn content (at. %).

**Keywords:** Titanium alloys; Microstructure, Mechanical behavior, friction and wear; Ti-Nb-Sn alloys; Tribology; Porosity, Mechanical properties.

#### CP.49

##### A Performance Evaluation of a Solar still using nanoparticles as photocatalysts

Moulay rachid KOUADRI<sup>a\*</sup>, nasreddine CHENNOUF<sup>b</sup>, mohamed hassenSELLAMI<sup>a</sup>, mohammed nasreddine RAACHE<sup>a</sup>, Abdelhakim BENARIMA<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Process Engineering Laboratory (PEL) Kasdi Merbah University /Ouargla /Algeria.

<sup>b</sup>VPR, S Laboratory Kasdi Merbah University /Ouargla /Algeria.

<sup>c</sup>VTRS Laboratory University El Oued, Algérie

Email: [Molayrachid62@gmail.com](mailto:Molayrachid62@gmail.com)

#### Abstract

Solar distillation is one of the most effective ways to desalinate water especially in southern Algeria where it is abundant and the sun shines throughout the year. Among the accelerators of the solar desalination are Nano-particles or metal oxides known as photo-catalysts that have a strong effect on the thermal transfer process.

Two metal oxides: MnO<sub>2</sub> and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> were added separately at 10, 20, 30, 40 and 50g each into the single slope solar still absorber. The experiments carried out in Ouargla University revealed that:

The addition of manganese oxide has a remarkable influence on the gain in distilled water. From 20g, the gain increases slightly by 1.21% to reach 14% after the addition of 50g.

The addition of aluminum oxide has no influence on the distilled water gain; this phenomenon increases as more alumina is added until a negative gain of 17% is obtained. 50 g of Alumina.

**Keywords :** Solar distillation, solar still, nanoparticles, photocatalysts

#### CP.50

##### Electrochemical synthesis and characterization of cuprous oxide nanomaterial and its application in electrocatalytic oxidation of glucose

Samiha LAIDOUDI<sup>a\*</sup>, Mohamed Redha KHELLADI<sup>bc</sup>, Charif DEHCHAR<sup>a</sup>, Leila. LAMIRI<sup>a</sup>, Ouafia. Belgherbi<sup>a</sup>, Samah. BOUDOUR<sup>a</sup>, Rabah. BOUFNIK<sup>d</sup>

<sup>a</sup>Research Center in Industrial Technologies CRTI, P.O.Box 64, Cheraga 16014, Algiers, Algeria

<sup>b</sup>Laboratoire de Chimie, Ingénierie Moléculaire et Nanostructures, Université Ferhat Abbas-Sétif 1, Sétif 19000, Algeria.

<sup>c</sup>Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, Mohamed El Bachir El Ibrahimi University, Bordj-Bou-Arredj 34030, Algeria.

<sup>d</sup>Research Center For Development Of Advanced Technologies, ex-CDTA, Algiers, Algeria. Research Unit In Optics And Photonics UROP, Setif, Algeria.

\* email: [samiha.laidoudi@yahoo.com](mailto:samiha.laidoudi@yahoo.com)

#### Abstract

In this study, a new cuprous oxide (Cu<sub>2</sub>O) sensitive and selective electrochemical sensor was fabricated by electrochemical method for the detection of glucose. The as-prepared Cu<sub>2</sub>O nanomaterial was characterized using X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy

(SEM) and atomic force microscopy (AFM). The electrocatalytic properties of the Cu<sub>2</sub>O/ITO electrode for glucose oxidation were investigated by cyclic voltammetry and chronoamperometry. It was found that the synthesized Cu<sub>2</sub>O/ITO electrode has a wide linear range of 0.04-0.4 mM with high sensitivity of 2.32 mA/(cm<sup>2</sup>. mM) and low detection limit of 0.02 μM. The Cu<sub>2</sub>O/ITO electrode was stable towards interfering molecules towards ascorbic acid (AA), (NaCl) and uric acid (UA). Accordingly, a facile electrochemical preparation process of Cu<sub>2</sub>O/ITO electrode was allowed highly sensitive, selective, and fast amperometric sensing of glucose.

**Keywords:** electrocatalytic, electrochemical deposition, cuprous oxide nanomaterial, glucose sensor.

### CP.51

#### Polypyrrole-coated manganese dioxide as electrode material for hydrogen peroxide reduction

Leila Lamiri<sup>1,2\*</sup>, Charif Dehchar<sup>1</sup>, Samiha Laidoudi<sup>1</sup>, Ouafia Belgharbi<sup>1</sup>, Assia Tounsi<sup>2</sup>, Belkacem Nessark<sup>2</sup>, Farid Habelhames<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Research Center in Industrial Technologies CRTI, P.O. Box 64, Cheraga 16014, Algiers.

Thin Films Development and Applications Unit - (UDCMA) -Setif- Algeria.

<sup>2</sup> Laboratoire d'Electrochimie et Matériaux, Département de Génie des Procédés, Faculté de Technologie, Université Ferhat Abbas, Sétif 19000, Algeria

Email: l.lamiri@crti.dz

lamiri.lila@yahoo.fr

#### Abstract

In this work, polypyrrole- manganese dioxide (PPy-MnO<sub>2</sub>) composite materials have been prepared by electrodeposition of polypyrrole on α-MnO<sub>2</sub> surface in acetonitrile solution containing 10<sup>-1</sup>M lithium perchlorate (LiClO<sub>4</sub>). The composite materials (ITO/PPy-MnO<sub>2</sub>) were characterized by different methods including cyclic voltammetry, chronoamperometry, X-ray diffractometry (XRD), scanning electron microscopy (SEM), spectrophotometer ultraviolet (UV)-visible. The surface morphology of the (PPy-MnO<sub>2</sub>) composite films revealed that adding MnO<sub>2</sub> nanoparticles increase the film's roughness values. The addition of MnO<sub>2</sub> nanoparticles improves the absorbance of PPy composite films, the electrochemical properties of hydrogen peroxide reduction reaction were investigated using cyclic voltammetry. These results could be used the composite materials in energy storage applications.

**Keywords:** Modified electrode, polypyrrole, manganese dioxide, electrocatalysis

### CP.52

#### Etude de l'influence de défauts ponctuels sur le processus d'adsorption et de ségrégation de l'oxygène à la surface (111) de nickel : cas d'une bilacune

Lynda Lounis\*, Thinhinane Bennour, Nadja Cherbal, El Hocine Megchiche, Hand Zenia,

Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ), Université Mouloud MAMMERI, 15000 Tizi-ouzou

\*email : lyndalounis30@gmail.com

#### Résumé

Nous rapportons les résultats de nos calculs concernant l'étude *ab initio* du système Ni-O contenant une bilacune sur la surface (111). Dans un premier temps, les enthalpies de formation de la bilacune dans différentes configurations géométriques ont été calculées. Nous montrons que celle ci est plus stable dans une configuration où les deux monolacunes sont plus proches voisines et situées sur le premier plan de la surface. Par ailleurs, nous constatons que la présence d'une bilacune au niveau de la surface induit un accroissement de l'énergie d'adsorption de l'oxygène de l'ordre 0.25 eV. Afin de voir l'influence de ce type de défaut sur les étapes initiales de l'oxydation de la surface, nous avons aussi étudié le processus de piégeage de plusieurs atomes d'oxygène au voisinage immédiat de la bilacune.

Les résultats de nos calculs montrent que six atomes d'oxygène peuvent s'agréger favorablement au niveau de la bilacune. La prise en compte de la présence de ce défaut, aura donc certainement une influence sur la cinétique de la croissance de la couche d'oxyde au niveau de la surface.

**Mots clés / Keywords :** nickel, oxygène, surface, bilacune, DFT

### CP.53

#### First principle investigation of Li intercalated on MoO<sub>3</sub>

A. Mahmoudi<sup>a,\*</sup>, M.K. Benabadji<sup>a,b</sup>, H.I. Faraoun<sup>a</sup>, M. Dergal<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Division of Materials Study and Prediction (DEPM), Research Unit for Materials and Renewable Energies (URMER) Abou Bekr Belkaid University, Tlemcen 13000, Algeria*

<sup>b</sup> *High School in Electrical and Energy Engineering, Oran 31000, Algeria*

\* *email : amaria\_physique@yahoo.fr*

#### Abstract

Transition metal oxides (TMOs) represent a very interesting class of semiconducting materials, widely known, for their important technological applications, especially, in the field of display devices, optical smart windows, electrochromic devices (ECD) and gas-sensors. Transition metal oxides of MoO<sub>3</sub> exhibit various important properties, including the electrochromic effect.

In this work, we report our computational results for lithium inserted in MoO<sub>3</sub> transition metal oxide in order to understand the origin of correlations between the optical and electronic properties reported in experimental works, using the revised gradient-corrected Perdew–Burke–Ernzerhof (GGA-PBE), GGA+U and HSE06 functional frameworks along with ab initio pseudo-potentials method implemented in the VASP package. Calculation performed with HSE06 functional proves that this compound is wide band gap semiconductor. The energy gap value is found to decrease with lithium incorporation, affecting the visible absorption coefficients.

**Keywords:** Transition metal oxides; Electrochromic; Ab initio; HSE06 hybrid DFT; Electronic properties; Optical properties

### CP.54

#### DFT investigation of inclusion complexes nanoparticles interaction between nicotinic acid and $\beta$ -cyclodextrin.

FaizaMEDDOUR<sup>a\*</sup>, Leila NOUAR<sup>a</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.*

\* *email : faiza\_meddour@yahoo.fr*

#### Abstract

Inclusion complexes nanoparticles of  $\beta$ -cyclodextrin and nicotinic acid have been investigated using the Density Functional Theory (DFT) at the B3LYP and the wB97XD level of theory using the 6-31G (d) basis set both in vacuum and in water. Geometries, energies, and charge transfer were discussed. NBO calculations were performed to investigate host-guest interactions. Finally, <sup>1</sup>H NMR shifts were predicted using the gauge-including atomic orbital GIAO-DFT at the B3LYP level using 6-31G(d) basis set and the agreement between theoretical and experimental data was established. The results obtained with both methods B3LYP/6-31G (d) and wB97XD /6-31G (d) indicate that the complexes formed are energetically favored both in vacuum and solvent, and several non bonding interaction were established.

**Keywords :** Nicotinic acid,  $\beta$ -cyclodextrin, DFT, NBO, GIAO.

**CP.55****Etude d'un monolayer ou d'un bilayer de MoSe<sub>2</sub> recouvert d'un monolayer de Fer ou de Cobalt.**

Lyes Mesbahi\*, Hamid Bouzar

*Laboratoire de physique et chimie quantique, Université Mouloud Mammeri, Tizi Ouzou, Algérie**\* email : lyesmesbahi4@gmail.com***Résumé**

Nous présentons une étude ab initio des propriétés électroniques d'un monolayer et d'un bilayer de TMDC (Transition Metal Dichalcogenide) MoSe<sub>2</sub> recouvert d'une couche atomique de Fer ou de Cobalt. Nos calculs montrent que les trois systèmes étudiés sont demi-métalliques et ferromagnétiques.

**Mots clés / Keywords ::** TMDCs, DFT, Semiconducteur, Demi-Métallique, MoSe<sub>2</sub>, Fe, Co.

**CP.56****Effect (Co) On optical and electrical properties thin films ZnO nanostructure**Mohammedi Abdelkader<sup>a</sup>, Irir Miloud<sup>a</sup>, Meglali Omar<sup>b</sup><sup>a</sup>*Laboratory of Materials Physics and its Applications, University of M'sila, 28000 M'sila, Algeria*<sup>b</sup>*Faculty of Sciences, University of M'sila, 28009 M'sila, Algeria**\* email : abdelkader.mohammedi@univ-msila.dz***Abstract**

In this work thin layers of ZnO were prepared with Co cobalt element in different doped concentration, On the substrate of glass prepared by sol-gel spin coating technique Concentration of doped was (0, 1 and 2%). It is for many uses, optical and electrical properties respectively were studied by UV-visible spectroscopy and by EDX by used four points. Where optical studies resulted in the results of the transmittance of the energy gapband and the extinction coefficient and refractive index figure of merit as the rates of deflection cobalt [1, 2]. As for the electrical results, we studied the effect of the deflection ratios. We determined the electric conductivity and the square resistance. Through the study and the relationship between the optical and electrical properties, the figure of merit was calculated for the Photovoltaic uses.

**Keywords:** Transparent conductive oxides, Sol-gel spin coating technical, X-ray, Visible UV.

**References**

- [1] S. Benramache, B. Benhaoua, H. Bentrach, Journal of Nanostructure in Chemistry, 3 (2013) 54.  
 [2] G. Poongodi, P. Anandan, R.M. Kumar, R. Jayavel, Studies on visible light photocatalytic and antibacterial activities of nanostructured cobalt doped ZnO thin films prepared by sol-gel spin coating method, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 148 (2015) 237-243.

**CP.77****Préparation, caractérisation des titanates nanotubes et leur propriétés photocatalytiques dans la dégradation du méthyle orange.**Aouicha Mounia BOUAYED<sup>1,\*</sup>, Nawal AMEUR<sup>1,2</sup>, Hanane CHAKER<sup>3</sup>, Redouane BACHIR<sup>1</sup>, Sumeya BEDRANE<sup>1</sup><sup>1</sup>Laboratoire de Catalyse et Synthèse en Chimie Organique (LCSCO), Université de Tlemcen, Algérie.<sup>2</sup>Ecole Supérieure en Génie Electrique et Energétique d'Oran (ESGEE), Algérie.<sup>3</sup>Centre universitaire BELHADJ Bouchaïb Ain-Temouchent, Algérie.*\*bouayedmounia13@gmail.com***Résumé**

Les titanates nanotubes sont l'un des catalyseurs les plus étudiés dans ces dernières décennies. Leur grande surface spécifique, leur porosité, leur échange d'ions, etc. font de lui un matériau très performant et intéressant surtout dans les applications chimiques telles que: oxydation du CO [1, 2], production de H<sub>2</sub> [3], réaction de couplage [4], réaction de décalage du gaz dans l'eau [5], etc, ainsi que sa bande

interdite comparée aux particules classiques de TiO<sub>2</sub> [6]. Le but de mon travail était de préparer des nanotubes de dioxyde de titane par une méthode hydrothermale utilisant l'anatase commercial en tant que matière première et d'appliquer ce matériau à la photodégradation du méthyl orange. Nous avons aussi étudié l'effet de la température de recuit sur les propriétés de la structure creuse. Les matériaux préparés ont été caractérisés par XDR, RD / UV-Vis, BET et IR.

Les résultats de la caractérisation ont montré que la température de calcination était un facteur clé pour déterminer l'énergie du gap et le rendement de la dégradation du méthylorange.

**Mots clés :** Environnement, Nanotubes, Photodegradation, Photocatalyse, Oxyde de titane.

#### Références

- [1] A.V. Grigorieva, E.A. Goodilin, L.E. Derlyukova, T.A. Anufrieva, A.B. Tarasov, Y.A. Dobrovolskii, Y.D. Tretyakov, *Applied Catalysis A: General*, 362 (2009) 20-25.
- [2] A. Sandoval, R. Zanella, T.E. Klimova, *Catalysis Today*, 282 (2017) 140-150.
- [3] R. Li, X. Zhu, X. Yan, D. Shou, X. Zhou, W. Chen, *RSC Advances*, 6 (2016) 100103-100107.
- [4] B.R.P. Reddy, M.V.K. Reddy, P.V.G. Reddy, D.P. Kumar, M.V. Shankar, *Tetrahedron Letters*, 57 (2016) 696-702.
- [5] V. Idakiev, Z.Y. Yuan, T. Tabakova, B.L. Su, *Applied Catalysis A: General*, 281 (2005) 149-155.

#### CP.78

### Etude par le code siesta des propriétés électroniques et magnétiques des nanorubans de carbone dopés par les atomes de bore et d'azote.

Boufala Khaled<sup>a\*</sup>, AmroucheFaiza<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia 06000, Algérie

<sup>b</sup>Département de physique, université A/Mira de Béjaia 06000, Algérie

\*email : boufalakhaled@gmail.com

#### Résumé

Nous avons étudié dans ce travail, les propriétés électroniques et magnétiques des nanorubans de carbone dopés avec les atomes de bore et d'azote. Nous avons utilisé le code pseudopotentiel siesta dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité. Trois cas sont traités à savoir, le dopage avec le bore, le dopage avec l'azote et le dopage simultané avec le bore et l'azote. Nous avons trouvé que le dopage avec le bore n'affecte pas les propriétés électroniques par contre, le magnétisme varie légèrement selon le dopage. L'énergie de cohésion des structures étudiées augmente avec l'augmentation du nombre de liaisons C-C et le moment magnétique est inversement proportionnel à la longueur de liaison moyenne. Dans le cas du dopage avec l'azote, les propriétés électroniques sont soit métalliques ou semi-conductrice, selon le dopage. En utilisant le dopage avec les deux atomes N et B, on voit que plusieurs structures électroniques émergent, entre métalliques et semi-conductrices. On tient à noter un cas important celui d'un gap fermé, obtenue correspondant à la structure (d).

**Mots clés / Keywords :** nanorubans de carbone dopés, nanoruban zigzag, code siesta.

## CP.79

**Variable range and small polaron hopping mechanisms in the high temperature range magneto-electrical transport of  $La_{0.7}Ca_{0.18}Ba_{0.12}Mn_{0.95}Ti_{0.05}O_3$  compound.**S. Boufligha<sup>a</sup>, N. Mahamdioua<sup>a</sup>, F. Meriche<sup>b</sup>, F. Denbri<sup>a</sup>, N. Soylu<sup>c</sup>, C. Terzioglu<sup>c</sup>, A. Varilci<sup>c</sup>, S.P. Altintas<sup>c</sup><sup>a</sup>LEND, Faculty of Science and Technology, Mohamed Seddik Ben Yahia University, Jijel 18000, Algeria<sup>b</sup>LEM, Department of Electronic, Mohamed Seddik Ben Yahia University, Jijel 18000, Algeria<sup>c</sup>Department of Physics, Faculty of Arts and Sciences, AIB University, Bolu14280, Turkey

\* email : boufligha.sadek@gmail.com

**Abstract**

Lanthanum manganite compound with formula  $La_{0.7}Ca_{0.18}Ba_{0.12}Mn_{0.95}Ti_{0.05}O_3$  has been successfully prepared by solid-state reaction route. Structure, electrical resistivity and magneto-resistance were experimentally characterized. The X-ray diffractograms refinement, using JANA2006 program, shows that the compound crystallizes in an orthorhombic structure, with Pnma space group. The estimated crystallite size, by Scherrer formula is about of 35 nm. Electrical resistivity measurements were carried out using four probes method under zero and one Tesla. The Debye temperature was estimated from the resistivity measurements. Using variable range hopping and polaronic hopping conduction models, the resistivity curves were fitted in the high temperature range (134 K to 300 K). The coefficient of determination  $R^2$  has been examined to define the best model for fitting. In temperature range  $T \leq \theta_{D/2}$ , 3D VRH is the best model, while adiabatic small polaron hopping model was found to be the best in temperature range  $\theta_{D/2} \leq T \leq 300K$ . Mean hopping distance was found to be between 1.217 nm and 1.518 nm. Mean hopping energy is found to be between 0.073 eV and 0.086 eV.

**Keywords** : Simple perovskite manganites, Electrical resistivity, magnetoresistance, high temperature electrical models, Variable range hopping models, small polaron hopping.

## CP.80

**Structural, electronic and optical properties of Deltamethrin using density functional method**Amel BOUTASTA <sup>a\*</sup>, Abdelhakim BENOSMAN <sup>a</sup>, Mouna CHERIT <sup>b</sup> and Leila NOUAR <sup>c</sup>.<sup>(1)</sup> Laboratoire de Physique Théorique (LPT), Université de Tlemcen, Algeria.

Principal Author's +213550457624, aboutasta@gmail.com

<sup>(2)(3)</sup> Laboratory of chemistry applied, university of 8 May 1945, Guelma, Algeria.

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

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique Théorique (LPT), Université de Tlemcen, Algeria.<sup>b</sup> Laboratory of chemistry applied, university of 8 May 1945, Guelma, Algeria<sup>c</sup> Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, university of 8 May 1945, Guelma, Algeria.

\* email : aboutasta@gmail.com

**Abstract**

Parkinson is a neurodegenerative disease of multifactorial origin involving environmental and genetic factors. Epidemiological and toxicological studies show that most neurodegenerative diseases associated with chronic exposure to pesticides. In this study, we were interested in the evaluation of the neurotoxicity of one pesticide a pyrethroid is deltamethrin (DM). All the DFT calculations of the title compound were carried out using Gaussian 09 (G09) software program package and Gauss view visualization program. The NBO of DM was found out with Gaussian NBO version 3.1 program which is implemented in the G09 package.

**CP.81****Structure and Microstructure Properties of FeNbB Nanoperm alloy prepared by mechanical alloying**T. CHABI<sup>a\*</sup>, N. BENSEBAA<sup>a</sup>, S. ALLEG<sup>a</sup>, S. AZZAZA<sup>a</sup> and J.J. SUNOL<sup>b</sup><sup>a</sup> *Laboratoire de Magnétisme et Spectroscopie des solides, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar B.P. 12, 23000 Annaba, Algérie.*<sup>b</sup> *Dep. de Fisica, Universitat de Girona, Campus Montilivi, Girona 17071, Spain.*

\* email: thaounza@yahoo.fr

**Abstract**

Fe<sub>92-x</sub>Nb<sub>8</sub>B<sub>x</sub> (x = 5, 10, 15 and 20) alloys were prepared by mechanical alloying of mixture of Fe, Nb and B powders for 50 h in a high energy planetary ball mill Retsch PM400, under argon atmosphere, using hardened steel vials and balls. Morphological changes, structural and microstructural were investigated by scanning electron microscopy and X-ray diffraction. The analysis of the SEM micrographs revealed a relatively wide distribution with a large amount on fine fragments, the majority have a size of the order of 1 μm with proportions that vary from 42% and 52% for the 5% and 20% B. The XRD results reveal the formation of a nanocomposite structure where nanocrystalline bcc α-Fe and Fe<sub>2</sub>B phases are embedded into an amorphous matrix. The FeB boride is observed for higher boron content (x = 15 and 20), and the crystallite sizes are in range of 7-24nm.

**Keywords:** Nanocrystalline materials; Mechanical alloying; Fe-Nb-B alloys; X-ray diffraction; Mössbauer spectroscopy; Magnetic properties.

**CP.82****Etude des propriétés élastiques directionnelles du monohydrure de calcite sous pression**Ghiles CHAHI<sup>a\*</sup>, Imad BELABBAS<sup>a</sup>, DjamelBRADAI<sup>b</sup><sup>a</sup> *Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et catalyse, Université A. Mira, 06000, Bèjaia, Algérie*<sup>b</sup> *USTHB, Faculté de Physique, BP 32 El alia, Alger, Algérie*

\* email : chahi.pt.pq@gmail.com

**Résumé**

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales et élastiques du carbonate de calcium monohydraté en fonction de la pression hydrostatiques de 0 à 5GPa en utilisant des calculs DFT-D. Ce sont des calculs DFT incluant les effet de Van der Waals via l'ajout d'un terme correctif à une fonctionnelle d'échange et corrélation (en général, PBE). Ces calculs ont été réalisés avec le code ABINIT. Il s'agit d'un code utilisant une base d'ondes planes et de pseudo-potentiels. Nous avons commencé à étudier les propriétés les plus générales, à savoir les propriétés structurales. Les résultats ainsi prédits sont en bon accord avec les données expérimentales. Nous nous sommes ensuite intéressé aux propriétés mécaniques dans le domaine élastique. Nous avons calculé le tenseur élastiques, à partir duquel nous avons évalué les différents modules élastiques (le module de compression, le module de cisaillement, le module de Young et le coefficient du Poisson) par les méthodes de Reuss, Voigt et Hill. Nous avons enfin analysé l'anisotropie du module de Young et de la compressibilité linéaire en déterminant leurs dépendance directionnelle.

**Mots clés:** DFT-D, DFPT, Grimme, carbonate de calcium.

**CP.83****Analyse Statique Des Plaques En Matériaux Fonctionnellement Gradués Sous L'effet Thermique**Sara CHELAHI CHIKR<sup>a\*</sup>, Bouchra ELMOSSOUESS<sup>b</sup>, Abdelhakim KACI<sup>b</sup>, Fouad BOURADA<sup>b</sup>, Abdelouahed TOUNSI<sup>b</sup><sup>a</sup>Laboratoire des Ressources Hydriques et Environnement, Université des sciences Dr Tahar Moulay de Saida, Algérie<sup>b</sup>Laboratoire des Matériaux et Hydrologie (LMH, Université Djillali liabes de Sidi Bel Abbes, Algérie

\*email : sara.chelahi.chikr@gmail.com

**Résumé**

Dans ce travail, une étude du flambement des plaques hybrides en matériau fonctionnellement gradué (FGM) est présentée en utilisant la théorie des plaques raffinées à quatre variables. Cette théorie, qui a une forte similitude avec la théorie classique des plaques dans beaucoup d'aspects, suppose une variation quadratique des contraintes de cisaillement transversales à travers l'épaisseur. De plus elle satisfait les conditions aux limites concernant l'annulation des contraintes de cisaillement transverse sur les faces supérieures et inférieures sans tenir compte du facteur de correction de cisaillement.

La plaque est constituée d'un mélange de céramique et de métal où la fraction volumique varie selon une loi de puissance, ainsi et afin de servir une base de comparaison le travail, s'est basé sur un matériau relativement différent qui est constitué dudit FGM et une fraction d'une épaisseur bien définie de céramique à la partie supérieure et une autre épaisseur en bas représentant une couche de métal. Les équations d'équilibre sont déterminées en utilisant le principe des travaux virtuels. Trois cas de chargement thermique sont considérés tels que; une distribution uniforme, linéaire et non linéaire de la température à travers l'épaisseur de la plaque.

**Mots clés:** Plaque fonctionnellement graduée, la théorie classique des plaques, des plaques hybrides, flambement des plaques.

**CP.84****Elaboration d'un biocapteur chimique pour la détection du cadmium (II) et du plomb (II) par voltammétrie en redissolution anodique à impulsions différentielles (DPASV)**Mounira Dali<sup>a\*</sup>, Amani Chrouda<sup>b</sup>, Fadhel ismail<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Synthèse organique modélisation et optimisation des procédés, Université Badji Mokhtar, Annaba, 23000, Algérie.<sup>b</sup>Laboratoire des Interfaces et des Matériaux Avancés, Faculté des Sciences de Monastir, Tunisie.

moune2004@yahoo.fr

**Résumé**

Ce travail décrit un biocapteur électrochimique basé sur (ECV/SWCNTs-CO-Biomasse) comme ligand sélectif pour la détection des métaux lourds. La voltammétrie par redissolution anodique avec balayage de potentiel pulsé (DPASV) [1-3] a été utilisée pour la détection de Cd (II) et Pb (II) dans des conditions optimisées [3-4]. Les mesures individuelles de Cd (II) et Pb (II) ont été effectuées à diverses concentrations dans un tampon d'acétate 0,1 M et pH égal à 4,5. La linéarité a été validée pour les deux métaux Cd et le Pb, la limite de détection obtenue pour ces deux métaux après un temps de préconcentration de 20 min est de  $10^{-7}$  M pour le Cd et  $10^{-8}$  M pour le Pb. L'électrode modifiée a montré une très grande sensibilité à l'égard des ions. Les sensibilités calculées à partir des courbes d'étalonnage sont respectivement de l'ordre Cd = 17,889  $\mu$ A/p [Cd (II)] et Pb = 21,983  $\mu$ A/p [Pb (II)].

**Mots clés:** Biomasse, Nanotubes de carbone à paroi simple (SWCNT), ECV modifiée chimiquement, DPASV, métaux lourds.

**Références**

- [1] Wang, J; Lu, J; Hocevar, S.B; Farias, P.A.M, Anal. Chem. 72, 3218–3222, 2000.
- [2] Liu, Z.-G; Huang, X.-J, TrAC- Trend. Anal. Chem. 60, 25–35, 2014.
- [3] J.H. Liu, X.C. Fu, X. Chen, Z. Guo, C.G. Xie, L.T. Kong, X.J. Huang, Anal.Chim. Acta.685, 21-28, 2011.
- [4] Qian. Song, Maoguo. Li, Li. Huang, Qikang. Wu, Yunyou. Zhou, Yinling. Wang, Analytica Chimica Acta. 787, 64-70, 2013.



## CP.85

**Magneto-transport properties at insulator paramagnetic regime of  
(La, Sm, Ca) MnO<sub>3</sub> simple perovskite manganite**

FatihDENBRI<sup>a\*</sup>, Nabil MAHAMADIOUA<sup>a</sup>, Faiza MERICHE<sup>b</sup>, Sevgi POLAT-ALTINTAS<sup>c</sup>, Nevin SOYLU<sup>c</sup>, Cabir TERZIOGLU<sup>c</sup>, Ahmet VARILCI<sup>c</sup>,

<sup>a</sup>LEND, Faculty of Science and Technology, Mohamed Seddik Ben Yahia University, Jijel 18000, Algeria

<sup>b</sup>LEM, Department of Electronic, Mohamed Seddik Ben Yahia University, Jijel 18000, Algeria

<sup>c</sup>Department of Physics, Faculty of Arts and Sciences, AIB University, Bolu14280, Turkey

\*email : fatih.denbri@gmail.com

**Abstract**

This work involves the preparation and structural, microstructural and magneto-transport characterization of La<sub>0.5</sub>Sm<sub>0.2</sub>Ca<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub> bulk simple perovskite manganite. The sample was prepared by solid state reaction route. X-ray diffraction and its diffractogram refinement revealed that the sample crystallize into orthorhombic structure with Pnma space group. The scanning electron microscope (SEM) micrographs show a granular character with crystallite size D=52.78 nm. The purity of the samples is checked by EDAX analysis. Electrical resistivity measurements in the range 20 K to 255 K using four-probe method reveal the presence of an insulating-metal transition at T<sub>MI</sub>=120 K under zero tesla magnetic field and shifts to 125 K with applied 1 tesla magnetic field. The temperature dependence of magnetoresistance (MR %) curve show maximum values at 110K (MR%≈58%). In the high temperature range (T>T<sub>MI</sub>), the resistivity curves has been analyzed using adiabatic small polaron hopping model (ASPH) and variable range hopping model (3D-VRH) above and below Debey temperature ( $\theta_D/2$ ), respectively.

**Keywords:** Perovskite manganite, Electrical resistivity, Magnetoresistance, Adiabatic small polaron hopping mode.

## CP.86

**L'aromaticité de Nouvelles structures moléculaires Coniques à base de C/Ge :  
Etude théorique (DFT)**

Moumena ELKEBICH<sup>a\*</sup>, Soraya ABTOUCHE<sup>a</sup>, Meziane BRAHIMI<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physico Chimie Théorique et Chimie Informatique, LPCTCI, USTHB, BP N° 32 ElAlia, Alger. Algérie

\*email : m.elkebich@gmail.com

**Résumé**

L'étude théorique au niveau DFT, sur de nouvelles structures moléculaires à base de Carbone/Germanium plus de l'hydrogène est le principal objectif de ce travail. Le calcul des valeurs NICS<sup>[1]</sup> a été effectué au niveau B3LYP / 6-31+G<sup>[2]</sup> en utilisant gaussien 03W<sup>[3]</sup>. Les paramètres NICS ont été calculés pour les deux familles de molécules : C<sub>n</sub>H<sub>n</sub>Ge<sub>n</sub>H<sub>n</sub> et C<sub>n</sub>Ge<sub>n</sub>H<sub>n</sub> avec n = 3, 4, 5, 6, 7 et 8, afin d'obtenir leur profil complet du comportement aromatique. Il est très important de comprendre les réponses optique des nouvelles espèces en particulier les polarisabilités statiques. Ainsi, dans ce travail, nous avons comparé la polarisabilité moyenne statique<sup>[3]</sup> et l'anisotropie (K<sup>2</sup>)<sup>[4]</sup> pour les espèces C<sub>n</sub>Ge<sub>n</sub>H<sub>n</sub> et C<sub>n</sub>H<sub>n</sub>Ge<sub>n</sub>H<sub>n</sub> avec

n = 3 à 8. L'anisotropie augmente en fonction du nombre d'atomes dans les cycles et que l'aromaticité des structures C<sub>n</sub>H<sub>n</sub>Ge<sub>n</sub>H<sub>n</sub> et C<sub>n</sub>Ge<sub>n</sub>H<sub>n</sub> augmente également. La polarisabilité augmente aussi en fonction du nombre d'atomes du cycle, n = 3 à 8.

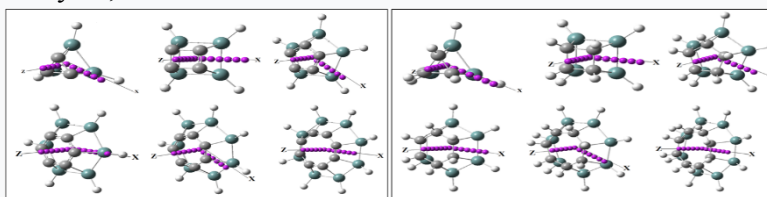


Figure 1: Calcul de NICS sur l'axe X et Z des nouvelles coniques  
C<sub>n</sub>H<sub>n</sub>-Ge<sub>n</sub>H<sub>n</sub> and C<sub>n</sub>-Ge<sub>n</sub>H<sub>n</sub> avec n = 3, 4, 5, 6, 7 and 8

**Mots clés:** DFT, Nouvelles Coniques C/Ge, NICS, Polarisation, Anisotropie.

**CP.87****Optical and Electrical Properties of ZnO and Co Doped ZnO Thin Films Prepared by Sol-Gel**Djouweyda FERKHA\*<sup>a</sup> and Douniazad MEZDOUR<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire d'Etudes des Matériaux, Université Mohamed Seddik Benyahia, BP98, Ouled Aissa 18000, Jijel, Algeria  
\*email: jawidaferkha@gmail.com.**Abstract**

This work deals with the optical and electrical properties of pure ZnO and Cobalt doped ZnO thin films. The films were deposited onto glass substrates using the spin coating technique. The effect of cobalt (Co) incorporation on electrical and optical properties was investigated by the four probe technique and UV-vis spectroscopy. Optical constants such as absorption coefficient, extinction coefficient, and refractive index as a function of photon energy were calculated from the transmittance spectra in the wavelength range between 200 nm and 800 nm. According to the transmittance curves analysis, the films exhibit a high optical transmission up to 92% for pure ZnO, and 80% for 6% Co doped ones. Doping with Co is proven to control the optical properties. Indeed, the obtained optical gap values decreased from 3.36 eV for pure ZnO to 3.08 eV with increasing the Co concentration in doped ZnO films. The electrical conductivity was found to be  $248.16 (\Omega \text{ cm})^{-1}$  when doping with 6% of Co. These films could be useful in fabricating transparent electrodes.

**Keywords:** ZnO, spin coating, optical properties, doping.**CP.88****The magnetic and structural properties of nanostructured Fe<sub>60</sub>Al<sub>35</sub>Mg<sub>5</sub> alloy synthesized by mechanical alloying**Ali .Hafs<sup>a</sup>, Salah Hamdi<sup>a</sup>, Rachid Siab<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratory of Physico-Chemistry of Materials (LPCM), University Chadli Bendjedid of El Tarf, B.P. 73, El Tarf 36000, Algeria.

\*email : hafsal2006@yahoo.fr

**Abstract**

The nanocrystalline Fe<sub>60</sub>Al<sub>35</sub>Mg<sub>5</sub> alloy was produced from elemental powders in a high-energy ball mill. A full microstructural analysis characterization of powder samples were performed by X-ray diffraction experiments as a function of milling time (0–25 h). The microstructure analysis of the microstructure of milled powders is focused on the evolution of the grain size, lattice strain and dislocations density. Experimental results demonstrated that a bcc-Fe (Al, Mg) solid solution with a mean crystallite size about 16 nm was achieved. Magnetic properties were also investigated and were related to the microstructural changes. The system showed hard magnetic behavior.

**Keywords:** FeAlMg alloy, bcc  $\alpha$ -Fe(Al, Mg), mechanical alloying, nanostructured powders, X-ray diffraction, Magnetic properties.**CP.89****The electroluminescence investigation of a light emitting diode composed of a silicon nitride film containing silicon nanocrystals**Nadjet HAFSI<sup>a</sup>, Hachemi BOURIDAH<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire d'étude des matériaux, LEM, Université de Jijel, BP 98 Ouled Aissa, Jijel, 18000, Algeria

\*email : hafsinadjet@gmail.com

**Abstract**

The electroluminescence is theoretically investigated from a light emitting device (LED). The LED consists of an aluminum anode and an indium thin oxide cathode separated by an active film composed of silicon nitride film embedded silicon nanocrystals (Si-ncs). Our approach suggests that carriers are generated from the anode under the application of a bias voltage. The carriers are then injected towards the film by the Fowler-Nordheim process and transporting throughout the film by the hopping process from a nanocrystal to another. Inside each Si-nc, the carriers can generate other carriers by the ionic

impact or recombine radiatively by the quantum confinement effect. Results show that the simulated EL presents a single peak corresponding to the quantum confinement.

**Keywords:** Electroluminescence, Silicon nanocrystals, Fowler Nordheim-process, Hopping process.

### CP.90

#### Structural and electronic properties of $Ti_{n+1}$ and $FeTi_n$ ( $n=1-7$ ) clusters

Rahida HAICHOUR<sup>a\*</sup>, Sofiane MAHTOUT<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie,

<sup>b</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie,

\*email : pgtizza@hotmail.com

#### Abstract

We investigate the equilibrium structures with their stability properties of the  $Ti_{n+1}$  clusters and  $FeTi_n$  ( $n=1-7$ ) using DFT with generalized gradient approximation (GGA) calculations and the first principles pseudopotential implemented in SIESTA method [1-2]. We show the obtained lowest-energy structures and their isomers (which have the small energy differences between different structures of each cluster) of both pure  $Ti_n$  and  $FeTi_n$ . We found that the pure  $Ti_{n+1}$  structures are more stable than the doped structures.

**Keywords :** *Ab initio* calculations, Titanium clusters

#### References

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Liutz, K. Schwarz (Ed.), Wien2k, an Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Techn. University, Wien, Austria, 2001.
- [2] Yan Zhang, Vincent Ji, J. Phys. Chem. Solids 73 (2012) 1116–1121.
- [3] C. Loschen, J. Carrasco, K.M. Neyman, F. Illas, Phys. Rev. B 75 (2007) 035115.

### CP.91

#### Characterization by Photoluminescence, Grazing Incidence X-ray Diffraction, and FEG/SEM Observations, of the Oxide Scales Grown on the PM2000 at High Temperatures

Samiha Hakkai<sup>a\*</sup>, Sofiane Achache<sup>b</sup>, Frédéric Sanchette<sup>b</sup>, Zineb Mekhalif<sup>c</sup>, Najoua Kamoun<sup>d</sup>, Abdecharif Boumaza<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire des structures, propriétés et interactions inter atomiques (LASPI2A), Faculty of Science and Technology, Abbes Laghrour University, Khenchela 40000, Algeria

<sup>b</sup>University of Technology of Troyes, Nogent Antenna

<sup>c</sup>Laboratory of Chemistry and Electrochemistry of Surfaces, University of Namur, 61 Rue de Bruxelles, B-5000, Namur, Belgium

<sup>d</sup>Faculty of Science of Tunisia, Department of Physics, physics laboratory of the condensed matter

\*Corresponding author: samihahakk@hotmail.com Tel.:0665175015, Faculty of Science and Technology, Abbes Laghrour University, Khenchela 40000, Algeria

#### Abstract

The microstructural change of a thermal oxidation on an PM2000 superalloy was investigated after a 48 hours isothermal heat-treatment. The oxides (transitions aluminas,  $\alpha$ -alumina, and mixed oxides) were characterised using the Raman spectroscopy, the Photoluminescence spectroscopy, MEB observations, and the X-ray diffraction for temperatures between 600 and 1200 ° C. The X-ray diffraction results, under conventional incidence conditions, make it possible to estimate the crystallites size and the specific surfaces of the alpha alumina. The photoluminescence analyzes at various excitation wavelengths (200, 234, 326, and 532 nm) provide important informations on the existing defects (intrinsic and extrinsic) according to the oxidation temperature.

**Key words:** PM2000, transition alumina, alpha alumina, Photoluminescence (PL) spectroscopy.

## CP.107

**Elaboration and Application of Nanomaterial for Water Depollution**

A. Nait-Merzoug<sup>a,b\*</sup>, O. Guellati<sup>a,b,c</sup>, N. Habib<sup>a,b</sup>, A. Harat<sup>b</sup>, I. Janowska<sup>c</sup>, D. Bégin<sup>c</sup>,  
N. Manyala<sup>d</sup> and M. Guerioune<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Université Mohamed Cherif Messadia de Souk Ahras, Fac. Sci, BP. 1553, 41000-Souk-Ahras, ALGERIA.

<sup>b</sup> Laboratoire d'Etude et de Recherche des Etats Condensés (LEREC), Département de Physique, Université Badji-Mokhtar de Annaba, BP. 12, 23000 Annaba, ALGERIA.

<sup>c</sup> Institut de Chimie et Procédés pour l'Energie, l'Environnement et la Santé (ICPEES) ECPM - CNRS - UdS, 25 rue Becquerel, 67087 Strasbourg Cedex 2, FRANCE.

<sup>d</sup> Department of Physics, Institute of Applied Materials, SARCHI Chair in Carbon Technology and Materials, University of Pretoria, Pretoria 0028, SOUTH AFRICA.

\* email : abenlala@yahoo.fr

**Abstract**

The Transparent In the present work, Ni/Zn based layered double hydroxide “LDHs” nanocomposites were synthesized using a simple and low cost hydrothermal synthesis system. The structure, morphology and textural physic-chemical properties of as-prepared products were investigated using different techniques: X-ray Diffraction (XRD), FT-IR Spectroscopy, Scanning Electron Microscopy (SEM) and specific surface area measurements ( $S_{BET}$ ). After that, these prepared nanomaterials were used to remove organic pollutant from water via adsorption processes.

The adsorption investigation was related to the influence of the parameters governing this adsorption process of the anionic dye of food industry tartrazine from aqueous solutions; in particular the kinetic, concentration of the solution, pH effect, sorption isotherms and temperature. The removal of this dye using this process showed that the adsorbed quantities by this kind of nanocomposites are much higher than those obtained by classical adsorbent.

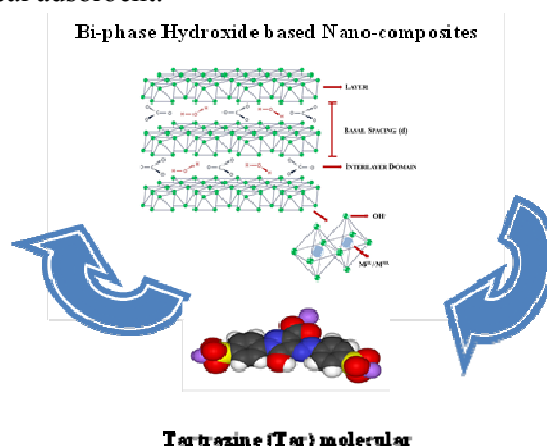


Fig 1: Tartrazine sorption on Ni/Zn nanomaterials from waste water.

**Keywords:** Nanomaterials, waste water treatment ,sorption, tartrazine, nanocomposite, Ni/Zn carbonate hydroxides, azo dyes.

**References**

- [1] Hameed B.H.; Din A.T.M.; Ahmad A.L. ; J. Hazard. Mater, 141, pp. 819–825(2007).
- [2] Fatoki O.S., Ayanda O.S.; Adekola F.A.; Ximba B.J. ;Clean Soil Air Water, 42, pp. 472–479(2013).

**CP.108****Preparation of cetyltrimethylammonium bromide modified montmorillonite for adsorption of Methylene Blue**

Houria Rezala

*Djilali BOUNAAMA University of Khemis-Miliana, Faculty of Science and Technology, Technology department, Thenia El Had Road, Khemis-Miliana, 44001, Algeria affiliation et Adresse  
email : rezala\_houria@hotmail.com*

**Abstract**

In this work, we proceeded to the preparation of cetyltrimethylammonium bromide pillared montmorillonite from deposits of Maghnia in western Algeria. These materials have been tested in the Methylene Blue adsorption. The effects of the various parameters such as the contact time, solution pH, adsorbent dosage and temperature on the Methylene Blue adsorption were investigated and were found: 4 hours, pH 13, 1 g/L and room temperature, respectively. The results obtained showed that the adsorption kinetics could be well described by the pseudo-second order kinetic model, cetyltrimethylammonium bromide pillared montmorillonite gave a better adsorption capacity compared to the starting montmorillonite and the thermodynamic results indicated an exothermic and a spontaneous process.

**Keywords :** adsorption, Methylene Blue, CTAB intercalated clay...

**CP.109****Synthesis and characterisation of diatomite supported Ti-Fe nanoparticles for optical property**Walid REZIG<sup>a\*</sup>, Mohammed HADJEL<sup>b</sup>

*<sup>a\*,b</sup>Affiliation et Adresse Laboratoire des Sciences, Technologie et Génie des Procédés LSTGP ; Faculté de Chimie ; Département de Génie Chimique ; Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf USTO-MB ; BP 1505 El M'naouer Bir El Djir 31000 Oran Algeria ; walidrzg@gmail.com / walid.rezig@univ-usto.dz  
\*email : walidrzg@gmail.pseudo@messengerie.com*

**Abstract**

Titanium prepared ferric diatomite modified composite as catalyst and characterized in this study. The titanium prepared ferric diatomite modified called " TDF " was made a surface modification treatments including Iron ( III ) nitrate nanohydrate  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  then titanium dioxide  $\text{TiO}_2$  degussa P25 deposition on raw diatomite .In the  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  treatment, surface silica of diatomite and  $\text{TiO}_2$  degussa P25 were partially dissolved in The iron ( III) nitrate nanohydrate  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  by means of x-ray fluorescence ( XRF ), scanning electron microscopy ( SEM ), thermogravimetric analysis ( TGA ), differential scanning calorimetry ( DSC ), and UV-visible diffuse reflectance spectroscopy ( DRS ).The surface area of TDF is  $855 \text{ m}^2/\text{g}$ .The surface modification also increased the point of zero charge (  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  ) values to 6 for titanium prepared ferric diatomite modified " TDF " with gap band was  $E_g = 1.1 \text{ eV}$  by UV-visible DRS technique.

**Keywords :** Titanium, ferric, diatomite,  $\text{pH}_{\text{PZC}}$ , band gap.

## CP.110

**Synthesis of the CuFeSe<sub>2</sub> thin films for solar cells using shs technique and thermal evaporation**L. Saad Hamideche <sup>a,\*</sup>, F. Boutarfa <sup>b</sup>, A. Amara <sup>a</sup>, A. Benaldjia <sup>a</sup>, N. Benslim <sup>c</sup>.<sup>a</sup>Laboratoire d'Etude et de Recherche des Etats Condensés (LEREC), Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar, Annaba, Algérie<sup>b</sup>Complex of Arcielor Metal of Elhadjar, Annaba, Algeria.<sup>c</sup>Laboratoire d'Etude de Surfaces et Interfaces de la Matière Solide (LESIMS), Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar, Annaba, Algérie.<sup>\*</sup>Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Mentouri, Constantine, Algérie.**Abstract**

The samples of semi conductors of CuFeSe<sub>2</sub> were prepared by selfpropagating high temperature synthesis (SHS) and direct thermal evaporation onto pre-cleaned glass substrates, using a BALZERS coating unit. The as deposited films were annealed in a vacuum at different temperatures. The structural characterization of the as-deposited CuFeSe<sub>2</sub> films of various thicknesses has been carried out by X-ray diffraction method. The diffractogram revealed that the CuFeSe<sub>2</sub> films are polycrystalline in nature with chalcopyrite structure. The surface morphology of the as-deposited CuFeSe<sub>2</sub> thin films has been studied using scanning electron microscope. The transmittance characteristics of the CuFeSe<sub>2</sub> films have been studied using double beam spectrophotometer in the wavelength range 4000–15000 Å. CuFeSe<sub>2</sub> films are found to have a direct allowed transition and the optical band gap is found to be in the range 0.6 eV.

**Key words:** Conversion photovoltaic, CuFeSe<sub>2</sub>, optical properties.

## CP.111

**Modélisation théorique de la dynamique précessionnelle de la surface: alliage A<sub>x</sub>B<sub>1-x</sub>**Lamia SAIM <sup>a,\*</sup>, Rachid TIGRINE <sup>a,b,c</sup>, Antoin KHATER <sup>b</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, université M. Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie.<sup>b</sup>Institut des Molécules et des Matériaux du Mans UMR 6283, Université du Maine, 72085, le Mans, France<sup>c</sup>Département Science de la Matière Faculté des Sciences et de Technologie Université Ahmed Draia Adrar.<sup>\*</sup>email : lamiasa2010@yahoo.fr**Résumé**

Dans ce travail, nous étudions les propriétés précessionnelles d'une surface alliage métallique du type A<sub>x</sub>B<sub>1-x</sub>. Notre investigation est basée sur l'application de la méthode théorique de raccordement et de l'Hamiltonien d'Heisenberg décrivant tous les interactions entre premiers proches voisins.

Les modes précessionnel localisés au voisinage de la surface alliage, ainsi que les densités d'états de magnons localisés (LDOS), ont été déterminés en fonction des grandeurs physiques caractérisant le système étudié. Les résultats obtenus montrent que, le nombre et la nature des branches localisées induites par la surface alliage ainsi que les spectres des LDOS dépendent fortement des paramètres de la surface alliage et de l'ordre structurel des atomes de la surface.

**Mots clés / Keywords :** surface alliage, méthode de raccordement, magnons de surface.

## CP.112

**Effet de la température de calcination sur les céramiques sans plomb du type perovskite préparées par réaction à l'état solide conventionnelle**K. SEDDA <sup>a, b\*</sup>, R. DJAFAR <sup>b</sup>, K. BOUMCHEDDA <sup>b</sup>, F. BOUKAZOUHA <sup>a</sup><sup>a</sup>Research Center in Industrial Technologies CRTI, P. O. Box 64, Cheraga. Algeria<sup>b</sup>UR-MPE, Université M'Hamed Bougara Boumerdès, Algérie<sup>\*</sup>E-mail: kamelsedda@gmail.com, k.sedda@crti.dz**Résumé**

Dans ce travail, une série des céramiques BaTiO<sub>3</sub> et CaTiO<sub>3</sub> ont été préparées avec succès à partir de différentes matières premières le carbonate de baryum (BaCO<sub>3</sub>) le carbonate de calcium (CaCO<sub>3</sub>) et le dioxyde de titane (TiO<sub>2</sub>) par la technique de réaction à l'état solide classique sous différentes températures de calcination. Ces matériaux sont mélangés pendant 6 heures et frittés à des températures

de (1200 °C et 1300 °C) pendant 2 heures. La température du frittage a été variée pour étudier ses effets sur la microstructure. Les Paramètres structurels ont été analysés en utilisant la diffraction des rayons X (DRX), Microscope électronique à balayage (MEB). Une analyse thermique différentielle couplée à une analyse thermogravimétrique (ATG-ATD) a été effectuée principalement afin de suivre le processus de décomposition des précurseurs et la formation de la phase pérovskite. Les résultats d'analyse de DRX montrent bien la synthèse de la phase pérovskite ainsi que ont mis en évidence la formation de la phase  $Ba_2TiO_4$  en plus de la phase  $BaTiO_3$ . Un temps de maintien supérieur à 4 h permet une réaction totale entre les deux poudres en présence et la formation de la phase orthorhombique  $CaTiO_3$  de type Pnma.

**Mots clés:** céramique, synthèse, microstructure,  $BaTiO_3$ ,  $CaTiO_3$ , pérovskite

### CP.113

#### A numerical investigation on the critical buckling load of nanocomposites plate based on carbon nanotubes.

Tayeb SI TAYEB<sup>2</sup>, Mohamed ZIDOUR<sup>2,3,\*</sup>, Houari HIRACHE<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Laboratory of Materials et Hydrology, University of Sidi Bel Abbés, BP 89 Cité Ben M'hidi, 22000 Sidi Bel Abbés, Algeria.*

<sup>2</sup> *Université Ibn Khaldoun, BP 78 Zaaroura, 14000 Tiaret, Algeria.*

<sup>3</sup> *Laboratory of Geomatics and Sustainable Development, Ibn Khaldoun University of Tiaret, Algeria.*

#### Abstract

The incorporation of carbon nanotubes in a polymer matrix makes it possible to obtain nanocomposite materials with exceptional properties and important it's in this scientific background that this work was based. There are several theories that deal with the behavior of plaques, in this research based on the Mindlin-Reissner theory that takes into account the sheer effect transversal, for analysis the critical buckling load of a reinforced polymer plate by carbon nanotubes. The equations of the model are derived and the critical loads of axial compression buckling are obtained. With different provisions of nano-tubes of carbon in the polymer matrix, the effects of different parameters such as, the fractions volumic, the plate geometric ratios and the number of modes on the load critical buckling are analyzed and discussed.

**Keywords:** nanotubes; shear deformation; nanocomposite buckling, nano-composite, volume fractions

### CP.114

#### Ab initio Calculations of Ternary Full Heusler Alloy $Co_2NbZn$

Amel Slamani<sup>\*ab</sup>, Friha Khelfaoui<sup>c</sup>, Mohammed Ameri<sup>bd</sup>

<sup>a</sup> *University Center Ahmed Zabana of Relizane, Algeria*

<sup>b</sup> *Laboratory Phisico Chemistry of adveanced materials, University of Djillali Liabes- Sidi Bel Abbes, Algeria*

<sup>c</sup> *Faculty of Sciences, Department of Physics, university of Moulay Tahar Saida, 20000, Algeria*

*Physics Departement, Faculty of Exact Sciences, University of Djillali Liabes- Sidi Bel Abbes, Algeria*

\* *email: slmnamel@yahoo.fr/amel.slamani@cu-relizane.dz*

#### Abstract

In this study, a first principle calculations of physical properties of the ferromagnetic Full Heusler compound  $Co_2NbZn$  are presented. The full potential linear augmented plane wave plus local orbitals (FP-LAPW+lo) approach based on the density functional theory (DFT) within the GGA approximation exchange –correlation with is used. The calculated band structure, density of states and magnetic moment shown the origin the metallic behaviour in  $Co_2NbZn$  compound.

**Keywords:** ferromagnetic; Full Heusler; FP-LAPW+lo, density functional theory, GGA, band structure



## CP.115

**The effect of disorder on electronic and magnetic properties of  $(\text{Ni}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{MnSn}$  quaternary Heusler alloys**Y. Zaoui<sup>a,\*</sup>, L. Seddik<sup>a</sup>, L. Beldi<sup>a</sup>, S. Amari<sup>a,b</sup>, and B. Bouhafsa<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Modélisation et Simulation en Sciences des Matériaux, Université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès, Sidi Bel-Abbès, 22000, Algeria.<sup>b</sup>Faculty of Nature and Life Science, Hassiba Benbouali University of Chlef, 02000, Algeria.<sup>3</sup>Physics Department, University of South Africa, Pretoria, 0001, South Africa\*email : [yamina.zaoui2016@gmail.com](mailto:yamina.zaoui2016@gmail.com)**Abstract**

In this work we present the structural stability, electronic and magnetic properties of mixed Heusler alloys  $(\text{Ni}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{MnSn}$ . These compositions are studied theoretically by *ab-initio* calculations using full-potential augmented plane-wave method (FP-LAPW). We performed these calculations for various possible occupations of Ni and Co sites in the crystallographic lattice to determine which of these configurations has the lowest total energy. It was shown that obtained equilibrium lattice parameters and magnetic moments agree well with available experimental data. In particular, the observed change of total magnetic moment interpreted by a linear variation of the magnetic moment of manganese and cobalt atoms.

**Keywords** :Density functional theory, Spin-polarization, Electronic structure, Heusler alloys.

## CP.116

**Structural and mechanical properties of TmB2 and TiB2 compounds**FatihaZAZOUA<sup>a,\*</sup>, AliZAOUI<sup>b</sup><sup>a</sup>laboratoire de physique computationnelle des Matériaux (LPCM) Universsité Djilali Liabès de sidi bel abbès<sup>b</sup>laboratoire de physique computationnelle des Matériaux (LPCM) Universsité Djilali Liabès de sidi bel abbès\*email : [zazoua\\_f@yahoo.fr](mailto:zazoua_f@yahoo.fr)**Abstract**

We study in this paper the macroscopic hardness of TiB2 and TmB2 compounds and their corresponding ternary alloys  $\text{Tm}_{1-x}\text{Ti}_x\text{B}_2$  by calculating the mechanical properties and electronic structure of these systems. The mechanical results show that TiB2 compound is found ultra-hard compared with TmB2 and the covalent B-B bonds have an enormous impact on the macroscopic hardness of these systems. These results are in excellent agreement with experiment. In addition, a large charge density was observed in the TiB2 compound comparing to that of TmB2 and of the considered alloys. For short interatomic distances B-B, the hardness in  $\text{Tm}_{1-x}\text{Ti}_x\text{B}_2$  alloys is important. The main objective in this work will be to establish a detailed comparison of the macroscopic hardness, and bonding mechanisms in the di-borides of rare earth (TmB2), of the transition metal (TiB2) and of their ternary alloy corresponding  $\text{Tm}_{1-x}\text{Ti}_x\text{B}_2$  by varying the concentration of titanium. This paper is organized as follows: Section I gives a brief description of the method used in the calculations. The calculated results are presented in Sec. II with analyses. A summary is presented in Sec. III.

**Keywords** DFT, Elastic constants, Hardness, Diborides, Rare earth elements.



**CP.117****Synthèse verte de nano-objet à base d'argent en utilisant l'extrait de feuille de plante**Sabrina HALIT<sup>a\*</sup>, Mourad MECHOUET<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique et Chimie des Matériaux, Faculté des sciences, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou.

\* email : halit.sabrina@yahoo.com

**Résumé**

Ce présent travail porte sur la biosynthèse de nano-objets à base d'argent en utilisant un extrait de plante aqueux comme agent réducteur et stabilisant. Cette méthode a fait l'objet d'une attention considérable en tant qu'approche très prometteuse et alternative aux méthodes conventionnelles de synthèse de nanoparticules. Afin d'obtenir des nanoparticules de tailles et de formes contrôlées, plusieurs paramètres tels que le temps de contact, le PH et la température ont été étudiés. Les nanoparticules obtenues ont été caractérisées en utilisant la spectroscopie UV-Visible (UV-vis), la spectroscopie infrarouge à transformé de fourrier (IRTF), et la microscopie électronique à balayage (MEB).

**Mots clés:** Synthèse verte, nanoparticules d'argent, extrait de feuille de plante, UV, FTIR.

**Références**

[1] K. Jyoti M. Baunthiyal A. Singh, Journal of Radiation Research and Applied Sciences, no. 3, vol. 9, pp. 217-227(2016).

**CP.118****Annealing effect on the photoluminescence properties of Pr<sup>3+</sup> doped YPO<sub>4</sub>****Nanophosphors**BadisKAHOUADJI<sup>a\*</sup>, Lakhdar GUERBOUS<sup>b</sup><sup>a</sup>A. Mira University of Bejaia, Road of Targa Ouzemour, Bejaia, 06000, Algeria<sup>b</sup>Laser Department/ Nuclear Research Centre of Algiers (CRNA), 02, Boulevard Frantz Fanon, B.P. 399, Algiers, 16000, Algeria.

\* email : kahouadji.badis08@gmail.com

**Abstract**

Nanopowders of YPO<sub>4</sub> phosphors with different Pr<sup>3+</sup> doping were successfully prepared by a sol gel method under different synthesis conditions. The crystallite size and strain show a strong dependence on the Pr<sup>3+</sup> doping concentration and on the annealing temperature. By annealing at 300 °C one can obtain the xenotime structure of the pure YPO<sub>4</sub>. The crystallite size can be controlled by controlling the annealing temperature and it increases with increasing the annealing temperature. The room temperature inter-configurational 4f<sup>2</sup> → 4f5d and intra-configurational 4f<sup>2</sup> → 4f<sup>2</sup> emission-excitation transitions spectra are measured and investigated. Upon 4f<sup>2</sup> → 4f5d excitation transition, all the samples present broad intense emission bands attributed to 4f5d → 4f<sup>2</sup> emission transitions and peaks in red region assigned to <sup>1</sup>D<sub>2</sub> → <sup>3</sup>H<sub>4</sub> transition as photon cascade emission phenomena (PCE). The presence of only <sup>1</sup>D<sub>2</sub> → <sup>3</sup>H<sub>4</sub> transition is discussed. In addition, the <sup>1</sup>D<sub>2</sub> energy level lifetimes as well as the refractive indexes were determined and discussed.

**Keywords :** YPO<sub>4</sub>:Pr<sup>3+</sup>, Nanophosphors, Sol-gel, Annealing temperature

## CP.119

**Propriétés Structurales, Electroniques, et Magnétiques de la nouvelle classe des alliages Heusler CsSrX (X= C, Si), Etude du premier principe.**A.M.KHETIR<sup>a\*</sup>, H.ROZALE<sup>b</sup><sup>a</sup>Condensed matter and sustainable development laboratory Physics department, faculty of science University of Sidi-bel-Abbes Sidi-Bel-Abbes, 22000-Algeria<sup>b</sup> Condensed matter and sustainable development laboratory Physics department, faculty of science University of Sidi-bel-Abbes Sidi-Bel-Abbes, 22000-Algeriaemail : [Medkhetir69@gmail.com](mailto:Medkhetir69@gmail.com) ; [hrozale@yahoo.fr](mailto:hrozale@yahoo.fr)**Résumé**

Dans le domaine de recherche du ferromagnétisme semi métallique, on a fait l'étude structurale électronique et magnétique du composé hypothétique  $x\text{CsSr}$  ( X= C, Si) en utilisant la méthode ( DFT) la théorie de la fonctionnelle de la densité avec l'approximation du gradient généralisé (GGA) et la GGA + mBJ, et la forte polarisation en spin des orbitales p des Atomes C, et Si ; s'avers l'origine de l'état fondamental ferromagnétique conduisant à moment magnétique total égal à 1  $\mu\text{B}$ .

**Mots clés:** Heusler, Ferromagnétique, DFT.

## CP.120

**Ab-initio study of the electronic structures of metal dichalcogenides van der Waals heterostructures**Fayssal MAHROUCHE<sup>a\*</sup>, Karim. REZOUALI<sup>a</sup>, Sofiane MAHTOUT<sup>a</sup>, and Foudil ZAABAR<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des sciences exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie\*email : [mahrouche\\_fayssal@yahoo.fr](mailto:mahrouche_fayssal@yahoo.fr)**Abstract**

In this work, we report the structural, vibrational, and electronic properties of MoSe<sub>2</sub>/WSe<sub>2</sub> heterobilayer obtained by a nanostructured combination of isolated MoSe<sub>2</sub> and WSe<sub>2</sub> monolayers. The calculations were carried out using density functional theory (DFT) taking into account the effect of spin-orbit coupling. The phonon characteristics were calculated within density functional perturbation theory (DFPT). We found the bandgap of this vertical heterostructure to be smaller than the bandgaps of the subunits while its spin-orbit splitting is intermediate between those of the isolated layers.

We also found the existence of three types of phonons, i.e., MoSe<sub>2</sub> -like phonons, WSe<sub>2</sub> -like phonons, and hybrid - like phonons. The hybrid phonons originated from the vibrations between the isolated monolayers.

**Keywords :** Transition metal dichalcogenides WSe<sub>2</sub> , MoSe<sub>2</sub> , Heterostructures, Band structures, phonons, First-principles calculations.

**CP.121****Hydrothermal synthesis, crystal structure and luminescent properties of a new praseodymium coordination polymer of glutarates and 1,10-phenanthroline**

Roza MAOUCH<sup>a</sup>, Imane ZAAMOUCHE<sup>a</sup>, Sabrina BELAID<sup>a</sup>, Belkacem BENMERAD<sup>a</sup>, Sofiane BOUACIDA<sup>b,c</sup> and Olivier GUILLOU<sup>d</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse, Campus Tagua Ouzemmour, Université Abderrahmane Mira, Bejaia, 06000, Algérie,

<sup>b</sup>Département Sciences de la matière, Faculté des Sciences exactes et Sciences de la nature et de la vie, Université Larbi Ben M'hidi, Oum El Bouaghi, Algérie,

<sup>c</sup>Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale, CHEMS, Université des frères Mentouri, Constantine 1, 25000, Algérie,

<sup>d</sup>Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226, Equipe Chimie du Solide et Matériaux, 20, Avenue des buttes de Coësmes, 35708 Rennes.

bbelaid Sabrina@gmail.com

**Abstract**

The complex, [Pr(glu)(Hglu)(phen)].2H<sub>2</sub>O (glu = glutarate, Hglu = hydrogen glutarate, phen = 1,10-phenanthroline) has been synthesized from hydrothermal reaction of PrCl<sub>3</sub>, glutaric acid and 1,10-phenanthroline. The compound crystallizes in the triclinic system. The Pr<sup>3+</sup> is nine-coordinated and possesses an N<sub>2</sub>O<sub>7</sub> environment surrounded by two nitrogen atoms from a chelating phen molecule, three oxygen atoms from two Hglu ligands and four oxygen atoms from glu ligands. The Pr–O and Pr–N bond lengths vary from 2.41 to 2.73 Å and from 2.64 to 2.72 Å, respectively. One carboxylate group, of the glutarate ligand, is in bidentate mode and other bridges two Pr(III) ions, with Pr···Pr distance of 4.0475(2) Å forming 1D chain along *a*-axis. While in the hydrogen glutarate ligand, one carboxylate groups coordinates to Pr(III) in chelates/bridging tridentate and the other carboxylate groups are not coordinated. Lattice water molecules are stabilized in the crystal by hydrogen bonding with the uncoordinated carboxylate group of Hglu ligand. The emission spectrum of the complex in solid state is composed of nine emission peaks: at 477-505, 516-550, 580-635, 645, 680, 698 and 730 nm; for the intrinsic transitions of Pr(III) corresponding to the f–f transition. Emitting red orange light with CIE coordinates (0.56, 0.37).

**Keywords** : polymères de coordination, phenanthroline, photoluminescence, diffraction des rayons X.

**CP.122****Elastic properties and Sound velocities of calcite under hydrostatic pressure**

Ouahiba NAMIR\* and Imad BELABBAS

*Equipe de Cristallographie et Simulation des Matériaux, Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse, Université Abderrahmane Mira, Bejaia, 06000 Algérie*

\*email : [namirouahiba@yahoo.fr](mailto:namirouahiba@yahoo.fr)

**Abstract**

Pseudopotential plane-wave method based on density functional theory and density functional perturbation theory within the Perdew-Burke-Ernzerhof exchange correlation functional is applied to study the effect of pressure on the elastic properties of calcite. The independent elastic constants, the elastic moduli, speed of acoustic waves as well as the Debye temperature under pressure are studied. The results obtained are generally in good agreement with the available experimental data reported in the literature.

**Keywords**: Calcite, CaCO<sub>3</sub>, Elastic properties, Sound velocities, high pressure, DFT, DFPT.

## CP.123

**Physico-chemical properties, of ternary AgBr<sub>1-x</sub>I<sub>x</sub> alloys in Zinc-Blend(B3), and Rock-Salt(B1), structures**Hamza REKAB-DJABRI<sup>a\*</sup>, Souad FASLA-LOUHIBI<sup>b</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Micro et de Nanophysiques LaMiN ENP d'Oran Algérie<sup>b</sup>Faculté SNV.ST Université de Bouira Algérie

\* email : Rekabdjabrihamza@yahoo.fr

**Abstract**

In this work, first principles calculation of structural properties of novel ternary alloys I<sub>x</sub>Br<sub>1-x</sub>Ag in B1 (rocksalt) and B3 (zinc-blende) structures are presented. The calculations are performed by the full-potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO) method within the framework of functional theory (DFT). The exchange and correlation potential energies are treated according to the local density approximation (LDA). A linear relationship has obtained for equilibrium lattice constants versus I. The calculated electronic properties show that AgBr<sub>1-x</sub>I<sub>x</sub> alloys in B3 Structure, have a direct band gap  $\Gamma$ - $\Gamma$  for all concentrations x, suggesting the possibility of their use in the long wavelength optoelectronic applications. By incorporating the basic optical properties, we discuss the dielectric function, refractive index, optical reflectivity, the absorption coefficient, and optical conductivity in terms of incident photon energy up to 13.5 eV.

**Keywords** :Silver haldes, Density functional theory DFT; Constants elastic; Local density approximation (LDA).

**References**

- [1] H. Rekab-Djabri, S. Louhibi-Fasla, Eur. Phys. J. Plus (2017) 132: 471  
 [2] A. Yoshiasa, K. Koto, S. Emura, F. Kanamaru, Journal de Physique Colloques, C8 (1986) 47

## CP.124

**First principal calculations of properties of iron doped arsenic clusters FeAs<sub>n</sub> ( n = 1 - 20)**S. SAFER<sup>a</sup>, S. MAHTOUT<sup>a</sup>, K. REZOUALI<sup>a</sup>, C. SIOUANI<sup>a,b</sup> and F. RABILLOUD<sup>c</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie.<sup>b</sup>Département des Sciences de la matière, Faculté des Sciences, Université d'Alger 1, 16000 Alger, Algérie<sup>c</sup>Institut Lumière Matière, UMR5306 Université Lyon1-CNRS, Université de Lyon, 69622 Villeurbanne Cedex, France

Corresponding author: sofiane\_technologie@yahoo.com

**Abstract**

The arsenic clusters have been the topic of many experimental and theoretical studies [1-3]. The principal reasons of this interesting subject are the numerous potential applications of arsenic in different nanotechnological field such as to change the mechanical properties of lead and copper alloys and as an additive to eliminate unwanted coloration of glass [4]. Also, the technological use of arsenic as passive layers in the semiconductor industry is well known. In this work, we report the structural, electronic and magnetic properties of iron doped arsenic clusters FeAs<sub>n</sub> (n = 1-20). All this properties have been investigated using the density functional theory (DFT) with generalized gradient approximation functional (GGA) and pseudo-potential implemented in the SIESTA program. We find that the iron doped arsenic clusters FeAs<sub>n</sub> are more stable comparatively to the corresponding pure As<sub>n+1</sub> clusters. The HOMO-LUMO gaps decrease with the increasing of the cluster size for pure and doped structures. The HOMO-LUMO gaps of FeAs<sub>n</sub> clusters are generally smaller than those of pure arsenic clusters which mean that the reactivities of the doped clusters are strongly changed after the substitution of the Fe atoms in the arsenic cage clusters. Consequently, the metallic character dominates in the relaxed FeAs<sub>n</sub> clusters. On the other hand, the magnetic properties of FeAs<sub>n</sub> is largely influenced by the introduction of Fe atom in the structures and the total spin magnetic moments depend on the atomic

position of Fe atom in the clusters and the number of his neighboring As atoms. We have also examined the vertical electron affinity (VEA) and the vertical ionization potential (VIP) of  $\text{FeAs}_n$ . We found that there are an odd-even oscillation in both AE and IP as a function of size. This means that some  $\text{FeAs}_n$  clusters have specific properties as a function of the number of atoms and they are more stables than the neighboring others clusters.

**Keywords:** Clusters, As, Fe, DFT, GGA, structural, electronic, magnetic, VEA, VIP .

### References

- [1]. X. bai, Q. C. Zhang, J. C. Yang, H. M. Ning, J. Phy. Chem. A 116 (2012) 9382 - 9390.
- [2]. K. S. Bhatia, W. E. Jones, Can. J. phy. 49 (1971) 1773 - 1782.
- [3] S.Safer, S.Mahtout, K.Rezouali, M.A.Belkhir and F.Rabilloud, Comp.Theo.Chem.1090(2016)23-33
- [4]. M.Z. Shen, H.F. Schaefer, J. Chem. Phys. 101 (1994) 2261–2266

### CP.125

#### DFT study of electronic and magnetic properties of small doped Germanium $\text{MGe}_n$ ( $\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Cs}$ et $\text{Ba}$ ) clusters ( $n=1-12$ )

Y. TARIKET<sup>1,2</sup>, S. MAHTOUT<sup>1</sup>

<sup>(1)</sup> Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie.

<sup>(2)</sup> Département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Sétif, 19000 Sétif, Algérie.

E-mail : [y\\_tariket@yahoo.fr](mailto:y_tariket@yahoo.fr), Tél. : +213 552 720 252

### Abstract

In this work, the structural, electronic and magnetic properties of the doped Germanium  $\text{MGe}_n$  ( $\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Cs}$  and  $\text{Ba}$ ) ( $n=1-12$ ) clusters have been investigated by using the spin-polarized density functional theory (DFT) calculations with the PBE exchange correlation energy functional. For comparison, the lowest energy structures and their corresponding isomers for pure Germanium clusters are investigated and analyzed. Low-lying energy structures include two dimensional and three dimensional geometries. Relative stabilities of  $\text{Ge}_{n+1}$  and  $\text{MGe}_n$  clusters have been analyzed as a function of their averaged binding energies and the difference between the highest occupied and the lowest unoccupied molecular orbital (HOMO-LUMO) gaps in spin up and spin down. We have explored different low-lying isomers and determined the ground state structures for the  $\text{Ge}_{n+1}$  clusters. The ground state geometry of pure clusters obtained has been doped with one alkaline earth metal atom ( $\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Cs}$  et  $\text{Ba}$ ) by substitution for many possible positions. The magnetism calculations of  $\text{MGe}_n$  clusters indicate that the magnetic moments are strongly related to the geometries and the position of doped atom in the cluster.

**Keywords :** DFT, SIESTA,  $\text{MGe}_n$  clusters, structural, electronic and magnetic properties.

### CP.126

#### Caractérisation électrochimiques de composites nanofibreux à base de polyaniline et d'oxyde de manganèse ( $\text{PANI}/\text{MnO}_2$ ) pour des propriétés de stockage d'énergie

Assia Tounsi<sup>\*1</sup>, Farid HABELHAMES<sup>1</sup>, Ahmed BAHLOUL<sup>1</sup>, Abdelfetteh SAYAH<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire d'Electrochimie et Matériaux (LEM), Département de Génie des Procédés

Faculté de Technologie, Université Ferhat Abbas Sétif-1, 19000 Sétif, Algérie

\*Email: [tounsiassia56@gmail.com](mailto:tounsiassia56@gmail.com),

### Resumé

Une méthode d'électrodéposition par chrono ampérométrie a été proposée pour synthétiser la polyaniline ( $\text{PANI}/\text{MnO}_2$ ) dans l'aniline,  $\text{H}_2\text{SO}_4$  et solution aqueuse de  $\text{MnSO}_4$  des particules de  $\text{MnO}_2$  sont répartis uniformément sur le PANI Pour évaluer la performance des matériaux tels que préparés comme électrodes de supercondensateurs, on a effectué des mesures de voltampérométrie cyclique, de décharges de charges galvanostatiques et de spectroscopie d'impédance électrochimique et MEB.

Les résultats obtenus montrent que les particules de  $\text{MnO}_2$  sont incorporées dans la matrice polymère (PANI). De plus, le matériau composite (PANI/  $\text{MnO}_2$ ) présente une conductivité électrique modérée par rapport au film PANI pur. Il est à noter que le matériau composite présente une amélioration significative des propriétés électrochimiques qui nous renseignent sur les applications dans les supercondensateurs.

### CP.127

#### Optoelectronic properties of layered transition metal dichalcogenides

Foudil ZAABAR <sup>a\*</sup>, Karim REZOUALI <sup>a</sup>, Sofiane MAHTOUT <sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des sciences exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie

\*email : foudil\_zaabar@hotmail.com

#### Abstract

Investigating the electronic structures of the single-layer and heterobilayer of dichalcogenides  $\text{MoSe}_2$  and  $\text{WSe}_2$  we observe an unusual nature of their excitations. To do so, we used first-principles methods based on density-functional theory (DFT) [1,2] and many-body perturbation theory (MBPT - the *GW* approximation and the Bethe-Salpeter equation) [3,4]. The specific properties of the subunits, which play the role of building blocks in this van der Waals heterostructures are basically preserved. For example, the semiconducting character of the monolayers is maintained in the heterostructure and only the nature of the band gap was changed. Indeed, our calculations show clearly that the building blocks are direct semiconductor at K point of the Brillouin zone in the visible range while the heterostructure shows type -II band alignment with an indirect gap. Our results open up perspectives to create new low-dimensional materials with customized characteristics.

**Keywords :** heterostructures, LTMDs,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{WSe}_2$ , *GW*, *DFT*.

### CP.138

#### A Green Synthesis of poly(styrene-co- 1,3,5-trioxane) Using an Ecologic Catalyst Montmorillonite nanocomposite (Maghnite-H<sup>+</sup>)

Nabil HAMAM<sup>a,b,\*</sup>, Mohammed Issam FERRAHI<sup>b</sup>, Mohammed BELBACHIR<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Department of Process Engineering, Faculty of Science and Technology, University of Mustapha Stambouli, Mascara, Algeria.

<sup>b</sup>Polymer Chemistry Laboratory, Department of Chemistry, Faculty of accurate and applied science, University of Oran 1 Ahmed Ben Bella BP N° 1524 El M'Naouar, 31000 Oran, Algeria.

\*email : nabilpolymere@gmail.com

#### Abstract

The copolymerization of 1,3,5-trioxane (TOX) with styrene (ST) catalyzed by efficient and environmentally friendly catalyst called Maghnite-H<sup>+</sup> was investigated, in the presence of a natural Algerian montmorillonite clay modified  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , known as Maghnite-H, as proton source, a non-toxic and an efficient catalyst for cationic polymerization of many vinylic and hetero-cyclic monomers, this ecological catalyst replaces usual toxic catalysts such as Lewis and Bronsted acids, the oxonium ion of 1,3,5-trioxane (TOX) and styrene (ST) propagated the reaction of copolymerization, the operating conditions were opted in order to obtain a maximum yield of the linear polymer and a high average molecular mass as well. We have studied the kinetic of the reaction by the effect of the time, the temperature, the amount of Maghnite-H<sup>+</sup> and the proportion of monomers according to the changes in yield and the intrinsic viscosity, the structure of polymers obtained was confirmed by IR analysis. <sup>1</sup>H NMR.

**Mots clés / Keywords :** 1,3,5-trioxane (TOX), styrene (ST), nanocomposite.

**CP.139****Synthèse de ZnO dopé Ce et Co par co-précipitation et effet du dopage sur les propriétés structurales.**Amina HAMIHAM<sup>a\*</sup>, Yamina BEGGAH<sup>b</sup><sup>a</sup>Faculté de Science et Technologie, Université Mohamed Seddik Ben Yahia, Jijel 18000, Algérie<sup>b</sup>Department de Physique, Faculté de Science exact et informatique, Université Mohamed Seddik Ben Yahia, Jijel 18000, Algérie\*email : [AminaHamiham@yahoo.fr](mailto:AminaHamiham@yahoo.fr)**Résumé**

L'étude menée dans le cadre de ce travail consiste à synthétiser des nanoparticules de ZnO non dopées et dopées avec du Ce et Co, à des concentrations de 1%, 3%, 5%, 7% et 10%, par la méthode chimique de co-précipitation, qui est une méthode simple, non coûteuse et facile à mettre en œuvre, par le mélange des deux précurseurs goutte à goutte en utilisant des solutions d'acétate de zinc dihydraté, d'ammoniac et d'acide chlorhydrique comme réactifs. Les poudres de ZnO synthétisées ont été caractérisées à l'aide de diffraction des rayons X (DRX). Les résultats de DRX confirment que le ZnO cristallise dans la structure hexagonale de l' wurtzite avec une orientation préférentielle suivant les plans (101), et montrent que les tailles moyennes des cristallites étaient d'environ 65 et 43 nm.

**Mots clés:** ZnO, Co-précipitation, nanoparticules, DRX**CP.140****Effet de montmorillonite sur les propriétés mécaniques et morphologique de biocomposite à base d'un polymère et une charge végétale**Fayçal KABACHE<sup>a\*</sup>, Sorya NEKKAA<sup>b</sup><sup>a, b</sup>Laboratoire Phisico-Chimie des Haut Polymères (LPCHP), Université Ferhat ABBAS Sétif-1-, Sétif, Algérie.\*email : [kabfay07@outlook.fr](mailto:kabfay07@outlook.fr)**Résumé**

Les recherches sur la préparation et la caractérisation des nanocomposites à base de polymère/argile ont attiré une attention considérable durant les deux dernières décennies. Parmi les diverses argiles étudiées, la montmorillonite (MMT) est reconnue comme un choix approprié pour la préparation des nanocomposites polymère/argile à haute performance [1]. Dans ce cadre, le principal objectif de notre travail est l'élaboration et la caractérisation de micro-nanocomposites de polypropylène renforcé par un renfort microscopique fibre végétale et un renfort nanométrique l'argile (montmorillonite nanométrique organo-modifiée). Le but est étudié l'effet de l'ajout de nanocharge à différents taux sur les propriétés mécaniques et morphologiques de biocomposite. Les résultats de test traction et de la microscopie à force atomique AFM montrent une amélioration de ces propriétés à un certain taux de nanocharge.

**Mots clés :** montmorillonite, biocomposite, nanocharge, Fibre végétale, propriétés mécanique.**Références**

[1] M. Feng et al., Polymer Science, Issue 10, Vol. 53, pp. 1529-1537 (2004).

**CP.141****Caractérisation des nanostructures de ZnO et son application pour le traitement des eaux usées en utilisant la photocatalyse hétérogène sous irradiation artificielle et solaire**N. Laid<sup>a</sup>, N. Bouanimba<sup>b</sup>, A. Ben Ahmed<sup>c</sup>, A. Toureche<sup>d</sup>, I. Mouhoub<sup>e</sup> and T. Sehili<sup>f</sup>.

Laboratoire des Sciences et Technologies de l'Environnement LSTE, Département de Sciences Exactes, Faculté de chimie, Université Frères Mentouri Constantine, Algérie.

<sup>a</sup>E-mail: [laidns25@gmail.com](mailto:laidns25@gmail.com)**Résumé**

Durant la dernière décennie, beaucoup de recherches ont porté sur le développement de technologies et de matériaux pour la purification de l'eau des polluants organiques. L'objectif principal de ces technologies est d'obtenir un traitement efficace, économique et peu coûteux de l'eau. La photocatalyse hétérogène en présence d'un matériau semi-conducteur est une technologie attractive et alternative pour



la résolution de problèmes environnementaux. Parmi les différents matériaux utilisés, l'oxyde de zinc (ZnO) est considéré comme un catalyseur très efficace pour la dégradation des colorants organiques en solution par la photocatalyse hétérogène.

Des nanoparticules d'oxyde de zinc ZnO synthétisées par la méthode sol-gel ont été utilisées dans la présente étude comme catalyseur pour le traitement des eaux usées en utilisant la photocatalyse hétérogène sous irradiation artificielle et solaire. Les propriétés structurales des nanoparticules de ZnO ont été déterminées par diffraction des rayons X (DRX), techniques de la spectroscopie Raman (RS) et infrarouge à transformée de Fourier (FTIR). La taille moyenne des cristallites a été calculée en utilisant la diffraction des rayons X (DRX) et s'est révélée être de 48 nm et la surface spécifiques était d'environ  $1047 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ . Les résultats de spectroscopie FTIR et Raman ont montré une grande pureté de l'échantillon de ZnO et ils concordent avec ceux obtenus par DRX.

Les nanoparticules de ZnO ont été utilisées comme catalyseurs pour l'élimination d'un colorant anthraquinone, le Mordant Violet 5 (MV5), en solution aqueuse par un procédé d'oxydation avancé, à savoir la photocatalyse hétérogène. La relation entre la réaction photocatalytique et l'adsorption de MV5 sur le ZnO dans les milieux de pH acide, naturel et basique a été étudiée. L'efficacité du processus photocatalytique à éliminer le MV5 en présence de ZnO a été ensuite testé en présence des rayonnements naturels solaires.

**Mots clés:** ZnO, TiO<sub>2</sub>, DRX, FTIR, RS, Photocatalyse, Rayonnements naturels et solaires.

#### CP.142

##### First principles investigation of the structural and electronic properties of (110), (110) and (111) growth axis BN/GaN superlattices

Mimouna Oukli<sup>1\*</sup>, Nouredine Mehnane<sup>1</sup>, Hafida Belghoul<sup>1</sup>, Nabila Oukli<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Applied Materials Laboratory (A.M.L), Faculté de Genie Electrique, University Djillali Liabes of Sidi Bel Abbes, 2200 Sidi Bel Abbes Algeria

<sup>2</sup>Laboratory of Macromolecular and Physical Organic Chemistry (LCOPM), Faculty of Sciences, University Djillali Liabès, 22000 Sidi Bel Abbès, Algeria.

##### Abstract

This paper reports first-principles investigations of structural and electronic properties of standard BN/GaN superlattices oriented following the (001), (110) and (111) axes using the full potential linear muffin-tin orbitals method (FP-LMTO) in its plane wave approximation (PLW) which enables an accurate treatment of the interstitial regions. The choice of this method ensures the present work to be free from adjustable parameters and enabled us to perform a microscopic study. The results for BN/GaN superlattices with the three directions are investigated and compared. The electronic structure of bulks and also of (001), (110) and (111) growth axis SLs are calculated and it is shown that the (111) growth axis impacts the electronic structure, which indicates a great influence of the *p*-orbital.

**Keywords** Gallium nitride; Boron nitride, Growth axis, Superlattices BN/GaN, Electronic structure.

#### CP.143

##### Etude des varistances à base de poudres nanométriques de ZnO dopé Bi : effet de la température de frittage

Maliha OUNIS<sup>a\*</sup>, Kamel GUERGOURI<sup>b</sup>

<sup>aa</sup>Laboratoire des composants actifs et matériaux, faculté des sciences exactes et S.N.V, Oum el bouaghi, Algérie

<sup>b</sup>Laboratoire des composants actifs et matériaux, faculté des sciences exactes et S.N.V, Oum el bouaghi, Algérie

\* email : ounismaliha@gmail.com

##### Résumé

Les termes nanotechnologie et nanomatériaux sont devenus de nos jours les mots clefs de presque tout développement technologique, et cela à cause des propriétés extraordinaires qu'elles offrent permettant l'ouverture d'innombrables domaines d'applications. Le but principal de notre travail était d'élucider la relation entre la miniaturisation et les propriétés électriques de varistances nanostructurées à base d'oxyde de Zinc. Les échantillons de ZnO dopés par 1% Bi ont été frittés dans un four conventionnel à des températures de : 650°C, 730°C, 800°C, 900°C et 1000°C



pendant 15 minutes. L'étude nous a permis d'analyser les propriétés structurales et de déterminer les propriétés électriques de ces varistances.

**Mots clés:** Zn-1%Bi-O, gap, Frittage, Varistance.

#### CP.144

### Application de la densité d'état (DSO) constante dans l'analyse numérique du système PIN en a-Si : H

RAHMOUNI Khaoula<sup>1,2</sup>, AISSANI Linda,<sup>3</sup> CHAHDI Mohamed,<sup>4</sup> BOURAHLA Nassima,<sup>5</sup> BENABDELAZIZ Dalila

<sup>1</sup>Laboratoire des composants actifs et matériaux, Université Larbi Ben M'hidi. BP 07000, Oum El Bouaghi. Algérie.

<sup>2</sup>Département de sciences de la matière, Université Abbes Laghrour- Khenchela, BP 1252, 40004. Algérie.

<sup>3</sup>Laboratoire d'études physico-chimiques des matériaux (LEPCM), Université Batna 1. BP 05000, Batna. Algérie.

<sup>4</sup>Département de physique, Université Abdelhamid ibn badis ECP3M site II, BP27000. Mostaganem Algérie.

<sup>5</sup>Département de l'ingénierie électrique, Université Abdelhamid ibn badis ECP3M site II, BP227,27000. Mostaganem Algérie.

[Kh-rahmouni@hotmail.com](mailto:Kh-rahmouni@hotmail.com)

#### Résumé

Les équations de continuités des électrons et des trous en régime stationnaire et l'équation de Poisson appliquées à une structure PIN (a-Si : H) ont été déterminées numériquement en utilisant la méthode des différences finies et la discrétisation 1D. Cette analyse montre l'importance des pièges (traps) Pour ce faire, on a considéré la présence de ces centres pièges, situés au niveau Et du gap est de densité constante  $N_t$ . La présence de ces pièges accentue suffisamment le mécanisme de recombinaison, illustrer par le modèle de Shockly-Read-Hall qui tient compte les interactions entre le niveau localisé de gap Et et le niveau de la bande de conduction. On considère le cas de densité d'état constante qui reste une simple approximation par rapport aux autres modèles des densités d'état plus complexes et qui mette en jeu d'autres mécanismes encore plus compliqués.

**Mots clés :** simulation, structure pin, silicium amorphe, différences finies, modèle de Shockley-Read-Hall, la densité d'état.

#### CP.145

### Theoretical study of organic triphenylamine dyes for dye sensitized solar cells

Ihssène OUARED<sup>a</sup>, Mâammar REKIS<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Chimie Théorique, Computationnelle et Photonique, Faculté de Chimie, USTHB, Bab Ezzoua, El Alia, BP 16111 Alger, Algérie.

\*email : [maamar.rekhis@gmail.com](mailto:maamar.rekhis@gmail.com)

#### Abstract

A series of triphenylamine (TPA) derivatives used as D- $\pi$ -A push-pull organic sensitizers in DSSCs were investigated via DFT and TDDFT approaches. The influence of structural modifications on some key parameters in close connection with the open-circuit photovoltage ( $V_{oc}$ ) and the short-circuit current density ( $J_{sc}$ ) including the light harvesting efficiency (LHE), injection driving force ( $\Delta G^{inject}$ ), were discussed. The theoretical results reveal that all dyes can be used as potential solar cells.

**Keywords:** TD-DFT, organic sensitizers, dye-sensitized solar cells (DSSCs).

## CP.146

**A computational approach using the DFT theory to reveal the structural stability and physical properties of PdAs<sub>n</sub> (n = 1-20) clusters**ChaoukiSIOUANI<sup>a,b\*</sup>, Sofiane MAHTOUT<sup>b</sup>, Sofiane SAFER<sup>b</sup> and Franck RABILLOUD<sup>c</sup><sup>a</sup>Département des Sciences de la matière, Faculté des Sciences, Université d'Alger 1, 16000 Alger, Algeria<sup>b</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algeria<sup>c</sup>Univ Lyon, Univ Claude Bernard Lyon 1, CNRS, Institut Lumière Matière, 69622 Villeurbanne, France

\*email : siouanichaouki@gmail.com

**Abstract**

Based on the spin polarized density functional theory (DFT) with the generalized gradient (GGA) approximation implemented in the SIESTA code, the structure, stability, and electronic and magnetic properties of As<sub>n+1</sub> and PdAs<sub>n</sub> (n = 1-20) clusters are investigated. The size-dependent physical properties of pure and doped clusters, such as the binding energy, HOMO-LUMO gap, vertical ionization potential, vertical electron affinity, total spin magnetic moment, chemical hardness, fragmentation energies and second difference of cluster energies, are discussed. The lowest energy structure of PdAs<sub>n</sub> generally differs from that of As<sub>n+1</sub> clusters. The binding energy per atom of both As<sub>n+1</sub> and PdAs<sub>n</sub> increases with the size n. The doping Pd atom enhances the stability. The values of HOMO-LUMO gaps have a decreasing tendency along with the increasing number of As atoms in the cluster. Total magnetic moment depends on the geometry and the position of Pd atom in the cluster. The fragmentation energies show an oscillating behavior for all species.

**Mots clés:** Atomic clusters, density functional theory, generalized gradient approximation, SIESTA, arsenic, palladium, structure, stability, physical properties.

## CP.165

**Nanocomposite : comportement a la corrosion de l'alliage Zn-Fe**Nazih RIBOUH<sup>a\*</sup>, Samia AMIRAT<sup>b</sup><sup>a,b</sup> Université BADJI Mokhtar, Université Annaba, Département de la chimie, Laboratoire nanomatériaux aux corrosion et traitement de surface LNCTS

\*email : rnaziho@gmail.com

**Résumé**

Les revêtements d'alliages électrodéposés ont un intérêt considérable pour le rôle qu'ils jouent dans la protection de certains matériaux tels que l'acier qui, très utilisé dans l'industrie, est souvent exposé aux milieux agressifs. Les alliages réalisés Zn-Fe à R (1/3) et T= 50°C montrent une meilleure stabilité du potentiel d'abandon (OCP) qui peut s'expliquer par une faible teneur en fer dans l'alliage. Un mécanisme de dissolution sélective est remarqué à la température 25°C. La densité de courant à laquelle on synthétise l'alliage influe, également, sur la tenue à la corrosion, son augmentation diminue la vitesse de corrosion. Mais avec des structures biphasées et bistructurées (couche interne compacte et couche externe moins dense), on enregistre une intensité de corrosion plus élevée. Les mesures d'impédances électrochimiques confirment que les meilleurs dépôts compacts et plus résistants à la corrosion sont obtenus à partir de l'électrolyte R (1/3) et T= 50°C. Ce qui confirme les résultats obtenus précédemment. Relativement, il en est de même pour l'alliage Zn-Fe obtenu à R= 1/6 et T= 25°C pour lequel R<sub>tc</sub> est grande résistance à la corrosion mais présentant une rugosité relative.

**Mots clés:** Electrodesposés, l'alliage Zn-Fe, la corrosion, d'impédances électrochimiques.

**Références**

- [1] M. Stern, A. Geary, Journal electrochemistry, 104, (1957), 56-63.
- [2] L. Beaunier, I. Epbouni, J. Clestra et H. Takenouti, Surface technology, 4, (1976), 237- 254.
- [3] M. O'Donoghane, J. Aben, C. Hare, Corrosion 03057, (2003), 15.
- [4] L. L. Rojas, Thèse Paris, France, (2007).
- [5] I. Herraiz- cardona, E. Ortega, V. Pérez, Electrochimica acta, 56, (2011), 1308-1315.

**Thème D**  
**Chimie Quantique**

## Thème D: Chimie Quantique Communications Orales

### CO.03

#### **Ab initio simulations of ultrafast laser-induced destabilization of metallic lattice**

Leila Ben-Mahfoud<sup>1</sup>, Elena P. Silaeva<sup>1</sup>, Emile Bevillon<sup>1</sup>, Razvan Stoian<sup>1</sup>, Jean-Philippe Colombier<sup>1</sup>,

<sup>1</sup>Univ Lyon, UJM-Saint-Etienne, CNRS, Institute of Optics Graduate School, Laboratoire Hubert Curien UMR5516, F-42023 St-Etienne, France

\* email : [leila.ben.mahfoud@univ-st-etienne.fr](mailto:leila.ben.mahfoud@univ-st-etienne.fr)

#### **Abstract**

In the context of ultrashort laser-induced texturing of metals, the mechanisms involved in phase transformation determine the rapidity and the precision of the structuring process of the surface. The laser pulse produces an intense electronic excitation that transforms electronic and atomic structures to accommodate the energy of interaction between the electrons. A theoretical approach is proposed to predict the ultrafast processes on times shorter than electron-phonon dynamics, on the hundreds of fem to second timescale. The lattice destabilization scenario is investigated theoretically from ab initio calculations relying on density functional theory (DFT). First-principles calculations show that laser photo-excitation drives a charge distortion in the cold crystalline atomic arrangement. This induces high electronic stress and temperature along with an entropy increase on the subpicosecond timescale. In particular, electronic free energy dependence on interatomic distance as a function of the degree of ultrafast heating of metals establish nonequilibrium interatomic potentials revealing the disappearance of a free energy minimum. This shows that the electronic charge redistribution affects the lattice cohesion through non-thermal phenomena related to modified ion screening and high entropy effects.

**Keywords :** ab initio, ultrashort laser, phase transition, DFT calculations

### CO.17

#### **Processus de tautomérie céto-énol / thion-thiol catalysé par des solvants polaires protiques de nouvelles molécules hétérocycliques.**

Hasnia ABDEL DJEBAR<sup>a\*</sup>, Yamina BELMILOUD<sup>a</sup>, Meziane BRAHIMI<sup>a</sup>, Bahoudine TANGOUR<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physico-Chimie Théorique et de Chimie Informatique, Faculté de Chimie / Université des Sciences et de la Technologie Hoari Boumediene, BabEzouar, ALGERIE, BP 32 EL ALIA 16111.

<sup>b</sup>Unité de Recherche en Sciences Fondamentales et Didactiques à l'IPEIEM de l'Université de Tunis El Manar

\* email : [hasna-ke@hotmail.fr](mailto:hasna-ke@hotmail.fr)

#### **Résumé**

Le transfert de proton est une des plus simples et fondamentale réaction en chimie et en biochimie. Il joue un rôle important dans l'interprétation des mécanismes réactionnels et il intervient dans plusieurs réactions. Ces réactions sont généralement caractérisées par leur grande sensibilité à un changement d'environnement. Les mécanismes dirigeant ces échanges de protons sont complexes et toujours mal compris malgré l'existence de plusieurs études.

Notre travail porte sur l'étude de l'effet de la substitution de l'oxygène par le soufre sur l'équilibre tautomère du transfert de proton assisté et non assisté par des solvants polaires protiques de nouvelles molécules hétérocycliques en faisant une exploration minutieuse de ce mécanisme.

**Mots clés:** Transfert de proton, assisté, non assisté, solvants protiques polaires, hétérocycles.

**CO.37****Prédiction des diagrammes de phases des liquides ioniques à l'aide du modèle COSMO-RS**Batoul Fatima Zohra SARI-ALI<sup>(1)</sup>, Latifa NEGADI<sup>(1,2)</sup><sup>(1)</sup>LATA2M, Laboratoire de Thermodynamique Appliquée et Modélisation Moléculaire, University of Tlemcen, Post Office Box 119, Tlemcen 13000, Algeria.<sup>(2)</sup> Thermodynamics Research Unit, School of Engineering, University of KwaZulu-Natal, Howard College Campus, Durban 4041, South Africa**Résumé**

L'un des défis les plus importants de la chimie computationnelle est la connaissance et la maîtrise théorique et computationnelle des molécules en solution et une bonne prédiction du comportement et des propriétés thermodynamiques des systèmes soluté-solvants à l'aide de calculs théoriques.

En raison de l'énorme importance technique de la connaissance du comportement thermodynamique des systèmes de fluides et du manque de méthodes plus rigoureuses ; de puissantes approches ont été développées au cours du siècle dernier pour l'estimation de ces données.

Parmi ces approches, on retrouve le modèle COSMO-RS qui est un modèle entièrement prédictif pour les propriétés thermodynamiques des liquides et des mélanges, basé sur les calculs de la chimie quantique et une approche de la thermodynamique statistique. Ce modèle a été développé par A. Klamer, 1995

L'intérêt de ce travail est de présenter la théorie sur laquelle se base le modèle COSMO-RS, montrer le principe des calculs et le fonctionnement du logiciel COSMOTerm, puis démontrer l'efficacité du modèle pour la prévision des propriétés thermodynamiques de systèmes contenant les liquides ioniques.

Dans cette étude le modèle COSMO-RS a été utilisé pour la prédiction des équilibres liquides-vapeurs des systèmes binaires suivants : (méthanol, éthanol, 1-propanol, eau ou acétonitrile) avec le liquide ionique (1-éthyl-3-méthylimidazolium thiocyanate [EMIM][SCN]) ; et eau, 1-propanol et 1-butanol avec le liquide ionique 1-butyl-3-méthylimidazolium thiocyanate [BMIM][SCN] à des températures comprises entre 273 et 363 K. Les résultats expérimentaux utilisés ont été mesurés au sein de notre laboratoire, et la modélisation a été réalisée grâce au logiciel COSMOTermX disponible dans notre laboratoire.

Les prédictions obtenues montrent que le modèle COSMO-RS donne de bons résultats pour les mélanges étudiés. Cela est expliqué par le fait que pour COSMO-RS, la précision et l'amélioration de la prédiction des propriétés des liquides dépendent fortement de la structure des molécules étudiées, ainsi les résultats sont grandement influencés par les conformations choisies, mais elles dépendent aussi des calculs quantiques.

**Mots clés:** COSMO-RS, liquides ioniques, diagrammes de phases, COSMOTermX

**CO.39****Mechanism Thermochemistry and kinetics of DMF/DMA/DMP reaction with OH Radical**S. Samai<sup>a-b\*</sup>, A. Ferhati<sup>a</sup><sup>a</sup>LCCE, Laboratoire de chimie et chimie de l'environnement, faculté des sciences, département de chimie, Université de Batna, 05000 Batna Algérie<sup>b</sup>Faculté des sciences, département de chimie. Université de AbessLaghrou –KhanchelaAlgerie

\*Email : salima\_samai@hotmail.fr

**Abstract**

Theoretical study of the kinetics and the mechanism of the hydrogen abstraction by OH, radical from amides (DMF and DMA, DMP) has been investigated. Calculations were carried out using DFT B3LYP/6-311++G(2d,pd)/CBS-QB3 and transition-state theory. This work provides the first theoretical determination of the rate coefficients and detailed mechanism for the reactions of OH radical with DMF/DMA/DMP, over a temperature range 273–380 K and at atmospheric pressure. The obtained rate

coefficients are in reasonable agreement with experiments. Results indicate that the mechanism of the OH reactions with amides is dominated by H-abstraction from the N-methyl groups.

**Keywords :** Amide; CBS-QB3; Kinetics ;Mechanism; OH radical; Rate constant.

## CO.40

### Etude DFT des modes d'empilement dans des cristaux de trihalogénomésitylène

A. Amar<sup>a-b\*</sup>, A. Boucekkine<sup>c</sup>, J. Meinnel<sup>c</sup>

a-Faculté des Sciences, Département de Chimie, UMMTO, Algérie

b- Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB, BP El Alia, 16 111 BabEzzouar , Alger, Algérie.

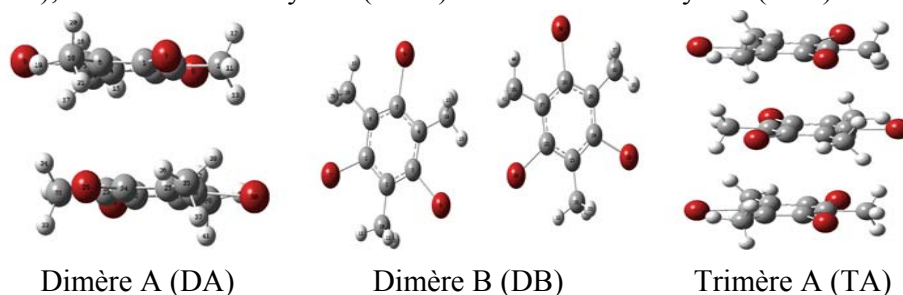
c- Univ Rennes, CNRS, ISCR - UMR 6226, F-35000 Rennes, France

Email : amaranissa2005@yahoo.fr

#### Résumé

L'étude de la nature et du rôle des interactions intermoléculaires conduisant à l'empilement moléculaire dans les cristaux revêt une importance particulière pour l'ingénierie des cristaux. Nous nous sommes intéressés dans ce travail à l'empilement de molécules de trihalogénomésitylène (TXM). Ces dernières espèces présentent un moment dipolaire presque nul. En dessous de 300K, ces molécules sont empilées de manière à conduire à des cristaux en forme d'aiguille dans un arrangement triclinique.

Pour étudier l'origine de cette structure cristalline, nous avons entrepris une étude théorique en considérant les différents modes d'empilements possibles, en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Les calculs ont été effectués au niveau  $\omega$ B97XD/LANL2DZP en utilisant la chaîne de programme gaussian09. Nous avons donc considéré trois composés dans notre étude, le trichloromésitylène (TCM), le tribromo- mésitylène (TBM) et le triiodo- mésitylène (TIM).



Nos résultats indiquent que l'énergie de formation du dimère A est plusieurs fois plus grande que celle d'un dimère B avec deux molécules voisines dans le plan.

Nous trouvons que la différence d'énergie augmente en passant de TCM à TBM puis à TIM, de sorte que l'iode, conduit au dimère le plus stable. Nos calculs montrent que l'empilement TB plan (trimère B) n'est pas stable, l'agrégation dans le plan des molécules TXM n'est pas donc pas favorisée.

**Mots clés :** Trihalogénomésitylène, DFT, agrégation.

## CO.43

**Etude Thermodynamique, Spectroscopique, et Computationnelle des Systèmes Binaires de 1,4-Dioxane + Alcools (1-propanol, 1-pentanol, 1-heptanol)**Houda BENABIDA<sup>a\*</sup>, Amar SAAL<sup>b,c</sup>, Farid Brahim BELARIBI<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, Université des Sciences et de Technologie Houari Boumediene (USTHB), 16111, Algérie<sup>b</sup>Laboratoire de Chimie Théorique et Computationnelle et Photonique, Faculté de Chimie, Université des Sciences et de Technologie Houari Boumediene (USTHB), 16111 Algérie<sup>c</sup>Département de Chimie, université deUMMTO de Tizi-Ouzou, 15000, Algérie

\*email : benabidahouda16@gmail.com

**Résumé**

La densité des mélanges binaires de 1,4-dioxane + alcools (1-propanol, 1-pentanol, 1-heptanol) a été mesurée en fonction de la fraction molaire, à T= [298,15-318,15] K et à la pression atmosphérique. Les valeurs expérimentales de densité ont été utilisées pour calculer le volume molaire d'excès, V<sup>E</sup>. Les valeurs du volume molaires d'excès ont été positives sur tous le domaine de composition et à toutes les températures. Les résultats ont été discutés en terms d'interaction intermoléculaires. L'étude quantique DFT a été réalisée sur des dimères isolés de 1,4-dioxane + alcool, en utilisant les modèles B3LYP/6-31++G(d,p), et M062X/6-31++G(d,p). Les résultats ont montré la formation de trois liaisons hydrogènes entre la molécule de 1,4-dioxane et celle de l'alcool, alors que l'étude spectroscopique par infra rouge a révélé la rupture des liaisons hydrogènes dans les alcools en ajoutant le 1,4-dioxane.

**Mots clés:** Mélanges binaires, volume d'excès, Spectroscopie infrarouge, DFT, 1,4-Dioxane, Alcools**Références**

- [1] Benabida. H, Belaribi. F. B, *J. Chem. Eng. Data*, 63 (8), 2697–2707 (2018)
- [2] Rahul. D, Ramachandran. D, *Journal of Molecular Liquids*, 211, 386–394 (2015)
- [3] Karlapudi. S, Kumar. S, *Journal of Molecular Liquids*, 194, 227–233 (2014)
- [4] Liu. Y, Zaho. J, Li. F, Chen. Z, *J. Comput. Chem*, 34, 121-131 (2013)
- [5] Karlapudi. S, Prasad. C, Olasunkanmi. L, Singh. S, *ACS Omega*, 3, 4679-4687 (2018)
- [6] Sobczyk. L, Grabowski. S. J, Krygowski. T.M, *Chem. Rev*, 105, 3513-3560 (2005)

## Thème D: Chimie Quantique Communications Posters

### CP.25

#### DFT Study of Arginine-Guanosine Interaction: QTAIM and NBO analysis

Nour Elyakine AMRAOUI<sup>a\*</sup>, Dalila HAMMOUTENE<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire (LTMM), Faculté de Chimie, USTHB BP 32, El Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger, Algeria.

\*email : amraoui.nour@yahoo.com

#### Abstract

This work aims to give an insight about the interaction of Arginine with guanosine in vacuum, water, ethanol and DMSO media, at the DFT/BPV86/Aug-cc-pVDZ level of theory. The interaction illustrated by Figure 1 is stabilized by two important Hydrogen bonds - HB1 and HB2. NBO and QTAIM analysis indicate the electrostatic character of Hydrogen bonds and (CH...O) interaction. Energetically, HB1 ( $E_2 = 42.92$  Kcal/mol) is more stabilizing than HB2 ( $E_2 = 23.01$  Kcal/mol), in vacuum. In solution, HB1 ( $E_2 = 39.93$  Kcal/mol) and HB2 ( $E_2 = 13.90$  Kcal/mol) are more stable with ethanol. QTAIM shows the appearance of BCP<sub>s</sub> and RCP<sub>s</sub> at the interaction region of Arginine-Guanosine having low values of electronic density  $\rho(r)$  with a positive Laplacian of electronic density  $\nabla^2\rho(r)$ , confirming the electrostatic character of Hydrogen bonds and (CH...O) interaction.

**Keywords :** DFT, Arginine, Guanosine, QTAIM, NBO, Charge Transfer.

### CP.26

#### Investigations on curcumin and its complexes using DFT, TDDFT, QTAIM and ETS-NOCV calculations

Kaouther BAIRA<sup>a\*</sup>, Nadia OUDDAI<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Chimie des Matériaux et des Vivants: Activité & Réactivité- Université Hadj-Lakhdar Batna1, Algérie

\*email : baira\_kaouther@yahoo.fr

#### Abstract

Curcumin, [(1E, 6E) -1,7-bis (4-hydroxy-3-methoxyphenyl) -1,6-diene-3,5-dione], as well as three of its complexes were explored by means of DFT, TDDFT, QTAIM [1] and ETS-NOCV [2]. DFT calculations using the CAMB3lyp [3] method and the 6-311 G ++ (2d, 2p) base have shown that the enol form is more stable than the ketone. QTAIM analysis showed the presence of two intramolecular hydrogen bonds in enolcurcumin. The ETS-NOCV method revealed stronger antioxidant activity in the enol form. The complexation of curcumin with metal fragments (Ni, Mg and Cu) has been established with the ketone form, but does not improve its biological activity. TDDFT calculations showed an absorption at 377 nm with anhyperchromic/ bathochromic shift in the DMSO solvent for both forms of curcumin. The solubility calculations of curcumin and its complexes were carried out in different solvents (octanol, water ethanol, DMSO and others) and showed that DMSO is the only tested solvent which solubilized all the molecules. All compounds are insoluble in water except Cur-Mg complex which has a minimal solubility (14g / l). The ketone form is much more soluble than the enolic form and those in all used solvents.

**Keywords:** Curcuminenol and ketone form, complexation, QTAIM and ETS-NOCV.

#### References

- [1] Bader R. F. W Atoms in Molecules: A Quantum Theory, Oxford University Press: Oxford, U.K, (1990).
- [2] Mitoraj M, Michalak A, Natural orbitales for chemical valence as descriptors of chemical bonding in transition metal complexes. J Mol Model 13, 347-355(2007).
- [3] Yanai T, Tew D, Handy N, A new hybrid exchange-correlation functional using the Coulomb-attenuating method (CAM-B3LYP). Chem. Phys. Lett 393, 51-57(2004).



**CP.27****Quantum mechanical calculations of polyphenols**Kahina BAKHOUCHE<sup>a,b</sup>, Dalila HAMMOUTÈNE<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, USTHB BP 32, El Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger, Algérie<sup>b</sup> Université Mouloud Mammeri de TiziOuzou, Algérie  
*kahinabak@yahoo.fr***Abstract**

Virgin olive oil (VOO) is one of the important and consumable oils in Mediterranean countries. It has a high resistance to oxidation process because of its fatty acid composition [1] and the presence of highly antioxidative phenolic compounds [2] as the polyphenols and tocopherols [3]. Polyphenols are important constituents of the human diet [4], their antioxidant properties and their positive role in the prevention of chronic diseases are well known. VOO contains also the oxidation products, and other compounds derived from vitamin E. The search for the origin and the authenticity of oils has been the object of numerous studies using the extremely varied physico-chemical determinations that are associated with a chemometric treatment. The studies could be classified in two main categories. In the first one, the samples are chemically treated to determine their constituents. The second one is based on their spectroscopic properties. The spectroscopic methods have been used to distinguish diverse edible oils [5].

**Keywords:** polyphenol, quantum mechanical, TD-DFT, absorption spectrum, fluorescence wavelength.

**CP.28****First-principles study of CsPbBr<sub>3</sub> stability**Raouia BEN SADOK<sup>a\*</sup>, Dalila HAMMOUTÈNE<sup>a</sup><sup>a</sup> LTMM, Faculty of Chemistry, USTHB, BP32 El Alia, 16111, Bab Ezzouar, Algiers, Algeria<sup>\*</sup> *email : raouiaben91@gmail.com***Abstract**

Recently, organic and inorganic halide perovskite materials have attracted considerable attraction, due to their potential applications as absorber in solar cells, and as topological insulators [1]. The general formula of these materials is ABX<sub>3</sub> where A and B are cations with different oxidation states, and X is an anion which is, in general, halide, oxygen, fluorine or sulfur. One of these inorganic halide perovskites is the CsPbBr<sub>3</sub> nanocrystal compound. This semi-conductor material shows an increasing popularity essentially due to its good stability compared to that of organic/inorganic hybrid perovskites. CsPbBr<sub>3</sub> has excellent electroluminescence properties and photoluminescence, large electron-hole diffusion lengths, high carrier mobility, a long electron lifetime and high electron mobility of [2-3]. In this work, we aim to investigate by First principle calculations using the ABINIT code [4], the structural and dynamic (phonons) properties of CsPbBr<sub>3</sub> on the three structures. Using phonon calculations, we try to understand the transform mechanism of this compound from cubic to tetragonal to orthorhombic structure and determine which soft modes are responsible to these transforms, and also we try to understand the relation between the variations of its stability with the variations of PbBr<sub>6</sub> octahedral rotation/tilt.

**Keywords:** perovskite, semi-conductor, DFT, band gap, tilt of octahedral PbBr<sub>6</sub>.

**CP.29****Recherche structurale des conformères stables d'intérêt biologique au moyen des méthodes quantique**

Aicha BENABDELKRIM<sup>a\*</sup>, Ala Eddine TOURCHI<sup>a</sup>, Hasnia OTHMANI<sup>b</sup>, Saida BEN YAGHLANE<sup>b</sup>, NejmEdine JAIDANE<sup>b</sup>, Majdi HOCHLAF<sup>c</sup>, Dalila HAMMOUTENE<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB, BP32, EL Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger, Algérie.

<sup>b</sup>Laboratoire de Spectroscopie Atomique, Moléculaire et Applications LSAMA, Tunis El Manar, Tunis, Tunisie.

<sup>c</sup> Université Paris-Est, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR 8208 CNRS, 5 bd Descartes, Marne-la-Vallée 77454, France

\* email : [adoct.benabdelkrim@hotmail.com](mailto:adoct.benabdelkrim@hotmail.com)

**Résumé**

En astronomie, le milieu interstellaire est la matière qui remplit l'espace entre les étoiles. C'est un mélange de gaz (ionisés, atomiques et moléculaires), de rayons cosmiques et de poussières. L'énergie qui occupe le même volume, sous forme de rayonnement électromagnétique, correspond au champ de rayonnement interstellaire.

Dans le cadre de notre travail, nous nous sommes concentrés sur l'étude théorique des propriétés structurales d'une série de molécule de formule brute HCNSS. Afin de déterminer tous les conformères stables pouvant exister dans le milieu interstellaire, et qui assurent un rôle très important en biologie, nous avons effectué une optimisation complète de la géométrie de nos systèmes HCNSS, en utilisant plusieurs méthodes de la chimie quantique: MP2/aV(D+d)Z [1, 2], CCSD(T)/aV(D+d)Z, CCSD(T)/aV(T+d)Z et CASSCF/aV(D+d)Z. Nous avons aussi effectué une étude de la fragmentation des réactions afin d'étudier le processus de la formation et la destruction des ponts disulfures S-S.

**Mots clés** : Milieu interstellaire, HCNSS, MP2, CCSD(T), CASSCF.

**Références**

[1] C. Møller and M. S. Plesset, Phys. Rev. 46, 618 (1934).

[2] R. D. Amos, J. S. Andrews, N. C. Handy, and P. J. Knowles. Chem. Phys. Lett. 185, 256 (1991).

**CP.30****Etude théorique du mode de coordination du ligand cyanure dans des complexes de l'uranium et du cérium**

Yamina BOUZIDI<sup>a\*</sup>, Lotfi BELKHIRI<sup>b</sup>, Michel EPHRITIKHINE<sup>c</sup>, Jean-François HALET<sup>d</sup>, et Abdou BOUCEKKINE<sup>d</sup>

<sup>a</sup>Département de Médecine, Université de Constantine 3, Constantine, Algérie.

<sup>b</sup>URCHEMS, Département de chimie, Université des Frères Mentouri Constantine 1, 25017 Constantine, Algérie.

<sup>c</sup>NIMBE, CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France.

<sup>d</sup>Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS -Université de Rennes 1, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes Cedex, France.

\* email : [yamina.bouzidi@univ-constantine3.dz](mailto:yamina.bouzidi@univ-constantine3.dz)

**Résumé**

La chimie des complexes cyanures des éléments f [1] a connu des avancées récentes significatives, montrant notamment la capacité remarquable du ligand cyanure à stabiliser les composés d'uranium dans leurs états d'oxydation les plus bas et les plus élevés et sa capacité à adopter deux modes de liaison distincts, à savoir le cyanure M-CN ou l'isocyanure M-NC envers les ions f trivalents.

Nous avons étudié théoriquement les complexes tris(cyanure)  $[ML_2X_3]^{2-}$  ( $M = Ce^{3+}/U^{3+}$ ;  $L = C_5H_4Me/N(SiMe_3)_2$ ;  $X = CN^-/NC^-$ ), en utilisant la DFT relativiste [2] en se concentrant sur la compétition de coordination ( $CN^-$ ) cyanure et isocyanure ( $NC^-$ ) et les différences entre leurs structures électroniques. Les structures cristallines révèlent des modes de coordination distincts du groupe CN vers les centres métalliques d'uranium et de cérium. De manière intéressante, dans le cas des complexes de cérium et contrairement à ceux de l'uranium, le mode de coordination du ligand cyanure dépend du co-

ligand L attaché au métal. Les résultats révèlent que la coordination préférentielle de ces ligands est déterminée par un subtil équilibre entre les facteurs stériques, covalents et ioniques, ainsi que par l'effet du solvant. Par conséquent, la prévision certaine du mode de coordination M–CN ou M–NC sur la seule base des calculs théoriques est souvent difficile, surtout lorsque les énergies de liaisons sont proches.

**Mots clés:** DFT relativiste, éléments f, cyanure.

### Références

- [1] (a) M. Ephritikhine, Dalton Trans, 21, 2501(2006); (b) W.J.Evans, Organometallics, 35, 3088 (2016).  
 [2] (a) S.D. Vosko, L. Wilk, M. Nusair, Can. J. Chem, 58, 1200 (1980); (b) A.D. Becke, Phys. Rev. A, 38, 3098 (1988).

## CP.57

### Host-guest interaction between Flavonoid Fisetin and $\beta$ -cyclodextrin: Molecular modeling and nuclear studies

Fares Djebiha<sup>a\*</sup>, rachidMerdes<sup>a</sup>, abdelazizBouhadiba<sup>b</sup>, mohamed Rahim<sup>b</sup>

<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

<sup>a\*</sup>email : faresdjchm@gmail.com

### Abstract

The present computational study was conducted to investigate the formation of the inclusion complex between Fisetin (FIS) and  $\beta$ -cyclodextrin in vacuum and water (with a 1:1 stoichiometry), and hence two possible models (A and B of FIS in  $\beta$ -CD cavity) were considered. Both PM7 and ONIOM2 methods, proves that FIS is totally encapsulated in  $\beta$ -CD cavity for A and B models. In addition, charge transfer between donor and acceptor orbit of FIS and  $\beta$ -CD plays an important role in stabilizing the inclusion complex. Conclusively, 1H Nuclear Magnetic Resonance (NMR) chemical shifts of free and complexed Fisetin were calculated by the Gauge-Including Atomic Orbital (GIAO) method.

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

## CP.58

### Theoretical Investigation of the Protonation Sites within a set of Anderson Heteropolyanions

Ikram Nour El Hoda GUERMI<sup>a\*</sup>, Meriem ALMI<sup>a</sup>, Amar SAAL<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.

\* email: ikramhenge@gmail.com

### Abstract

Quantum mechanical methods (DFT) have been used to study the protonation sites of a set of four Anderson heteropolyanions (HPA). The protonation reaction of these HPAs has been studied at gas phase and in two different solvents (DMF and acetonitrile). This reactivity has been investigated on the basis of the thermodynamic stability, the charge distribution analysis (NPA), and the bond dissociation energy (BDE). Even though in most cases the O<sub>b</sub> (bridging oxygen) atoms are generally the most favorable sites of protonation, the obtained results showed that this property changes in function of the environment (solvent type), addenda atom and the central atom.

**Keywords:** heteropolyanions, Anderson HPA, protonation, basicity

## CP.59

**Etude DFT de la régiosélectivité et de la réactivité chimique de la réaction de synthèse d'imidazopyridinylacétamide**Zehira Haddadi<sup>a\*</sup>, Hacène Meghezzi<sup>a</sup>, Anissa Amar<sup>a</sup>, Abdou Boucekkine<sup>b</sup>, Samia Bouzroua<sup>c</sup>, Bellara Nedjar-Kolli<sup>c</sup>.<sup>a</sup>Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire Faculté de Chimie, U.S.T.H.B., B.P.N 32 El Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger, Algeria.<sup>b</sup>Univ Rennes, CNRS, ISCR – UMR 6226 F-35000 Rennes, France.<sup>c</sup>Laboratoire de Chimie Organique Appliquée de faculté de Chimie, U.S.T.H.B., B.P. 32 El Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger, Algeria.

\* email : haddadizehira@yahoo.fr

**Résumé**

Ce travail porte sur la synthèse des isomères d'imidazopyridin-yl acétamide par réaction entre une maléimide et une diamine comportant plusieurs centres stéréogéniques et donnant ainsi un modèle de choix dans l'étude de la régio- et de la stéréosélectivité. Les deux carbones, sièges de l'attaque nucléophile de l'azote pyridinique et de NH<sub>2</sub>, sont le C=O et le C=C de l'hétérocycle maléimide. Le problème est de savoir si l'azote pyridinique attaque le C=C et donc le NH<sub>2</sub> le C=O ou bien l'inverse. Les deux isomères obtenus ont les mêmes éléments structuraux en spectroscopie, on ne peut donc trancher sur la formation de l'un ou l'autre. Aussi une étude théorique par modélisation moléculaire sur la régiosélectivité de cette réaction a été envisagée en utilisant les descripteurs de la réactivité chimique, l'analyse NBO et le calcul des barrières énergétiques pour avoir une idée sur l'orientation de la réaction. Les calculs sont effectués dans la phase gazeuse par la méthode DFT/B3LYP//6-311+G\* au moyen de la chaîne de programme Gaussian 09. Les résultats obtenus sont en faveur de l'isomère noté 2.

**Mots-clés** : Maléimide, descripteurs chimiques, DFT, réactivité, NBO.

## CP.60

**DFT/TD-DFT investigation on the UV-vis absorption and phosphorescence spectra of platinum(II) and palladium(II) complexes with Schiff-base ligands**Houari BRAHIM<sup>a\*</sup>, Abdelkrim GUENDOUZI<sup>b</sup><sup>a</sup>Department of Chemistry, University of Saida - DrMoulayTahar, Saida, 20000, Algeria<sup>b</sup>Department of Chemistry, University of Saida - DrMoulayTahar, Saida, 20000, Algeria

\* email : brahim.h@outlook.com

**Abstract**

In this work, we studied the structural and optical properties of the three complexes: 2,3-bis[(4-diethylamino-2-hydroxybenzylidene)-amino]but-2-enedinitrile (Pd-1), 2,3-bis[(4-diethylamino-2-hydroxybenzylidene)-amino]but-2-enedinitrile (Pt-1), and 2,3-bis(3,3,9,9-tetramethyl-2-hydroxyjulolidine)but-2-enedinitrile (Pd-2) using DFT and TD-DFT methods. The electronic and geometrical structures of the ground state (S<sub>0</sub>) and the first triplet excited state (T<sub>1</sub>) have been analyzed and compared. Observed absorption bands were assigned according to NTO analyzes, the agreement with the experience is good. LLCT character dominates the low-lying singlet excited states. Phosphorescence wavelengths of the studied complexes were calculated vertically and adiabatically. The adiabatic methods are more accurate. Phosphorescence spectra were simulated taking into account the vibronic coupling using FC/AH and FC/AS approaches. The normal modes involved in phosphorescence maxima were identified, analyzed and assigned to the observed emission maxima.

**Keywords** : TD-DFT, Schiff base, complexes, absorption, Platinum(II) and Palladium(II), excited states, phosphorescence, vibronic coupling. VMS.

**CP.61****Détermination des propriétés structurales et électroniques bimétallique à base du ligand BDI et du groupe imido**Moncef Khireche,<sup>1</sup> Bachir zouhoune,<sup>1,2</sup> Azzedine Ferhati<sup>3</sup>

1 Unité de recherche de chimie et de l'environnement et moléculaire structural, Université de Mentouri 1 Constantine 2500 Algérie.

2 laboratoire de chimie appliquée et technologie des matériaux université Larbi ben Mhidi Oum el Bouaghi, 04000 Oum el Bouaghi Algérie.

3 LCCE laboratoire de chimie et chimie de l'environnement faculté des sciences département de chimie université de Batna el hadj Lakhdar, Batna 05000 Algérie. Moncef Khireche, 1 Bachir zouhoune, 1,2 Azzedine Ferhati 3

Email Khireche.moncef@gmail.com

**Résumé**

Ce résumé présente une étude théorique au niveau DFT des structures bimétalliques, où elle employée pour traiter la relation entre le compte électronique et la structure moléculaire le mode de coordination des complexes bimétallique Les travaux réalisés concernent des complexes de formule générale  $[M(\text{BDI})(\text{NH})]_2$  ( $M = \text{Co}, \text{Cr}, \text{Cu}, \text{Fe}, \text{Mn}, \text{Mo}, \text{Nb}, \text{Ni}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Zr}, \text{Zn}$ , BDI = ligand béta dikeminate, NH = groupe imido). Les optimisations de géométries ont été effectuées en fonction de plusieurs états de spin (singulet  $S = 0$ , triplet  $S = 1$ , quintuplet  $S = 2$ ) en utilisant de différentes fonctionnelles telles que BP86, BLYP et B3LYP. Selon la nature du métal, les isomères ont de plus basses énergies ont été déterminées. Dans tous les complexes étudiés, le métal de transition se trouve dans un état d'oxydation très élevé vu que les deux ligands portent des charges formelles négatives (BDI)<sup>-</sup> et (NH)<sub>2</sub><sup>-</sup>. Il est très intéressant d'analyser l'ordre de liaison métal-métal qui change d'une manière considérable en fonction de la nature du métal et de l'état de spin. Il a été constaté que pour les métaux pauvre en électrons situés à gauche le groupe imido et proche de la linéarité; donc considéré comme donneurs de 6-électrons, alors ceux qui sont plus riches et situés à droite il est coudé et considéré comme donneur de 4-électrons. Les trois fonctionnelles utilisées donnent des tendances similaires concernant le mode de coordination M-L, l'ordre de liaison M-M et l'état de spin favorable.

En fin le grand avantage de la DFT, c'est qu'on peut l'appliquer a une large gamme de système depuis les complexes de transition jusqu'aux solide et aux métalloprotéines.

**Mots clés:** DFT, organométallique, chimie de coordination, structures électroniques, orbitales moléculaires.

**CP.62****Insertion de petites molécules CO<sub>2</sub> et CS<sub>2</sub> dans les complexes monothiolates de l'uranium (IV)**Farida KIAS<sup>a,b\*</sup>, Fatiha TALBI<sup>b</sup>, Aziz ELKECHAI<sup>b</sup>, Abdou BOUCEKKINE<sup>c</sup><sup>a</sup>Ecole Nationale supérieure des Travaux Publics d'Alger<sup>b</sup>Laboratoire de Physiques et Chimie Quantique de l'Université de Tizi-Ouzou<sup>c</sup>Institut des Sciences Chimiques de Rennes1, Campus de Beaulieu 35042 Rennes, France

\*email : faridakias@yahoo.fr

**Résumé**

Nous avons effectué une étude DFT de la réactivité d'une série de complexes triscyclopentadienylmonothiolates de l'uranium (IV)  $[U(\text{Cp})_3\text{SR}]$  ( $R = \text{Me}, \text{Ph}, {}^i\text{Pr}, {}^t\text{Bu}$ ) avec CO<sub>2</sub> ou CS<sub>2</sub>; les géométries optimisées au niveau de théorie DFT/ZORA/BP86, en tenant compte des effets du solvant, à l'aide du modèle COSMO implémenté dans ADF, sont en bon accord avec les données expérimentales disponibles. Les profils énergétiques déterminés montrent que le composé  $[U(\text{Cp})_3\text{S}^t\text{Bu}]$  s'est avéré le plus difficile à réagir avec la molécule CS<sub>2</sub>. L'insertion de CO<sub>2</sub> est trouvée plus facile et rapide que celle de CS<sub>2</sub>, confirmant ainsi l'observation expérimentale. La formation des produits a été expliquée par la formation d'un seul état de transition. Le rôle crucial des orbitales 5f dans la réactivité l'analyse orbitalaire a été révélé. D'autres analyses (Mulliken, Hirshfeld et Nalewajski-Mrozek) ont indiqué les principaux transferts de charges se produisant dans les réactions. L'analyse des diagrammes d'orbitales moléculaires frontière (SOMO et LUMO) a permis de confirmer le rôle important des

orbitales 5f du métal actinide dans la stabilité des complexes et dans le renforcement de la covalence de l'interaction métal-ligand

**Mots clés:** Insertion, Complexes monothiolates, DFT/ZORA, COSMO.

### CP.63

#### Theoretical investigations of CsO: spectroscopy and transitions moments

S. Koudjeti<sup>a</sup>, B. Mehnen<sup>b</sup>, K. Merabti<sup>a</sup>, S. BenYaghlane<sup>b</sup>, N. Jaidane<sup>b</sup>, S. Azizi<sup>a</sup> and M. Hochlaf<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de physique théorique, Faculté des Sciences, Université Abou BekrBelkaid, Tlemcen, 13000, Algeria

<sup>b</sup>Laboratoire de spectroscopie atomique, moléculaire et applications, Faculté des sciences de Tunis, Université de Tunis El Manar, Tunis, 1060, Tunisia

<sup>c</sup>Laboratoire de chimie théorique, Université Paris-Est Marne-la-Vallée, Marne-la-Vallée, 77454, Cedex2, France

\* *samira.koudjeti@univ-tlemcen.dz*

#### Abstract

Using multiconfigurational *ab initio* methodologies, we compute the potential energy curves (PECs) of the lowest electronic states of the diatomic CsO. All electronic calculations were performed using the MOLPRO program suite [1]. These computations are performed using internally contracted multireference interaction configuration [2] including Davidson correction [3] (MRCI+Q).

We described the Cs atom by a relativistic pseudopotential cc-pCV5Z-PP [4] and the oxygen atom by the cc-pV6Z basis set.

For the bound states, we report a set of spectroscopic parameters including equilibrium distances, dissociation energies, and vibrational and rotational constants. An excellent agreement is found with the experimental data.

We compute the dipole moment for  $X^2\Sigma^+$  along the internuclear separation. Its shape is a signature of the ionic character of the Cs-O bond in this electronic state.

The transition dipole moment between  $A^2\Pi$  and  $2^2\Pi$  was calculated.

**Keywords :** monoxide of cesium, *ab initio* calculations,, spectroscopic constants, transition moments.

#### References

[1] MOLPRO is a package of *ab initio* programs written by H.-J. Werner and P.J. Knowles. For further details see <<http://www.molpro.net>>.

[2] Knowles P. J. and Werner H.-J., *Chem. Phys. Lett.*, **145**, 514, (1988).

[3] Langhoff S. R. and Davidson E. R., *Int. J. Quant. Chem.*, **8**, 61-72, (1974).

[4] Hill J. G. and Peterson K. A., *J. Chem. Phys.*, **147**, 244106, (2017).

### CP.92

#### Understanding the regio-and stereoselectivities of the 1,3- dipolar cycloaddition of 2,3,4,5-tetrahydropyridine-1-oxide with methylcrotonate using DFT study

Halima Hazhazi<sup>a\*</sup>, Boulanouar Messaoudi<sup>b</sup>

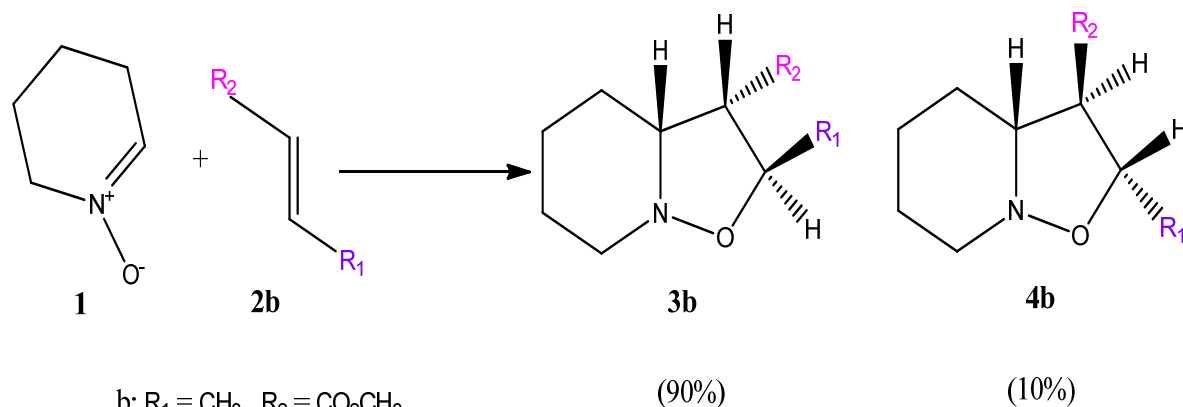
<sup>a</sup>Laboratoire de Chimie Moléculaire et Environnement (LCME), Equipe de Chimie Informatique et Pharmaceutique (ECIP), Faculté des Sciences et Sciences Exacte - Département des sciences de la matière, Université de Biskra, BP 145 RP, 07000 Biskra, Algérie

<sup>b</sup>Laboratoire de Thermodynamique Appliquée et Modélisation Moléculaire, Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université A. Belkaid, BP 119, Tlemcen, 13000, Algérie

\* *email : halimahazhazi@gmail.com*

#### Abstract

In the present work, we present a theoretical study of the region- and stereoselectivity of 13DC of 2,3,4,5-tetrahydropyridine-1 -oxide 1 and methyl crotonate 2b gives a mixture of substituted isoxazolidines 4b and 5b in a 90:10 ratio, experimentally studied by Asrof et al.



Quantum chemistry calculations has been carried out using density functional theory (DFT) at the B3LYP/6-31G (d) level of theory. The reaction has been followed by performing transition state optimization, calculations of intrinsic reaction coordinate and activation energies; the molecular mechanism of the reactions is concerted and asynchronous. The regio- and exo/endo-selectivity have been explained in terms of frontier molecular orbital interactions, local and global electrophilicity and nucleophilicity indices. The activation parameters indicated favoured endo approach along the meta-pathway in agreement with the experimental outcomes.

**Keywords:** 1,3-Dipolar cycloaddition; 2,3,4,5-tetrahydropyridine-1-oxide; Selectivity; DFT calculations.

#### References

- [1] K. Marakchi, R. Ghailane, O. Kabbaj, N. Komiha, *J. Chem. Sci.*, 126 (2014) 283–292.  
 [2] Sk. A. Ali, J. H. Khan, M. I. M. Wazeer, P. H. Perzanowski. *Tetrahedron*, 45 (1989) 5979-5986.  
 [3] L. R. Domingo, P. Pérez, *Org. Biomol. Chem.*, 9 (2011) 7168-7175.

### CP.93

#### Quantitative structure properties relationship for DESs using $\sigma$ -profile as molecular descriptors and their molecular interaction by COSMO-RS

Tarek LEMAOUI<sup>a\*</sup>, Yacine BENGUERBA<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.

<sup>a\*</sup> E-mail : tarek.lemouai19@gmail.com , <sup>b</sup> E-mail : benguerbayacine@yahoo.fr

#### Abstract

Computer assisted Quantitative Structure property relations (QSPR) has proven to be an accurate, reliable and cost-effective method for predicting the physicochemical properties of DESs. The idea is to predict these properties from a set of molecular descriptors. Experimental data on the properties of DESs at different temperatures were taken from different bibliographic sources.

The quantum chemical approach (COSMO-RS) was used to predict the thermodynamic properties of the pure and mixed polarity distribution. A modelling analysis was carried out in order to provide a model for the prediction of specific DESs properties, such as viscosity, conductivity, density, potential hydrogen and freezing point. The methodology allowed achieving very good results as all the models showed very good regression performances. Finally, the corresponding model parameters were determined and an analysis of variance allowed individuating the most significant factors of the retrieved models.

**Keywords:** Deep Eutectic Solvents; MLR; Modeling; COSMO-RS; Quantitative Structure Property Relationships (QSPR).

**CP.94****Etude cristalline, spectroscopique et analyse de la surface de Hirshfeld du 4,6-dichloro-5-methylprimidine comparée aux résultats théorique**

Merime Medjani ,OuardaBrihi, Ali Boudjada

Laboratoire de Cristallographie Département de physique Faculté des sciences exactes, Université Mentouri, Constantine, Algérie.

*E-mail medjanimeriem@yahoo.fr.***Abstract**

Le but recherché par notre groupe est de comprendre le comportement du groupement méthyle à partir de l'étude des molécules présentant une grande symétrie.

Dans cette partie du travail, il est présenté la structure cristalline du 4,6-dichloro-5-methylpyrimidine (DMP) qui est résolue à partir de la diffraction des rayons X à partir d'un monocristal à la température ambiante. Grâce au programme Crystal Explorer, nous avons analysé la surface de Hirshfeld, comprendre l'empilement cristallin et identifié les interactions intermoléculaires qui assurent la cohésion dans le cristal. Parallèlement à l'étude expérimentale, nous avons entrepris des calculs théoriques de la conformation de la molécule isolée du DMP en utilisant les méthodes de la DFT (DensityFunctionalTheory).

Des calculs d'optimisation de la conformation moléculaire du DMP en utilisant la chaîne de programme GAUSSIAN09 et la fonctionnelle MPW1PW91 et la base LANL2DZ ont donné une conformation C1 avec des résultats très proches de l'expérience pour les longueurs et pour les angles de liaison.

Les calculs de spectroscopie Raman et infrarouge entrepris à partir des résultats d'optimisation en utilisant la même fonctionnelles MPW1PW91 et le jeu de bases LanL2DZ ont conduit à des valeurs de fréquences très proches des résultats expérimentaux.

**Mots clés :** Diffraction, DFT, Surface de Hirshfeld, Conformation, Infrarouge, Raman.

**CP.95****Synthesis, Characterization, and quantum chemical calculation of new isatin-hydrazone: as a potent antibacterial and antioxidant agent**

Kamel MOKHNACHE, Soraya Madoui\*, Hanane KHITHER, Noureddine CHAREF

Laboratory of Applied Biochemistry, University Ferhat Abbas Setif 1,19000, Algeria

*\*email : kamelmokhnache@yahoo.com***Abstract**

A new isatin-hydrazone (I); *N'*-[(*E*)-(5-bromo-1*H*-indol-3-yl) methylidene] pyridine-4-carbohydrazide was prepared from the condensation reaction of 5-bromo-1*H*-indole-3-carbaldehyde and the anti-tubercular drug; isoniazid, in the presence of acetic acid. The obtained hydrazone was identified and characterized by physico-chemical techniques such as melting point, UV, NMR, and mass spectroscopy. Chemical quantum calculation of I was performed using Gaussian software program. In addition, the acute toxicity was evaluated using mice. The antioxidant of I was evaluated against superoxide anion radical. Also, the effect of I against marine pathogenic bacteria; *Vibrio anguillarum* and *Photobacterium damsela* was evaluated. The computational results demonstrate the high chemical reactivity of the synthesized hydrazone.

**Mots clés / Keywords :** Hydrazone, DFT, Quantum chemical, antibacterial



**CP.128****Oxidation of CO into CO<sub>2</sub> with Monte Carlo simulation and DFT theory**Lamia. KRIM<sup>a,b\*</sup>, Dalila. HAMMOUTENE<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB BP32, El Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger<sup>b</sup> Université Mouloud Mammeri, Faculté des Sciences, Département de chimie Tizi-Ouzou, UMMTO

\*email: lamia\_krim@yahoo.fr

**Abstract**

In the past few years stochastic models have been extensively used to describe the adsorption and reaction of molecules on metallic surfaces. One such model was due to Ziff, Gulari and Barshad (ZGB) [1] which despite its simplicity was able to capture some important features of surface reactions such as steady state, phase transition and surface poisoning. However, in all the contributions that used the (ZGB) model the reactants were assumed to occupy similar sites on the metallic surface. The present work aims, is to investigate a more complicated two-step monomer/dimer model reaction in which the reacting species adsorb on distinct sites on the metallic surface: Four-Fold Hollow- and Bridge-Bonding. The Monte Carlo simulation [2] results are compared with those obtained from a (DFT) theory.

**Keywords:** Surface reaction, Monte Carlo simulation, heterogeneous catalysis, DFT.

**CP.129****DFT and TDDFT study on the lanthanide and actinide triflate complexes**Meriem LEMMOUCHI<sup>1</sup> and Nadia OUDDAI<sup>1</sup><sup>1</sup>Laboratoire de Chimie des Matériaux et des Vivants : Activité et Réactivité- Université Hadj-Lakhdar Batna1- Algeria

lem\_meriem1@yahoo.fr; ouddai\_nadia@yahoo.fr

**Abstract**

Theoretical studies on the lanthanide and actinide triflate complexes M(OTf)<sub>n</sub> where M = La, Ce, Gd, Yb, Lu, Th, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, and No; n = 3 and 4, are carried out using functional density theory (DFT) [1]. The study of An(OTf)<sub>3</sub> complexes showed that the three OTf groups are bidentate, generating a trigonal prism (TP). Two limiting structures of TP are observed; the most distorted is the thorium triflate Th(OTf)<sub>3</sub> and the ideal one is U(OTf)<sub>3</sub>. The highest population contribution of 5d orbital compared to 5f orbital in Th–O bond of Th(OTf)<sub>3</sub> explains the distortion. The intramolecular rearrangement of the OTf ligands in Ln(OTf)<sub>3</sub> generates two conformers. In Yb(OTf)<sub>3</sub>, the pseudo-eclipsed and the staggered conformations are stable and can be isolated.

The TDDFT [2] calculated results reveal that the Th(OTf)<sub>4</sub>, Np(OTf)<sub>3</sub> and Pu(OTf)<sub>3</sub> complexes are dominated in UV region, with small values of the oscillator strengths *f* in the HOMO – LUMO's transitions. The ligand to metal charge transfer LMCT is the predominated character in the case of the Th(OTf)<sub>4</sub> and a combination of LMCT, MLCT and ICT is observed in the case of Np(OTf)<sub>3</sub> and Pu(OTf)<sub>3</sub> complexes. The domination in UV region probably allows to these complexes to show luminescence in the emission specter.

**Keywords:** triflate, lanthanide, actinide, coordination, intramolecular rearrangement, TDDFT, LMCT, MLCT, ICT.

**CP.130****Theoretical study of the bonding mode and electronic structure of bimetallic complexes to ligands rich in  $\pi$ -electrons**Sabri MECHERI<sup>a\*</sup> and Bachir ZOUCOUNE <sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de chimie appliquée et technologie des Matériaux, Université Larbi Ben M'Hidi – Oum El Bouaghi, 04000 Oum El Bouaghi, Algérie

\* email :mecheri.sabri@univ-oeb.dz

**Abstract**

Geometry optimization and energy decomposition have been investigated using BP86 functional on series of (All)(Ind)[M(L)]<sub>2</sub>, (Cp)(Ind)[M(L)]<sub>2</sub>, and [M(Ind)(L)]<sub>2</sub> (M = Ni, Pd; L = CO, PEt<sub>3</sub>) which contain bridging Allyl, Cp and Indenyl ligands of a various spin states (singlet S=0, triplet S=1). However, the DFT calculations gave the singlet spin state more stable than the triplet state in all structures. Furthermore, the optimization geometry shows that the indenyl and Cp ligands coordinates with similitude to the allyl ligand. The optimized structures are comparable to the experimental ones. In addition, the Ziegler-Rauk analysis scheme apply to describe the bonding energy between fragments, the electrostatic, the Pauli and the orbital interaction terms. The results showed that the total attractive interaction ( $\Delta E_{\text{elstat}}$ (electrostatic)+ $\Delta E_{\text{orb}}$ (orbital)) is governed by one third covalent and two thirds ionic characters, which are in agreement with the  $\Delta E_{\text{elstat}}$  and  $\Delta E_{\text{orb}}$  contributions, respectively, in all studied complexes.

**Keywords** :Geometry optimization, functional, bridging, ligand, bonding energy, fragments.

**CP.131****Etude théorique par la méthode QSAR d'une série de molécules hétérocycliques a intérêt médicinale**sihem Medjahed <sup>a</sup>, zoulikha Sebaa<sup>a</sup>, fatima Soualmia<sup>a</sup>, salah Belaidi<sup>b</sup>, noureddine Tchouar<sup>a</sup>, Nabila Aoumeur<sup>a</sup> et kamel Bentayeb<sup>a</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

**Résumé**

La modélisation moléculaire d'une molécule implique généralement une présentation graphique de la géométrie ou de la configuration des atomes de la molécule suivie de l'application d'une méthode théorique, comme la mécanique moléculaire, dynamique moléculaire, mécanique quantique ou semi-empirique,... permettant de déterminer la représentation graphique de la géométrie ou de la conformation des atomes d'une molécule et d'évaluer les propriétés physico-chimiques de la molécule étudiée. La modélisation moléculaire est une application des méthodes théoriques et des méthodes de calcul pour résoudre des problèmes impliquant la structure moléculaire et la réactivité chimique ou l'activité biologique [1].

Certain projet de recherche mettent en jeu des données biologiques et physicochimiques appropriées. Ces données peuvent être représentées et analysées de diverses manières. Une analyse QSAR a été effectuée pour déterminer quantitativement l'effet de la structure moléculaire des composés étudiés sur leur activité biologique. Un modèle mathématique a été développé pour prédire l'activité spécifique de d'inhibition de 15-PGDH de dérivés de thiazolidine-2,4-dione[2].

**Mots clés** : 1,3-thiazolidine-2, 4-dione, QSAR, 15-PGDH, modélisation moléculaire.

**Références**

[1] V.N.Viswanadhan, M.R.Reddy, R.J.Bacquet, M.D.Erion, J.comput. chem.,14, pp:1019, (1993).

[2] S.Medjahed, S.Belaidi, S.Djekhaba, N.Tchouar and A.Kerassa, J.Bio nanosci. 2,10, 118-126 (2016).

## CP.132

**Theoretical study of some lowest electronic states of CsS**

Karim Merabti<sup>a\*</sup>, Sihem Azizi<sup>a</sup>, Nejm-Eddine Jaidane<sup>b</sup>, Roberto Linguerrì<sup>c</sup>, Gilberte Chambaud<sup>c</sup> and Majdi Hochlaf<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Université Abou Bekr Belkaid, Faculté des sciences, Tlemcen, Algérie.

<sup>b</sup>Laboratoire de Spectroscopie Atomique, Moléculaire et Applications – LSAMA, Université de Tunis, Tunisie.

<sup>c</sup>Université Paris-Est, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, 77454 Marne-La Vallée, Paris, France.

E-mail: hadj.merabti@gmail.com

**Abstract**

We calculated the potential energies curves (PECs) with highly correlated ab-initio methods using internally contracted multi reference interaction configuration methods [1] including Davidson correction [2] (MRCI+Q). The electronic structure calculations were performed using the MOLPRO program [3]. In these calculations, different basis sets have been used for Sulfide and Cesium atoms.

The spectroscopic constants such as vibrational harmonic frequency  $\omega_e$ , the internuclear distance at equilibrium  $R_e$ , the rotational constant  $B_e$  and the electronic transition energy  $T_e$  of the ground and the excited electronic states have been calculated by fitting the energy values around the equilibrium position to a polynomial in terms of the internuclear distance [4]. These computations shows that the ground state of CsS is the (2II) and the equilibrium internuclear distance is computed as 3.09 Å.

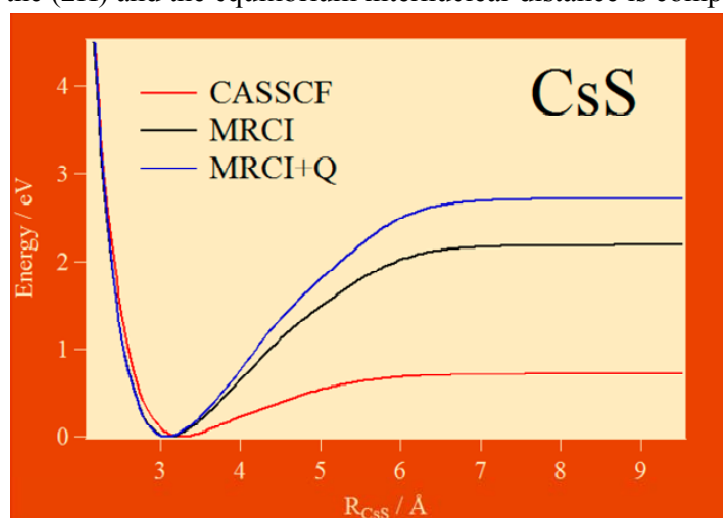


Figure 1. Potential energy curves

**Keywords** :MRCI, CASSCF, electronic structure, spectroscopic

**References**

- [1] P.J.Knowles and H.J.Werner, Chem.Phys.Lett.115,259,1985.
- [2] H.J.Werner and P.J.Knowles,J.Chem.Phys.89,5803,1988.
- [3] MOLPRO is a package of ab initio programs written by H.J.Werner and P.J.Knowles.
- [4] B. Numerov, Pubs. observatoire central astrophys. Russ. 2, 188, 1933.

## CP.147

**Theoretical prediction of the toxicity of polychlorinated biphenyls (PCBs) using functional density theory (DFT)**

Noura Naili<sup>a\*</sup>, Bachir Zouchoune<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Université 20 Août 1955 de Skikda, Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale Université Constantine (Mentouri Constantine) Constantine

<sup>b</sup>Laboratoire de Chimie appliquée et Technologie des Matériaux Université Larbi Ben M'Hidi—Oum El Bouaghi Oum El Bouaghi Algeria

\* email : n.naili@univ-skikda.dz, nouranaili@gmail.com

**Abstract**

DFT calculations with full geometry optimization using BP86 functional have been performed for predicting the toxicity of polychlorinated biphenyls (PCBs). Three series, namely; i-PBC; Coplanar, non-orthosubstituted PCBs; PCDD, have been studied. The predictive model suggests that the HOMO-

LUMO energy deficit is the overall indicator of PCB toxicity, which has been shown to be the main predictor of toxicity, but not the only one. We also examine their binding energies to determine the nature of the interactions that stabilize the compound. The Ziegler-Rauk energy decomposition analysis scheme was used to characterize geometric distortion, steric (electrostatic and Pauli) interaction and orbital interaction terms in total binding energy, studied by means of potential maps, can also explain the bioaccumulation of PCBs in environment.

**Keywords :** Density functional theory, Interaction energy, polychlorinated biphenyls

### CP.148

#### Theoretical study of EDDS, EDDM and EDTA acids for the prediction of their stability and reactivity

Salima Lakehal<sup>a</sup>, NAWEL REDJEM<sup>a,b</sup> and Aichalakehal<sup>c</sup>

Département de sciences de la matière, faculté des sciences exactes et SNV, université d'Oum el bouaghi, Algérie

Laboratoire de chimie appliquée et technologie des matériaux, université d'Oum el bouaghi, Algérie

Département des sciences et technologies, faculté de technologie, université Batna2, Algérie

#### Abstract

Aminopolycarboxylates (APCs)[1, 2] are multidentate ligands capable of coordinating with a wide range of metal cations. These ligands have found diverse applications in a wide variety of fields such as the removal of heavy metals from soil and water. Chelation technology, a trend of modern research, has shown its potential to develop a sustainable metal mining technology from various contaminated sites using a APCs new generation, which incites us to carry out a theoretical study on these ligands in order to find alternative ligands with a chelation capacity as effective as the EDTA. In this contribution, we will study in a theoretical way the reactivity of some APCs ligands such as EDDS, EDDM and EDTA and trying to predict their acid equilibrium constants.

**Keywords :** APCs, EDTA, EDDS

#### References

[1] Nowack, B. Chelating agents – overview and historical perspective, In: *Complexing Agents between Science, Industry, Authorities and Users*. (eds.: Nowack, B. & Giger, W.) Monte Verità, Ascona, Switzerland, March 11-16, pp. 25, 2007.

[2] Knepper, T.P. Synthetic Chelating Agents and Compounds Exhibiting Complexing Properties in the Aquatic Environment. *Trends in Analytical Chemistry*, Vol. 22, pp. 708-724, 2003.

### CP.149

#### Etude Théorique de la Réaction de Régénération du POM d'Anderson

Imane CHIKHAOUI<sup>a</sup>, Meriem ALMI<sup>b</sup>, Amar SAAL<sup>a,b,\*</sup>, Ourida OUAMERALI<sup>b</sup>

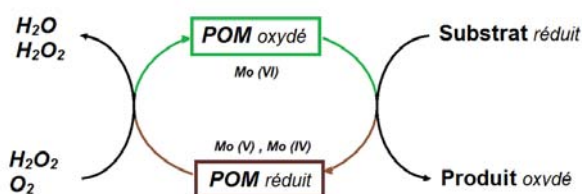
<sup>a</sup>Département de Chimie, Université Mouloud Mammeri TiziOuzou, UMMTO, 15000, Tizi-Ouzou, Algérie

<sup>b</sup>Laboratoire de Chimie Théorique Computationnelle et Photonique, USTHB, Alger, Algérie.

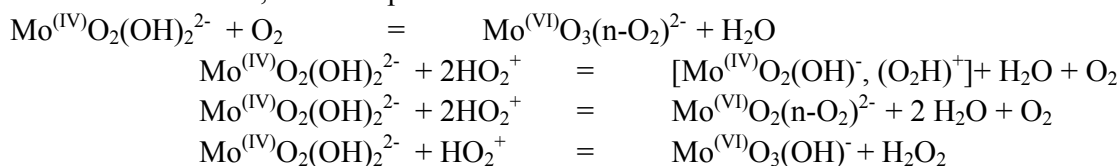
\*<sup>\*</sup>email : amarsaal@yahoo.fr

#### Abstract

Bien que les POMs sont très utilisés comme catalyseurs en industrie et au laboratoire, le mécanisme d'intervention de ces oxoclusters dans ces réactions reste inconnu. Le but de ce présent travail est proposer un schéma du mécanisme de régénération du POM d'Anderson réduit par le dioxygène et l'hydridodioxygène.



Au moyens des méthodes de la chimie computationnelle, plusieurs modes et directions d'attaque entre ces deux espèces ( $\text{Mo}^{(\text{IV})}\text{O}_2(\text{OH})_2^{2-}$  et  $\text{O}_2$  ou  $\text{HO}_2^+$ ) ont été étudiés. Les résultats obtenus, au moyen des méthodes de la DFT, nous ont permis d'écrire les réactions suivantes :



**Mots clefs :** polyoxométallates, régénération, DFT, catalyseur, oxydation du molybdène.

### CP.150

#### Theoretical study on the mechanism of $\text{CH}^+$ AND $\text{O}_3$ atmospheric reaction

K. Sidi Said et M. Nait Achour

Laboratoire de Thermodynamique et de Modélisation Moléculaire  
Faculté de chimie-USTHB, BP 32 El-Alia, 16111 Bab-Ezzouar (Alger).

*k.sidisaid@yahoo.fr*

#### Abstract

Molecules and radicals with C and H as constituents should be the first chemical building blocks. The methylidyne ( $\text{CH}^+$ ) cation was discovered in the atmosphere, at visible wavelengths, 70 years ago, shortly

after the discovery of the methylidyne radical (CH). Ozone is a significant constituent of the atmosphere, therefore, its molecular structure and electronic states have been extensively studied over the years. It plays an important role in pollutant degradation process, especially in polluted areas.

Moreover, ozone has a critical role in tropospheric chemistry and is considered as the key species affecting the chemical properties of the atmosphere. Thus, reaction of ozone with another molecules and radicals is one of the best investigated chemical reactions reported in many research papers.

This work consists on a study, using current methods of quantum chemistry, of a new mechanism of the reaction of ozone with methylidyne. Intrinsic reaction coordinate and harmonic vibrational frequencies calculations have been used to confirm the suggested mechanism. The potential energy surface (PES) drawn, allowed us to determine the various states including the reaction products which have considerable thermodynamic stability.

**Keywords:** reaction mechanisms; ozone; atmospheric reaction; methylidyne.

### CP.151

#### SAR and QSAR Modeling of some 1,4-diazine derivatives as anti-proliferative agents

Fatima SOUALMIA<sup>a\*</sup>, Nouredine TCHOUAR<sup>a</sup>, Nabila AOUMEUR<sup>a</sup>, Salah BELAIDI<sup>b</sup>

<sup>\*1</sup>University of Science and Technology of Oran-Mohamed Boudiaf (USTO-MB) 31036, Algeria

<sup>2</sup>Group of Computational and Medicinal Chemistry, LMCE Laboratory, University of Biskra, BP 145 Biskra 07000, Algeria

*\* email : fatima.soualmia@yahoo.fr*

#### Abstract

This work involves a fundamental and original research on 1,4 diazines, the aim is to predict the chemical reactivity and biological activity and to establish a pharmacophore models for new bioactive molecules.

The molecular modeling methods used in our work are: quantum methods, empirical methods. These methods were used to determine the structural parameters, electronics and energy associated with molecules studied. These optimized parameters are in good agreement with experimental values[1,2].

The nature of such substituent (donor, acceptor) affects the electronic and energy parameters of basic structure of 1,4diazines.

A study of the structure-properties/activity has been carried out for a series of bioactive derivatives of 1,4 diazine. The nature of the groups on heterocyclic ring of the studied molecules affects on their physico-chemical properties and by consequence on their pharmacological properties.

QSAR studies have been performed on twenty one molecules of 1,4diazine as Anti-Proliferative activity.

The correlation between the biological activity and descriptors expressed by the following relation:

$$\text{Log}(1/\text{IC}_{50\text{HEPG2}}) = 2.784 + 0.416\text{HE} + 0.692\log P + 0.021\text{SAG} - 0.181\text{Pol} + 73.301qC3 \quad (1)$$

$$n=21; r=0.943; S=0.131; F=24.090; Q=7.198$$

High correlation between experimental and predicted activity values was observed, indicating the validation and the good quality of the derived QSAR models.

**Keywords :** 1,4 diazine, QSAR, molecular modeling, biological activity.

### References

[1] NadjibMelkemi and Salah Belaidi, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, 11, 801-806 (2014).

[2] Alok K. Sachan, Shilendra K. Pathak, Onkar Prasad, Salah BELAIDI and Leena Sinha, SpectrochimicaActa Part A Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 132, 568-581 (2014).

### CP.152

#### Etude théorique, par la méthode DFT, du complexe

#### $[\text{Cu}(4\text{-éthyle pyridine triméthyltétrathiafulvalène)}_1(\text{hfac})_2][\text{PF}_6]_2$

Hanene Soukehal,<sup>a</sup> Saliha Belhouchat,<sup>a</sup> Noura Benbellat,<sup>a</sup> Samira Zeroual,<sup>a</sup> Abdelkrim Gouasmia<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Chimie des Matériaux et des Vivants : Activité, Réactivité (LCMVAR), Université Hadj Lakhdar – Batna 1, Batna, 5000, Algérie. Email : hanenesoukehal@yahoo.com

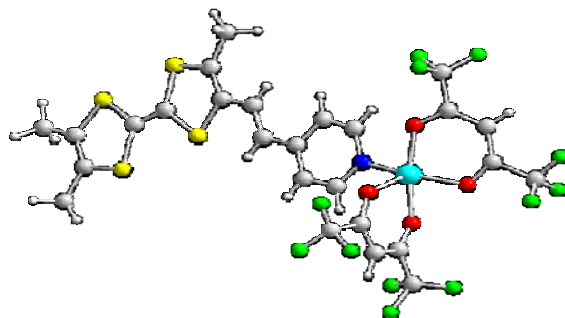
<sup>b</sup> Laboratoire des Matériaux Organiques et Hétérochimie, Université de Tébessa, 12000 Tébessa, Algérie

### Résumé

Les précurseurs TTF substitués par des ligands azotés sont aujourd'hui recherchés, dans le but de créer à côté du caractère métallique attendu un réseau magnétique<sup>[1]</sup>. Grâce aux sites azotés qui sont capables de générer, à l'état solide, des complexes de coordination avec des métaux de transition.

Des calculs théoriques ont été effectués sur le complexe hybride  $\text{Cu}(\text{TriMeTTF-CH=CH-Py})_1(\text{hfac})_2$ <sup>[2]</sup> en utilisant le programme de calcul ADF avec la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT). L'étude a été faite sur (les longueurs de liaisons, les angles, les dièdres, les énergies, l'AIM et la fragmentation) avec différents états d'oxydations.

Les résultats théoriques obtenus sont en très bon accord avec les données expérimentales.



Structure cristalline du complexe  $[\text{Cu}(\text{hfac})_2(\text{TTF-CH=CH-Py})][\text{PF}_6]_2$

**Mots clés :** Supraconducteur, sel d'ion radical 1, donneur d'électron- $\pi$ .

### Références bibliographiques :

[1] L. Ouahab, T. Enoki, Eur. J. Inorg. Chem. 2004, 5, 933.

[2] N. Benbellat, Y. Le Gal, S. Golhen, A.K. Gouasmia, L. Ouahab, Synth. Metals 2012, 162, 1789-1797.

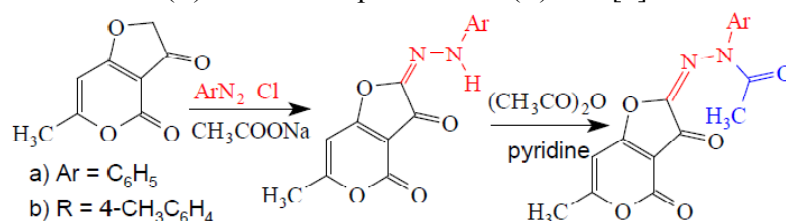
## CP.153

**Green synthesis, theoretical calculation and mechanism study of new 2-pyrone-based hydrazones**S TELLAL<sup>a</sup>, D OUKACHA-HIKEM<sup>a,b</sup>, A AMAR-HADDAD<sup>c</sup>, L BELMAHDI<sup>a</sup>,K OULD-LAMARA<sup>a</sup>, A BENZAOUZ<sup>a</sup>, M CHEBLI-MAKHOULFI<sup>a,b</sup>, Y.RACHEDI<sup>d</sup>, Artur M. S. SILVA<sup>e</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie des Matériaux, Faculté des Sciences, Université de Mouloud Mammeri, 15000, Tizi-Ouzou, Alegria<sup>b</sup> Laboratoire de Chimie Organique Appliquée, Faculté de Chimie, Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, B.P: 32 El-Alia, 16111 Bab-ezzouar, Alger, Alegria.<sup>c</sup> Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université de Mouloud Mammeri Tizi-Ouzou, Algérie<sup>d</sup> Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, BP 32, El-Alia, 16111 Bab-Ezzouar, Algérie<sup>e</sup> QOPNA, Department of Chemistry, University of Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal.

\* E-mail: sakina.tellal@ummto.dz

**Abstract**

In the present work the synthesis of new 2-pyrone-based hydrazones was carried out using the reaction scheme below. The structure of all compounds was established by spectroscopic methods, and the structure of the more stable conformer was theoretically confirmed by the potential energy profile analysis at the PBE1PBE/LANL2DZ level of theory using the Gaussian 09 program. The (E)-isomer with a C–N–N–C dihedral angle equal to 180° is found to be more favored relatively to the (Z)-isomer with C–N–N–C of 0° by 15.67 kcal/mol. Indeed, natural bond orbital analysis indicates a significant hydrogen bond-type interaction between LP(O) and  $\sigma^*(\text{N–H})$  on the (E)-isomer, with a stabilization energy of 8.61 kcal/mol. On the other hand, steric repulsion effects between the phenyl ring and the rest of the molecules destabilize the (Z)-isomer compared to the (E)-one [1].

**Keywords:** hydrazones, pyran-2-ones, theoretical calculations**Reference:** [1] D.Oukacha-hikem, M.Makhloufi-chebli, A. Amar, H.Bouherrou, Y.Rachedi, H. Meghezzi, Artur M. S. Silva, M. Hamdi, Synthetic communications, 47,6, 590, 2017.

## CP.154

**Etude théorique des propriétés structurales et électroniques des molécules d'intérêt interstellaires de formule générale [H,C,N,O,O] par les méthodes quantiques**Ala Eddine TOURCHI<sup>a</sup>, Aicha BENABDELKRIM<sup>a\*</sup>, Hasnia OTHMANI<sup>b</sup>, Saida BEN YAGHLANE<sup>b</sup>,Nejm Edine JAIDANE<sup>b</sup>, Majdi HOCHLAF<sup>c</sup>, Dalila HAMMOUTENE<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB, BP32, EL Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger, Algérie.<sup>b</sup> Laboratoire de Spectroscopie Atomique, Moléculaire et Applications LSAMA, Tunis El Manar, Tunis, Tunisie.<sup>c</sup> Université Paris-Est, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR 8208 CNRS, 5 bd Descartes, Marne-la-Vallée 77454, France

\* email : alaaeddinet@yahoo.com

**Résumé**

Les complexes [HCNOO], [HCOON], [HCONO], [NCHOO], [NCOOH], [HCNOO], [OCHNO], [HCNON] se trouvent en abondance dans le milieu interstellaire (MIS), dans les comètes et dans l'atmosphère de Titan. Leur réactivité est impliquée dans la synthèse de composés prébiotiques.

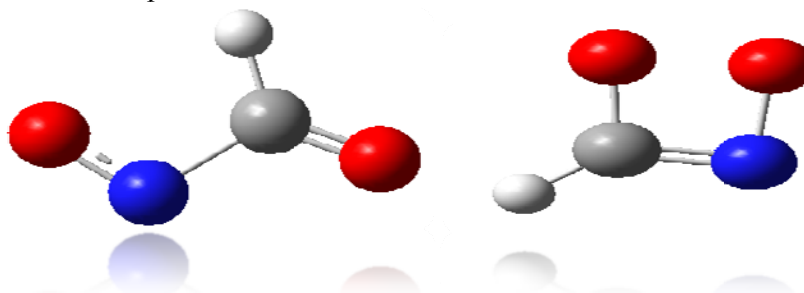
Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude théorique des propriétés physico-chimiques des complexes cités ci-dessus. Pour cela, nous avons eu recours aux méthodes de la chimie quantique.

Nous présenterons les résultats obtenus à l'issue de calculs utilisant les méthodes MP2, CCSD(T) et CASSCF ainsi que diverses bases de fonctions aug-cc-pvdz, aug-cc-pvtz et avtz.



Ces calculs nous ont permis de prévoir les complexes les plus stables et d'aider ainsi les expérimentateurs dans leurs investigations.

Nous avons aussi effectué une étude de la fragmentation des réactions afin d'étudier le processus de la formation et la destruction des ponts disulfures O-O.



**Figure 1:** Exemple de structures stables des complexes [OCHNO] de conformations cis et trans.

**Mots clés:** Milieu interstellaire, HCNOO, MP2, CCSD(T)

#### Références

[1] C. Møller and M. S. Plesset, Phys. Rev. 46, 618 (1934).

[2] R. D. Amos, J. S. Andrews, N. C. Handy, and P. J. Knowles. Chem. Phys. Lett. 185, 256 (1991).

### CP.155

#### Molecular structure, NMR, FT-IR, UV spectroscopy, and HOMO-LUMO of dérivé 2-(ferrocenylmethylamino) benzonitrile by quantum computing methods.

ZEGHEB Nadjiba<sup>a\*</sup>; BOUBEKRI Cherifa<sup>b</sup>; LANEZTouhami<sup>c</sup>

<sup>a,b,c</sup> Université Eshahid Hamma Lakhder El-Oued, département de chimie  
Laboratoire de valorisation et technologie de ressources saharienne.

*Zegheb-nadjiba@univ-eloued.d*

#### Abstract

The main objective of this work is the application of different molecular modeling bases to predict the chemical reactivities and biological activities expected in this molecule. The structure of 2-(ferrocenylmethylamino) benzonitrile was optimized with the Gaussian 09 software by the DFT / B3LYP method and the two bases sets 6-311G ++ (d, p) and LanL2DZ. the efficiency of the bioinformatic methods used in the calculations of geometric parameters can be evaluated by comparing the results obtained with the experimental values (X-ray). The Mulliken atomic charges were calculated and the FT-IR, UV-VIS spectra theoretically predicted. The H1 and C13 NMR spectra were calculated by the gauge independent atomic orbital method (GIAO) and compared with the experimental results. A study of electronic properties, such as HOMO and LUMO energies, was performed using a time-dependent DFT (TD-DFT) approach.

**Keywords :** 2- (ferrocenylmethylamino) benzonitrile, molecular modeling, DFT.



**CP.156****Etude structurale et électronique des spectres UV-Vis des Complexes d'un plan Bipyramidale à base carrée avec les métaux de transition [M (III) (PyPepS)<sub>2</sub>]<sup>x</sup> [(M=Cr, Mn Fe, Co et Ni) x=-1, 0, +1]: étude DFT et TD-DFT**S.M. Zendaoui<sup>a,b\*</sup>, S. Abbessa<sup>b</sup>, O. Bouzid<sup>b</sup>, B. Zouchoune<sup>a,b</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Chimie Moléculaire, du Contrôle de l'Environnement et des Mesures Physico-Chimiques, Université-de Constantine 1, 25000 Constantine, Algeria.<sup>b</sup>Laboratoire de Chimie appliquée et Technologie des Matériaux, Université Larbi Ben M'Hidi, 04000 Oum-El-Bouaghi, Algeria

\* email : zendaoui\_saber@yahoo.fr

**Résumé**

Les paramètres géométriques, structurales, électroniques et spectrales de formule générale [M+III(PyPepSO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>] d'une série de composés réels (M = Fe et Co) et hypothétiques (M = Cr, Mn et Ni) [(PyPepSO<sub>2</sub>)= ligand (N-2-Mercaptopheny-1-2-Pyridine-Carboxamide, NHase)] optimisée en la symétrie (C<sub>1</sub>). Sont étudiés au moyen de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT). Ainsi que, la nature de la liaison métal-ligand est analysée à l'état neutre et ionique d'espèces en fonction du nombre total d'électrons de valence du métal (MVE) et l'état de spin. L'énergie d'ionisation et l'affinité électronique ont montré que les complexes des chrome, fer et nickel neutre à 15, 17 et 20 électrons sont les espèces oxydées et réduites les plus faciles parmi tous les complexes étudiés. Pour les transitions électroniques observées et tirées de diagrammes théoriques sont de caractère MLCT pour le complexe [C], Tandis que les transitions électroniques pour [D] sont de types LMCT de type MLCT, qui sont des transitions faibles ou fortes liées à la localisation des orbitales occupées et vacantes.

**Mots clés** :DFT, NHase, MVE, MLCT, LMCT et MLCT.**Références**

- [1] R.J. Burt, Leigh et C. J. Pickett. J. Chem. Soc. Chem. Comm. 940, (1996).  
 [2] V. Mahalingam, R. Karvembu, V. Chinusamy, K. Natarajan. Spectrochim. Acta: Part A. 64, 4,886, (2006).  
 [3] L. A. Tyler.; J. Noveron.; M. M. Olmstead.; P. K. Mascharak. Inorg. Chem. 38, 616-617, (1999).  
 [4]. (a) Noveron, J. C.; Olmstead, M. M.; Mascharak, P. K. Inorg. Chem. 37, 1138, (1998).  
 (b) Noveron, J.C.; Olmstead, M.M.; Mascharak, P.K. J. Am. Chem. Soc. 123, 3247, (2001).

**Thème E**

**Théorie de l'Information Quantique et**

**Technologies Quantiques**

## Thème E: Théorie de l'Information Quantique et Technologies Quantiques Communications Orales

### CO.04

#### Action d'une amplification non-déterministe linéaire et sans bruit sur la distillation de l'intrication et de la téléportation des états cohérents de la lumière

Hamza ADNANE<sup>a\*</sup>, Abdelhakim GHARBI<sup>a</sup>, Matteo G A PARIS<sup>b</sup>

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

<sup>b</sup>Quantum Technology Lab, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano, I-20133 Milano, Italy

\* email : hamza.adnane92@gmail.com

#### Résumé

L'intrication est à l'origine de la suprématie de nombre de protocoles de l'information quantique. De la distribution de clés secrètes à la téléportation quantique, en passant par le codage super-dense, la distillation de l'intrication est indispensable pour l'accroissement de leurs performances. Ici, nous exposerons un protocole permettant d'augmenter significativement le degré d'intrication des états bimodaux corrélés dits « états EPR » à travers leur dégaussification moyennant un amplificateur non-déterministe linéaire et sans bruit (NLA). Les propriétés prépondérantes des états générés sont étudiées de près et la robustesse du protocole proposé illustrée par l'amélioration notable de la fidélité de la téléportation des états cohérents de la lumière.

**Mots clés:** Dégaussification, distillation de l'intrication, NLA, téléportation quantique.

#### Références

- [1] S. Pandey, Z. Jian, J. Combes, and C. M. Caves, Phys. Rev. A 88, 3, 033852 (2013).
- [2] H. Adnane, M. Bina, F. Albarelli, A. Gharbi and M. G. A. Paris, Phys. Rev. A 99, 6 (2019).
- [3] H. Adnane, and M. G. A. Paris, arXiv:1909.09509 (2019).

### CO.06

#### Can fluctuations enhance quantum entanglement ?

Kamel OURABAH<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup>Département de Physique Théorique, Faculté de Physique, USTHB, Boîte Postale 32, El-Alia, Bab-Ezzouar, Alger.

\* email : kam.ourabah@gmail.com

#### Abstract

We study the effect of temperature fluctuations on quantum entanglement. For this purpose, we use the by now standard method of superstatistics. The latter consists in decomposing the system's dynamics at different scales such that it is characterized by a superposition of statistics. By superposing to thermal quantum states, statistics characterizing temperature fluctuations, we construct thermal states in the presence of fluctuations and study their entanglement. Our findings show that certain fluctuations allow maintaining entanglement at higher temperature than it would be possible for a system a thermal equilibrium.

**Keywords :** quantum entanglement, temperature fluctuations, superstatistics.

**CO.30****Discrete and generalized phase space techniques in critical quantum spin chains**Zakaria MZAOUALI <sup>a,\*</sup>, Steve CAMPBELL <sup>b</sup>, Morad EL BAZ <sup>a,c</sup><sup>a</sup> ESMaR, Mohammed V University, Faculty of Sciences Av. Ibn Battouta, B.P. 1014, Agdal, Rabat, Morocco<sup>b</sup> School of Physics, Trinity College Dublin, Dublin 2, Ireland.<sup>c</sup> The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Strada Costiera 11, Miramare-Trieste, Italy.<sup>\*</sup> email : zakaria.mzaouali@um5s.net.ma**Abstract**

We apply the Wigner function formalism from quantum optics via two approaches, Wootters' discrete Wigner function and the generalized Wigner function, to detect quantum phase transitions in critical spin-1/2 systems. We develop a general formula relating the phase space techniques and the thermodynamical quantities of spin models, which we apply to single, bipartite and multi-partite systems governed by the XY and the XXZ models. Our approach allows us to introduce a novel way to represent, detect, and distinguish first-, second- and infinite-order quantum phase transitions. Furthermore, we show that the factorization phenomena of the XY model is only directly detectable by quantities based on the square root of the bipartite reduced density matrix. We establish that phase space techniques provide a simple, experimentally promising tool in the study of many-body systems and we discuss their relation with measures of quantum correlations and quantum coherence.

**Keywords :** Wigner function; quantum phase transitions; quantum spin chains; quantum correlations.

**References**

[1] Zakaria Mzaouali, Steve Campbell, Morad El Baz, "Quantum Phase Transitions in Phase Space" arXiv:1901.09164

**CO.35****Simulating quantum gates with anyons.**Ismail AKKOUCHE<sup>a\*</sup>, Achour BENSLAMA <sup>a</sup><sup>a</sup>Université des Frères Mentouri (Constantine1)<sup>\*</sup> email : akkouche.ismail@umc.edu.dz**Abstract**

In topological quantum computation, quantum information is encoded in states which are intrinsically protected from decoherence, and quantum gates are carried out by dragging quasiparticles around one another in two space dimensions. The resulting quasiparticle trajectories define world lines in three-dimensional space-time, and the corresponding quantum gates depend only on the topology of the braids formed by these world lines [1]. Now we know enough to address whether a universal quantum computer can be simulated using anyons. We need to explain how qubits can be encoded with anyons, and how a universal set of quantum gates can be realized [2].

**Mots clés / Keywords** Quantum, Information, Computing, Topology, anyons, Braids, Qubits, quantum gates, Fibonacci, Ising.

**CO.41****Superquantum information**Abdeslem, Khemakhmia<sup>a\*</sup>, Nouredine, Mebarki <sup>b</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique Mathématique et Subatomique, Mentouri University, Constantine1, Algeria<sup>b</sup>Laboratoire de Physique Mathématique et Subatomique, Mentouri University, Constantine1, Algeria<sup>\*</sup> email : khmakhemia04200@yahoo.com**Abstract**

A superqubit is a three dimensional supervector belonging to  $uOSP(1/2)$  supergroup. It is considered as supersymmetric generalization of a qubit. To see how superqubits properties can be exploited in the field of quantum computation, we propose some Algorithms to perform a super teleportation (the ability to teleport a superqubit), and also a super superdense coding (ability to send three classical bits by

sending only one superqubit), Implementation and technologies using superqubit circuits is an open field of research

**Keywords :** Superqubits, Superdense coding, Quantum information, Superteleportation,

### CO.45

#### **The Quantum Entanglement of Bosonic massless fields in Non commutative Expanding Spacetime**

Mohamed Farouk GHITI<sup>a,b\*</sup>, Noureddine MEBARKI<sup>b</sup> et Habib AISSAOUI<sup>b</sup>

<sup>a</sup>École Normale Supérieure Assia Djebbar, Constantine, Algérie

<sup>b</sup>Laboratoire de Physique Mathématique et Subatomique, LPMS, Université des Frères Mentouri, Constantine, Algérie.

\* *email : farouk.ghiti@yahoo.com*

#### **Abstract**

The non commutative Klein Gordan equation for massless particle is derived. The Quantum Entanglement of bosonic particle – antiparticle is studied using the Von Neumann entropy. It is shown that the quantum entanglement is very sensitive to different parameters, among them: the non commutativity -  $\theta$  parameter, the frequency modes as well as the structure of the using space time.

**Keywords :** Klein Gordan equation, Von Neumann entropy, quantum entanglement.

## Thème E: Théorie de l'Information Quantique et Technologies Quantiques Communications Posters

### CP.31

#### Improving quantum phase-shift keying by noiseless linear amplification and nonMarkovianity

HamzaADNANE<sup>a\*</sup>, Abdelhakim GHARBI<sup>a</sup>Matteo G A PARIS<sup>b</sup>

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

<sup>b</sup>Quantum Technology Lab, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano, I-20133 Milano, Italy

\*email : hamza.adnane92@gmail.com

#### Abstract

Phase-shift keyed communication channels (PSKCC), where information is imprinted at the transmission stage on quantum states via uniformly spaced phase-shift operations has attracted considerable attention in recent years owing to their experimental feasibility. Indeed, usual experimentally friendly quantum optical platforms already available in laboratories are the only required resources. In our work, we address the performances of an alternative scheme of PSKCC where a non-deterministic noiseless linear amplifier (NLA) is embedded at the preparation stage of the standard configuration. Our analysis are driven in the presence of both static and dynamical non-Markovian noise and is thus twofold: our upshots enable the identification of the NLA as a robust resource for PSKCC and, in parallel, attest for the pivotal advantage afforded by non-Markovian environments over their Markovian counterparts.

**Mots clés / Keywords** :Phase-shift keying, NLA, Non-Markovianity, Quantum noise, Reservoir engineering)

### CP.32

#### Entangled Nonlinear Coherent States attached to Tsallis q-exponential: Non-classical Properties and Quantum Entanglement

Abdelhak BENDJEFFAL

Faculté de Physique, Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, BP 32, El-Alia, Bab-Ezzouar, 16111 Alger, Algérie

email : abendjeffal@gmail.com

#### Abstract

Entangled nonlinear coherent states attached to Tsallis q-exponential are introduced and their non-classical properties are investigated. In addition, the amount of entanglement of the so-introduced states is examined by evaluating the concurrence. It has been found that, out of four, two states are maximally entangled.

**Keywords:** Nonlinear coherent states, entangled nonlinear coherent states, Tsallis q-exponential, nonclassical properties, entanglement.

### CP.33

#### Discrimination of quantum processes in the presence of noise within a superposition of causal orders

Seid KOUDIA<sup>\*</sup>, Abdelhakim GHARBI

Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000, Bejaia, Algeria

\*email : seidkoudia@gmail.com

#### Abstract

We address the superposition of causal orders in the quantum switch as a convenient framework for quantum process discrimination in the presence of noise in single qubit systems, using Bayes strategy. We show that, for different kinds of qubit noises, the indefinite causal order between the unitary to be discriminated and noise, gives enhancement compared to the definite causal order case, without reaching the ultimate bound of discrimination in general. Whereas, for entanglement breaking channels, the enhancement is significant. In this case, the quantum switch allows for the attainability of the

ultimate bound for discrimination posed by quantum mechanics, when the discrimination procedure fails in the definite order scenario. Memory effects escorting the superposition of causal orders are discussed, where we point out that processes describing an indefinite causal order, violate the notion of Markov-locality. Accordingly, a suggestion for the simulation of indefinite causal orders in more generic scenarios beyond the quantum switch is given

**Keywords :** Quantum discrimination, Superposition of causal orders, Controlled dynamics, Markov-locality.

**Thème F**  
**Physique Mathématique et Cosmologie**



## Thème F: Physique Mathématique et Cosmologie Communications Orales

### CO.05

#### Quantum solution of time-dependent equations related to cosmological models

Yahia SAADI<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique des Rayonnements et de leurs Interactions avec la Matière, Université Hadj Lakhdar Batna 1.

\*email : yahia.saadi@univ-batna.dz

#### Abstract

The study of the cosmological models always leads to solve a set of time-dependent differential equations. In our work, we suggest to consider one of these models and to build a quantum Hamiltonian, which corresponds to it. Once the Schrödinger equation is established, we can find a quantum solution to the original equation by using quantum mechanics tools such as the invariants theory.

**Keywords:** General relativity, gravitational field, metric, cosmological models, differential equations, Hamiltonian, invariants theory, perturbation theory, geometrical phases.

### CO.09

#### Non-commutative geometry and particle creation phenomenon

Slimane Zaim\*, Hadjar Rezki

Département de Physique, Faculté des Sciences de la Matière, Université de Batna 1, Batna, Algerie.

\*email : zaim69slimane@yahoo.com

#### Abstract

We investigate the phenomenon of particle production in the anisotropic universe space-time. We derive the deforms of Klein-Gordon and Dirac equations up to second order in the non commutativity parameter with an external field, using the general modified field equation. Then the canonical method based on Bogoliubov transformation is applied to calculate the particle number density in the  $k$  mode. We find that the resulting particle density at a constant value of the external field and that for a certain choice the particle number density is precisely thermal for the spinorial field, and for the scalar field.

### CO.10

#### New predictions on the nature of the hypothetical magnetic charge in Fock's nonlinear relativity

Naimi Takka<sup>a</sup> and Ahmed Bouda<sup>b</sup>

<sup>a, b</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, Bejaia 06000, Algeria

\*email :<sup>a</sup> takka.naimi@gmail.com, <sup>b</sup> bouda\_a@yahoo.fr

#### Abstract

In this communication, we present one of our interesting results predicted in Fock's nonlinear relativity, namely, the universe could locally contain the magnetic charge but in its totality it is still neutral. For this purpose, we briefly show how the restoration of the exact form of the  $R$ -Lorentz algebra symmetry impacts the usual result found in special relativity.

**Keywords:** Fock-Lorentz transformation,  $R$ -Minkowski spacetime, magnetic monopole.

**CO.13****Calculation of the  $^{25}\text{Al}(p,\gamma)^{26}\text{Si}$  and  $^{26}\text{Al}(p,\gamma)^{27}\text{Si}$  reaction rates**Hanane Mebrek<sup>1</sup>, Mouna Bouhelal<sup>2</sup>, Derradji Bahloul<sup>1</sup> and Abdelhamid Bouldjedri<sup>1</sup><sup>1</sup>PRIMALAB Laboratory; Departement of physics, University of Batna1, Avenue Boukhroufa M El Hadi, 05000 Batna, Algeria.<sup>2</sup>Laboratoire de Physique Appliquée et Théorique, Université Labri Tébessa, Tébessa, Algeria.

Mebrek.h92sm@gmail.com

**Abstract**

The major challenge in nuclear astrophysics is to find ways to determine reaction rates at excitation energies relevant for burning in the stellar environment. These rates depend upon the spectroscopic properties of states in the produced nucleus. Silicon has a significant astrophysical interest, which plays a crucial role in the comprehension of nucleosynthesis. We are interested in our work to the study of the spectroscopic properties of  $^{26}\text{Si}$  and  $^{27}\text{Si}$ , in a shell model framework using the PSDPF interaction [1], which are important for determining the  $^{25}\text{Al}(p,\gamma)^{26}\text{Si}$  and  $^{26}\text{Al}(p,\gamma)^{27}\text{Si}$  reaction rates. Calculation of the reaction rate involves the determination of the spin/parity level assignments, especially, of those at high excitation energies, above the proton threshold 5513.8 keV and 7463 keV [2] for  $^{25}\text{Al}(p,\gamma)$  and  $^{26}\text{Al}(p,\gamma)$ , respectively, which have an astrophysical interest. A detailed study that leads to the calculation of  $^{25}\text{Al}(p,\gamma)^{26}\text{Si}$  and  $^{26}\text{Al}(p,\gamma)^{27}\text{Si}$  reaction rates will be presented.

**Keywords:** reaction rate, nucleosynthesis, Silicon isotopes, PSDPF interaction, shell model, spectroscopic properties.

**References**[1] M. Bouhelal, *et al.*, Nucl. Phys. A 864, 113 (2011).[2] <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/>**CO.15****Study of the reaction  $^{12}\text{C}(\alpha,\gamma)^{16}\text{O}$** Mohammed Akram ZERMANE <sup>a\*</sup>, Nadia OULEBSIR <sup>b</sup><sup>a, b</sup>Laboratoire de Physique Théorique (LPT), université de BEJAIA<sup>\*</sup> email : mohammedakram.zermane@univ-bejaia.dz**Abstract**

$^{12}\text{C}(\alpha,\gamma)^{16}\text{O}$  capture reaction is considered to be the most important thermonuclear reaction in non-explosive astrophysical sites and its reaction rate is an important nuclear parameter in many stellar evolution models. This reaction was investigated through the direct  $\alpha$ -transfer reaction ( $^7\text{Li}, t$ ) at 28 and 34 MeV incident energies. After the determination of the reduced  $\alpha$ -widths of the sub-threshold  $2+$  and  $1-$  states of  $^{16}\text{O}$  from the DWBA analysis and the E2 and E1 S-factor from 0.01 MeV to 4.2 MeV in the center-of-mass energy and also the numerical determination of the reaction rate of this reaction at  $r=6.5$  fm and at a different stellar temperature (0.06 Gk-2 GK), we will determine a new reaction rate of this reaction at  $r=7.7$  fm and its variation with stellar temperature.

**Keywords:** nuclear astrophysics, nuclear reactions, cross sections, spectroscopic factor, astrophysical factor, reaction rate.

## CO.18

**Mass Spectrum of Open and Closed Strings with background B-Field and Para-Quantization.**Mohamed Adib ABDELMOUMENE <sup>a</sup>, nadir BELALOUI <sup>b</sup><sup>a</sup>Laboratory of mathematical physics and subatomic (LPMPs), Constantine.<sup>a</sup>adib.m.abdelmoumene@gmail.com<sup>b</sup>n\_belaloui@yahoo.fr**Abstract**

In this work, we study the open and closed string theory with a background B-field. In [1], we note the existence of a noncommutativity between the extremities of the open string coordinates (eq1), however, in the case of the closed strings; there is not [2]. In order to study the mass spectrum, we have to use the light cone coordinates, which lead us to compactify one dimension and the B field has to be fixed in a chosen direction (eq2) [3], which allow the coherence between the constraints equations (eq3) and the Total momentum (eq4). The mass operator for the closed and open strings is given by (eq5) and (eq6) respectively. After that, we study the paraquantization of this theory.

**Keywords:** Noncommutativity, B-field, light cone coordinates, compactification, paraquantization.

**Equations**

$$(eq1) : [X^i(\tau, \sigma), X^j(\tau, \sigma')] = -2i\alpha' (M^{-1}B)^{ij} \left[ (\sigma + \sigma' - \pi) + \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n} \sin n(\sigma + \sigma') \right]$$

$$(eq2) : X^1 \square X^1 + 2\pi R_1 \text{ Avec } B_{01} \equiv B$$

$$(eq3) : \partial_\sigma X^\mu + \partial_\tau X^\nu B_\nu^\rho = 0$$

$$(eq4) : P^\mu = \frac{1}{2\pi\alpha'} \int_0^\pi d\sigma \partial_\tau X^\mu - B_\nu^\mu \int_0^\pi d\sigma \partial_\sigma X^\nu$$

$$(eq5) : M^2 = 2P^+P^- - \bar{P}^2 = \frac{2}{\alpha'}(1+2\pi\alpha'B)(N-1) + \frac{2}{\alpha'}(1-2\pi\alpha'B)(\tilde{N}-1)$$

$$(eq6) : M^2 = 2P^+P^- - \bar{P}^2 = 4\pi Bm + \frac{1}{\alpha'}(N-1)$$

**References**

- [1] C.CHU, P.HO, Nuclear Physics B 550, (1999)  
 [2] T.Kawano, T.Takahashi, rXiv:hep-th/0005080v2, 29 May 2000  
 [3] G.Grignani, M.Orselli, G. W. Semenoff, Xiv:hep-th/0104112v2, 19 Apr 2001

## CO.20

**Bi-Galileon Model**Boumaza Hamza <sup>a</sup>, Nouicer Khiredinne <sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratory of Theoretical Physics (LPTH) and Department of Physics, Faculty of Exact and Computer Sciences, Mohamed Seddik Ben Yahia (MSB) University, Jijel, Bp 98 Ouled Aissa, Jijel 18000, Algeria

\*email : boumaza14@yahoo.com

**Abstract**

We propose a dark energy cubic Bi-Galileons field model based on the truncation of the recently introduced generalized multi-Galileons addressed in []. We show the existence of a tracker solution similar to that of the single cubic Galileon model. We find that a wide variety of the variation of the dark energy equation of state including the entry to the region wDE <-1 can be realized. We show that the competition between the two scalar fields allows the avoidance of the tracker solution with an equation of state wDE = -2 during the matter era, which is disfavoured by observational data.

**Keywords :** Cosmology, Dark energy, Dark matter.

**References**

- [1] A. De Felice and S.Tsujikawa, Phys. Rev. D, **84**, 124029 (2011).  
 [2] A.De Felice, S. Tsujikawa, JCAP 007 (2012).  
 [3] R. Kase, S. Tsujikawa and A. De Felice, Phys. Rev. D, **93** (2), 024007 (2016).  
 [4] R. Kase and S. Tsujikawa, Phys. Rev. D, **97** (10), 103501 (2018)

**CO.21****Sur la dynamique des particules avec spin en relativité générale**Hichem GUERGOURI<sup>a\*</sup>, Taoufik FOUGHALI<sup>b</sup><sup>a, b</sup>Laboratoire de Physique Théorique (LPT), université de BEJAIA<sup>\*</sup>email : [guergouri.hichem.92@gmail.com](mailto:guergouri.hichem.92@gmail.com)**Résumé**

Afin d'étudier la dynamique des particules avec spin dans un espace-temps courbe, on s'ait familiariser avec le formalisme hamiltonien de Dirac des systèmes avec contraintes. Ensuite, et afin d'étendre ces formalismes aux espace-temps courbes, il est nécessaire de déterminer la structure de l'espace des phases et utiliser une forme adéquate de l'hamiltonien qui permettra de trouver les équations de mouvement décrivant la dynamique des particules avec spin en relativité générale. Puis on a utilisé les vecteurs de killing du groupe R-Poincaré pour calculer les équations de mouvement dans le cas de l'espace R-Minkowski qui correspond à l'espace-temps de de Sitter.

**Mots clés:** De Sitter, Vecteurs de killing, Contraintes, Espace courbe, R-Minkowski, Dynamique, Spin.

**Références**

[1] A. A. Deriglazov. Variational problem for the Frenkel and the Bargmann-Michel-Telegdi (BMT) equations. *Modern Physics Letters A*, 28(01):1250234, 2013.

**CO.22****Equation de Dirac dans un Espace-temps Courbé et Création de Paires de Particules.**Nabil MEHDAOUI<sup>a\*</sup>, Lamine KHODJA<sup>a, b</sup>, Abdelhakim GHARBI<sup>a</sup>, Salah HOUAT<sup>c</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia. 06000 Bejaia. Algérie.<sup>b</sup>Département de Physique, Faculté des Mathématiques et des Sciences de la Matière, Université Kasdi Merbah, Ouargla 30000, Algeria.<sup>c</sup> LPTh, Département de Physique, Université de Jijel, BP 98, Ouled Aissa, Jijel 18000, Algeria.<sup>\*</sup> Email : [mehdaouinabil@live.fr](mailto:mehdaouinabil@live.fr)**Résumé**

Dans le présent travail nous nous sommes intéressé à l'effet d'un champ électrique sur le processus de la création de paires de particules de spin  $\frac{1}{2}$  à partir du vide dans un espace-temps de De Sitter à (1+1) dimension. L'Equation de Dirac en présence d'un champs électrique constant est résolu, En utilisant la transformation de Bogoliubov, qui relie les états « in » avec les états « out », la probabilité de création de paires et la densité nombre de particule créée sont calculé. On a conclu que le champ électrique a contribué à l'amélioration de la création de paires de particules.

**Mots clés:** Equation de Dirac, Espace-temps de De Sitter, création de paires, transformation de Bogoliubov.

**CO.32****The Neveu-Schwarz-Ramond models with deformed dispersion relations.**Hocine Randji<sup>a\*</sup>, Nadir BELALOU<sup>b</sup><sup>a</sup>University of Mentouri, Constantine 1<sup>\*</sup> email : [randji.hocine@yahoo.com](mailto:randji.hocine@yahoo.com)**Abstract**

We present the Neveu-Schwarz-Ramond models with deformed dispersion relations, by introducing two energy dependent functions “f” and “g” into the fermionic string constraints. The classical algebra generators is closed, and the local supersymmetry in the world-sheet is energy dependent. In a subset of these models, the supersymmetry in the world-sheet seems to be possible. It is also shown that in some choices, before the GSO projection, the spectrum of the Neveu-Schwarz sector become without tachyon. But, if this projection is used, all the mass levels accumulate below the Planck energy.

**Keywords :** fermionic string, deformed dispersion relations, GSO projection, supersymmetry.

### CO.34

#### The three dimensional time dependent generalized Dirac oscillator (Adiabatic solution)

CHAABI Nadir

Université de Sétif 1

*nadir.chaabi@univ-setif.dz*

#### Abstract

The Dirac oscillator is one of the most important developments in its construction and application. It is a generalization of the harmonic oscillator to the relativistic case. In this work, we consider the adiabatic approximation for the three dimensional time dependent generalized Dirac oscillator. We determine the solution of the corresponding Schrodinger equation in the framework of the adiabatic approximation; whose, we calculate the corresponding geometric phase (Berry phase).

**Keywords:** Relativistic quantum mechanics, The adiabatic approximation, Dirac oscillator, Geometric phase, Berryphase.

### CO.44

#### Flavor changing in the flipped 341 model

Meriem DJOUALA<sup>a\*</sup>, Nouredine MEBARKI<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique Mathématique et Subatomique, Physics Department,  
Faculty of Fundamental Sciences, Frère Mentouri University constantine 1, Algeria

\* *email : djoualameriem@gmail.com*

#### Abstract

We present a new recently proposed chiral gauge anomaly flipped 341 model where leptons families are arranged in different SU(4) gauge group representations leading to a non universal coupling with heavy neutral gauge bosons  $Z'$  and  $Z''$  of the model. The resulted flavor changing neutral current in the leptonic sector is discussed and bounds on some of the flavor changing parameters are derived using the recent experimental data on the muon rare decays.

**Keywords :** The flipped 341 model, FLV.

#### References

- [1] R. M.Fonseca and M. Hirsch, in A flipped 331 model, JHEP08, 003, 10 (2016).
- [2] D.T.Huong, D.N.Dinh, L.D.Thien, and P.Van Dong, in Dark matter and flavor changing in the flipped 3-3-1 model, JHEP08, 051 (2019).

## Thème F: Physique Mathématique et Cosmologie Communications Posters

### CP.64

#### **Détermination du spectre des énergies de potentiel de Rosen-Morse modifié dans le cadre du formalisme des intégrales de Feynman**

Assia Amrouche<sup>a\*</sup>, Ahmed Diaf<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique des Techniques Expérimentales et ses Applications, Université de Médéa.

<sup>b</sup>Laboratoire de l'Energie et des Systèmes Intelligents, Université de Khemis Miliana.

\* *email amroucheassia@gmail.com*

#### **Résumé**

Nous avons déterminé, dans le cas du potentiel de Rosen-Morse modifié, le spectre des états  $\ell$  en utilisant une approximation pour le terme centrifuge; celle-ci nous a permis de passer de la résolution d'un problème relatif aux états  $\ell$  à un cas déjà connu dont sa résolution se fait moyennant une transformation spatio-temporelle.

Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux donnés dans la littérature.

**Mots clés :** Intégrale de chemin, propagateur, potentiel de Rosen-Morse modifié, approximation de Pekeris, spectre des états liés.

### CP.65

#### **Schwinger effect in the presence of a nonzero minimal length**

Bouali Messaouda<sup>a</sup>, Salah Haouat<sup>b\*</sup>

<sup>a,b</sup>Mohamed Seddik Ben Yahia university -jijel

\* *email : s.haouat@gmail.com*

#### **Abstract**

We have studied the effect of a nonzero minimal length on the particle-antiparticle pairs creation from vacuum by considering the Schwinger's method. The effective action is calculated for scalar quantum electrodynamics (QED) in the presence of a constant electromagnetic field. It is shown also that limit of zero minimal length we obtain the known results corresponding to the ordinary quantum fields.

**Keywords :** particle création, Schwinger's method

### CP.66

#### **Analytical solutions of the Schrödinger equation with an energy-dependent hyperbolic potential using the Pekeris approximations**

Elhadj Hocine<sup>a\*</sup>, Rabia Yekken<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Département de Physique Théorique, Faculté de Physique, Université des Sciences et de la Technologie Houari

Boumedienne, BP 32 El-Alia, 16111 Alger, Algeria

\* *email : hocineelhadj@gmail.com*

#### **Abstract**

The bound-state solutions of the Schrödinger equation for an energy-dependent hyperbolic potential with the centrifugal term are presented approximately. It is shown that using the Pekeris approximation to the centrifugal term, we can transform the Schrödinger to a hypergeometric-like differential equation. After that, by using the quantization condition we determine the energy eigenvalues. To show the accuracy of our results, we calculate the energy eigenvalues numerically for arbitrary quantum numbers  $n$  and  $l$  with two different values of the parameter  $\sigma$  and  $\gamma$ .

**Keywords:** Energy-dependent potentials, Hypergeometric equations, Bound states.

**CP.67****Hartmann Potential with a Minimal Length and Generalized Recurrence Relations for Matrix Elements**Lamine KHODJA<sup>a\*</sup>, Mohamed ACHOUR<sup>b</sup><sup>a</sup>Département de Physique, Faculté des Mathématiques et des Sciences de la Matière, Université Kasdi Merbah - Ouargla, Algeria<sup>b</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algeria.<sup>\*</sup> email : *lamine\_khodja@yahoo.fr***Abstract**

In this work we have study the Schrödinger equation in the presence of the Hartmann potential with a generalized uncertainty principle. Pertubatively, in the first order of the parameter of deformation, we obtain the corrections of energy levels and we derive a generalized recurrence formula for the angular average values.

**Keywords** :Hartmann potential; Schrödinger equation; Generalized uncertainty principle

**CP.96****Pseudoharmonic potential of diatomic molecules in noncommutative space**Mohamed ACHOUR<sup>a\*</sup>, Lamine KHODJA<sup>ab</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté de Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algeria.<sup>b</sup>Département de Physique, Faculté des Mathématiques et des Sciences de la Matière, Université Kasdi Merbah, Ouargla 30000, Algeria.<sup>\*</sup> email : *achour00mohamed@gmail.com***Abstract**

In this paper we have study of the exact solution of the Schrödinger equation for the pseudoharmonic potential in Non-comutative space. The exact energy eigenvalues and eigenfunctions are calculated by Nikiforov–Uvarov method, then we use the first-order perturbation theory to calculate the correction of energy due to non-commutativity. Finally, we show that the degeneracy of the initial spectral line is broken in transition from commutative space to non-commutative space.

**Keywords** : Pseudoharmonic potential, Schrödinger equation, eigenvalues and eigenfunction, Nikiforov–Uvarov method, diatomic molecules.

**CP.97****On the quantum behaviour of a fermion in the presence of a scalar and vector potential barriers**Basma.AINOUS<sup>a\*</sup>, Salah.HAOUAT<sup>b</sup><sup>a,b</sup>Mohamed Seddik Ben Yahia university -jijel<sup>\*</sup> email : *s.haouat@gmail.com***Abstract**

The Klein's paradox in the presence of scalar and vector potential barriers is studied. From the corresponding Dirac equation we have calculated the transmission and reflection coefficients. Considering the problem within the framework of quantum field theory, we have calculated the related pair creation probability, the mean number of created particles and the probability of vacuum to remain a vacuum.

**Keywords** :Klein's paradox, scalar potential, particle creation

**CP.98****Projected Partition Function of a Color-singlet Quark-Gluon Plasma within a Density of States given by the Multiple Reflection Expansion Approximation**Amal AIT EL DJOUDI <sup>a\*</sup>, Karima MEZOUAR <sup>a</sup> & Bachir MOUSSAOUI <sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique des Particules et Physique Statistique,  
Ecole Normale Supérieure-Kouba, B.P.92, 16050, Vieux-Kouba, Algiers, Algeria,<sup>\*</sup> email : ait\_amel@hotmail.com**Abstract**

We present in this work the calculation of the partition function for a Quark-Gluon Plasma (QGP) in the color-singlet SU(3) representation, using the group theoretical projection method. The density of states we use here is that given by the Multiple Reflection Expansion approximation, where the curvature and the volume terms only contribute in the present case of a QGP containing massless up and down quarks, in addition to gluons.

**Keywords :** Projection method, Density of states, Multiple Reflection Expansion Approximation, Color singletness, Quark gluon plasma.

**CP.99****Scattering of a spin-1/2 Dirac particle by a Woods-Saxon potential**Soumia AYACH HAMRAOUI <sup>\*</sup>, Kamel KHOUNFAIS<sup>a</sup>Faculty of Sciences Department of Physic, 20<sup>th</sup> August 1955 Skikda University, BP-26 Skikda, Algeria<sup>\*</sup> email : soumiahamraoui@yahoo.fr**Abstract**

In this work, we study the problem of the scattering of spin-1/2 relativistic particles in the presence of the Woods-Saxon potential, using the quadratic Dirac's equation. The solution of this equation is a linear combination of two hypergeometric functions. From the asymptotic behavior, we drew the reflection and transmission coefficients for the Saxon Woods potential. The case of the barrier has been deduced by a limit procedure

**Keywords:** Dirac's equation, hypergeometric functions, Woods-Saxon potential, spin.

**CP.100****Exact solutions for a relativistic generalized harmonic oscillator using quantum Hamilton-jacobi approach**Halima BACHI <sup>a,b \*</sup>, Samir TOULOUM <sup>a</sup>, Abdelhakim GHARBI <sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia. 06000 Bejaia. Algérie.<sup>b</sup> Université de Bouira, Algérie.<sup>\*</sup> email : halimabachi@gmail.com**Abstract**

We investigate the exact solutions of the Klein-Gordon equation for a generalised harmonic oscillator by the mean of the quantum Hamilton-Jacobi formalism. By considering the condition of equal vector and scalar potentials, we construct the wave function with a radial part expressed using generalized Laguerre polynomials and an angular part written in terms of Jacobi polynomials. We also derive the exact energy spectrum and its nonrelativistic limit.

**Keywords :** generalised harmonic oscillator, Klein-Gordon, quantum Hamilton-Jacobi formalism, quantum momentum function, energy eigenfunctions.



**CP.101****Geodesic equation in R-Minkowski phase space**

Berrabah Abdelghani

<sup>a,b,c</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algeria\* *email : ghani022@gmail.com***Abstract**

In this work we have investigated the geodesic equation in R-Minkowski space; Due the Fock transformation a new correction emerge in geodesic equation, which valid up to first the order of R, where we use the generalization of Feynman approach, the method has published first time by Dyson in order derive Maxwell equation in nonrelativistic framework where he starting from Newton's law of motion and the commutation relations between position and velocity to obtained it, this formulation has been generalized in relativistic case also in the general relativity to derive the geodesic equation, we have expanded the Feynman approach in non-commutative R-Minkowski phase space in order to derive geodesic equation, as well as we, discuss Newtonian limit.

**Keywords :** R-Minkowski space, Fock transformation, General relativity ...

**CP.133****Eikonal gluon Bremsstrahlung and non global logarithms.**Hamza Bouaziz <sup>a\*</sup>, Yazid Delenda <sup>a</sup><sup>a</sup>Primalab laboratory, Department of physics, university of Batna 1, avenue Boukhroufa M EL hadi, 05000 Batna, Algeria.\* *email : hamza.bouaziz420@gmail.com***Abstract**

We analytically compute the fourth order contribution of the Non-global logarithms to the hemisphere jet mass distribution (i.e. the emission of 4 soft energy-ordered gluons out of the hard partons). Taking the process  $e^+e^-$  into di-jet event as an example and working at finite  $N_c$  and in the eikonal approximation, the 4-loop contribution is extracted from a soft gluon evolution equation recently proposed and the result is then compared to previous findings in the literature, finally we discuss the possibility of an all order resummation of these NGLs in perturbation theory.

**Mots clés / Keywords :** Non global logarithms, Finite  $N_c$  approximation, Jets, Resummation.

**CP.134****Finite size effects on the deconfinement phase transition to a QGP for different SU(3) color representations**Karima MEZOUAR <sup>a\*</sup>, Amal AIT EL DJOUDI <sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique des Particules et Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure, B.P. 92, 16050, Vieux-Kouba, Algiers, Algeria.\* *email : mmezouar@yahoo.fr***Abstract**

The aim of this work is to study the finite size effects on the deconfinement phase transition from a hadronic gas phase composed of massive pions to a quark gluon plasma (QGP) phase consisting of gluons, massless up and down quarks and massive strange quarks. We effectuate this study by calculating some thermodynamical quantities characterizing the mixed hadronic gas-QGP system, such as the order parameter and the energy density, within the phase coexistence model. The obtained analytical expressions of the physical quantities comprising complicated multi-integrals are then adequately calculated in a numerical way, and the resulting data are plotted to obtain graphics of these quantities. Thus, we examine their behavior as a function of temperature at different volumes of the system and different  $SU(3)$  color representations for the QGP, namely the color singlet, color octet, and color 27-plet representations.

**Keywords** : Quark Gluon Plasma,  $SU(3)$  Color representations, Deconfining phase transition, Projection method, Hadronic gas.

### CP.135

#### The Quark-Gluon Plasma Equation of State at Finite Chemical Potential within the Bag Model

Bachir MOUSSAOUI <sup>a\*</sup>, AmalAIT EL DJOUDI<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique des Particules et Physique Statistique,  
Ecole Normale Supérieure-Kouba, B.P.92, 16050, Vieux-Kouba, Algiers, Algeria,

\* email : bachir8211@hotmail.fr

#### Abstract

One of the most exciting topics in recent high energy physics is to search for signals of a possible phase transition between the hadronic phase and the quark-gluon plasma (QGP) phase, at high temperature and density. This novel state of matter could be produced in very high energy nuclear collisions. The experimental study of relativistic heavy nuclei collisions has established the properties of the QGP, which turns to be a state of hot, dense nuclear matter in which quarks and gluons are not bound into hadrons. This work deals with a description of the deconfinement phase transition (DPT) from a hadronic gas consisting of massless pions to a color-singlet QGP at finite temperature and chemical potential. Considering the color singletness condition, the approximate partition function at finite chemical potential is calculated for the QGP phase with gluons and massless up and down quarks, within the group theoretical projection method [1] and using a density of states containing the volume term only, in a first step. The such obtained color-singlet partition function (CSPF) can be used to calculate physical quantities of the QGP at finite chemical potential within the phase coexistence model [2].

**Keywords** : Quark gluon plasma , Deconfining phase transition, Finite chemical potential, Color singletness.

### CP.136

#### Regularization of the singular attractive potentials by using an energy dependent coupling constant

Rabia YEKKEN<sup>a\*</sup>, Elhadj HOCINE <sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté de Physique, Université des Sciences et de la Technologie  
Houari Boumedienne, BP 32 El-Alia, 16111 Alger, Algeria.

\* email : rabia\_yek@yahoo.fr

#### Abstract

In non-relativistic quantum mechanics, when the potential is highly singular, we are confronted with integrability difficulties of the wave functions. It is found that the Hamiltonian is not Hermitian. To restore its Hermiticity, energy dependent potentials are been considered. The non-linearity of the resulting wave equation underlines new features of the solutions with respect to the usual case. The shift appeared essentially in the lowest bound states allows us to avoid the undesirable critical situations. A proof that all the attractive singular potentials with an energy dependent coupling constant generate a spectrum of eigenvalues bounded below is given. Illustrative examples of the form-  $\lambda(1 + \gamma E)/|x|^m$  in 1D dimensional space are studied.

**Keywords** : Schrödinger equation, singular potential, energy dependent potential, regularization, critical situations.

**CP.137****The Microstates of (2+1)-dimensional Black Hole and CFT**

Hadjer BENMEBAREK \*

Laboratoire de Physique des Rayonnements, Univ Annaba, Annaba 23000, Algeria

\* email : [benmebark.hadjer@gmail.com](mailto:benmebark.hadjer@gmail.com)**Abstract**

Gravity in (2+1)-dimensions is an interesting framework for addressing issues about black holes. I will present the (2+1)-dimensional black hole, known as BTZ black hole. Then I will report on its entropy and counting its microscopic states.

Some notions of Conformal Field Theory (CFT) are introduced. These are used to derive Cardy formula which is the central formula for computing the number of microstates. The asymptotic symmetries and their Lie algebra are also given.

**Keywords :** BTZ black hole - Entropy - Microscopic states - Cardy Formula.

**CP.157****Effets viscoélastiques sur les instabilités dans un écoulement annulaire à faible nombre de Reynolds**NabilaBOUBALOU<sup>a\*</sup>, Nadia MEHIDI BOUAM<sup>b</sup>, HouriaDJESSAS<sup>b</sup><sup>a</sup>Département de Physique, Laboratoire de Physique Théorique, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou 15000<sup>b</sup>Département de Physique, Laboratoire de Physique Théorique, Université A.Mira de Béjaia, Béjaia 06000\* [nabilaboubalou@gmail.com](mailto:nabilaboubalou@gmail.com)**Résumé**

Nous intéressons dans ce travail à l'étude de l'instabilité de l'interface entre deux couches de fluides viscoélastiques incompressibles s'écoulant à l'intérieur d'un cylindre. Ces instabilités se manifestent sous forme d'ondes pour certaines combinaisons de rapports des viscosités et des épaisseurs des couches de fluides avec des taux de croissance proportionnels au nombre de Reynolds. De nouvelles formes d'instabilités induites par la tension superficielle et la courbure de la paroi de l'écoulement annulaire, peuvent perturber l'écoulement et provoquer à leur tour des instabilités qualifiées d'instabilités capillaires. L'intérêt est notamment de considérer le rôle de la viscoélasticité sur les instabilités mises en évidence.

**Mots clés:** Fluides viscoélastique, écoulement axisymétrique, stabilité linéaire, instabilités capillaire, instabilité des ondes longues.

**CP.158****The geometrical aspect of electromagnetic interaction**Abdelmadjid DJEHICHE<sup>a\*</sup>, Abdelmoumene BELABBAS<sup>a</sup>, Ahmed BOUDA<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie\* email : [a.majdjehiche@gmail.com](mailto:a.majdjehiche@gmail.com)**Abstract**

In order to describe electromagnetism as a geometrical phenomenon, we need to generalize the equivalence principle to the electromagnetism interaction, so that the path of charged particle becomes a geodesic in a spacetime which is curved by the effect of electromagnetic field. The metric in static spherical symmetry was determined, and the orbit of charged particle has a perihelion advance. As a quantum application to the hydrogen atom we proposed an explanation of Lamb-shift as a quantum manifestation of the perihelion advance.

**Keywords :** equivalence principle, electromagnetism, cosmological constant, perihelion advance, Lamb-shift.

### CP.159

#### Some characteristics of the deconfinement phase transition in a finite volume from cumulants of the probability distribution

Rokaya DJIDA<sup>a\*</sup>, Amal AIT EL DJOUDI<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique des Particules et Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure-Kouba, BP 92, 16050, Vieux-Kouba, Algiers, Algeria

\*email : rokayadjida@gmail.com

#### Abstract

This work aims to investigate the thermally driven QCD Deconfining Phase Transition (DPT), from a hadronic gas phase to a Quark Gluon Plasma (QGP), in a finite volume at zero chemical potential. For that we adopted the idea of examining thermodynamic quantities called response functions which give a concise description of the DPT. We deal with the four first cumulants of the probability distribution representing the order parameter, variance, skewness and kurtosis respectively. These mean values are calculated using the partition function of the QGP with the color-singletness requirement, which is obtained within the projection method. The such obtained results are translated into graphs, with varying temperature and for different volumes of the system. We notice that the cumulants are asymmetric, and comparatively to previous works, we obtain a striking result which is that the width of the rounded transition region cannot be extracted from cumulants, whereas the effective transition temperature can be extracted from each of them. It can be defined at the value 0.5 of the order parameter, at the maximum of the variance, at vanishing skewness and at the minimum of kurtosis.

**Keywords :** Confinement, QCD phase transition, color-singletness, Cumulants.

### CP.160

#### Modélisation numérique pour générer l'énergie de l'état lié par la méthode variationnelle semi-inverse-B-spline

Ouanassa HAIF KHAIF<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup>Université de Biskra, B.P. 145, 07000 Biskra, Algeria

\*email : wa\_haif@yahoo.fr

#### Résumé

Nous avons introduit, le formalisme variationnel pour chercher les solutions dans le cadre quantique. Nous avons utilisé la nouvelle méthode semi- inverse variationnelle dans le traitement des modèles différentiels. Nous avons traités les énergies et les états liés correspondants pour les systèmes de potentiel du type de coulomb.

**Mots clés:** méthode semi inverse, équation de Schrödinger, B spline.

### CP.161

#### An investigation of the Higgs-gauge boson couplings at Leptonic Colliders

Hilal Hamdellou

Laboratoire de Physique Théorique, Département de Physique, Université de Bejaia

\*email : hilalhamdellou@gmail.com

#### Abstract

The Higgs-gauge couplings to the W and Z gauge bosons  $hVV$  (with  $V=W,Z$ ) are crucial to determine its origin. In this work, we investigate the Higgs-gauge couplings  $hVV$  via  $bb\_bar + E_{miss}$ ,  $l^+ l^- + bb\_bar + E_{miss}$  and  $bb\_bar + l^+ jj + E_{miss}$  final states with  $E_{CM} = 250$  GeV, 500 GeV and 1 TeV respectively at leptonic colliders. This is could be realisable at future  $e^-e^+$  colliders such as ILC due to its high sensitivity compared to the HL-LHC.

**Keywords :** Higgs couplings.

### CP.162

#### **Dirac Particles Tunneling from Rotating Charged Cosmic Strings with Seiberg-Witten Non Commutative Geometry**

Lamia Menacer<sup>a</sup>, Habib Aissaoui<sup>b</sup>, Noureddine Mebarki<sup>c</sup>

Laboratoire de Physique Mathématique et Subatomique, Mentouri University Constantine 1, Algeria

<sup>a</sup> lamia43dz@gmail.com; <sup>b</sup> aissaoui\_h@yahoo.com; <sup>c</sup> nmmebarki@yahoo.fr

#### **Abstract**

The radiation of fermions from charged and rotating cosmic strings in the context of the quantum tunneling approach and space-time noncommutative geometry formalism is investigated. Moreover, using WKB approximation and Hamilton-Jacobi method, the related Hawking temperature and tunneling probabilities of incoming and outgoing fermions are derived. A comparison with the commutative case is also made.

### CP.163

#### **Effet de lentille gravitationnelle fort dans le cadre du modèle d'Einstein-Straus avec une courbure spatiale positive**

Mourad GUENOUCHE <sup>a,b,\*</sup>, Sami Ryad ZOUZOU <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique Théorique, Département de Physique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Constantine 1, BP 325 route de Ain El Bey, 25017 Constantine, Algérie

<sup>b</sup> Université Abbès Laghrour de Khenchela, BP 1252 Route de Batna, 40004 Khenchela, Algérie

\* email : guenouche\_mourad@umc.edu.dz

#### **Résumé**

Nous étudions l'effet de lentille gravitationnelle fort causé par une distribution de masse à symétrie sphérique dans le cadre de la solution d'Einstein-Straus avec une constante cosmologique positive et nous nous concentrons sur le cas d'un Univers spatialement fermé ( $k = +1$ ). Nous développons une méthode basée sur l'intégration d'équations différentielles afin de rendre possible le calcul de la déflexion de la lumière et du temps de retard. En appliquant nos résultats au système lentille quasar Sloan Digital Sky Survey (SDSS) J1004+4112, nous constatons que la déviation de la lumière et le temps de retard dépendent du facteur d'échelle actuel  $a_0$  au-dessous d'une valeur limite proche de  $9.1 \cdot 10^{26}$  m. Au-dessus de cette valeur, les résultats coïncident parfaitement avec ceux du modèle d'Einstein-Straus plat. De plus, il s'avère qu'une constante cosmologique positive atténue la déviation de la lumière en accord avec l'affirmation de Rindler et Ishak.

**Mots clés:** Paramètres cosmologiques, effet de lentille gravitationnelle fort.



# 3ème Congrès International de Physique et de Chimie Quantique (CIPCCQ 2019)

Université de Béjaïa, du 04 au 06 Novembre 2019

## Thèmes

- A- Plasma et Lasers.
- B- Photonique et Phononique.
- C- Nanomatériaux : Propriétés et Applications.
- D- Chimie Quantique.
- E- Théorie de l'Information Quantique et Technologies Quantiques.
- F- Physique Mathématique et Cosmologie.

