

**Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou  
Laboratoire de Physique et Chimie Quantique**



# RECUEIL DES RESUMES

***2<sup>ème</sup> Congrès de Physique et Chimie Quantique***



***12<sup>ème</sup> Journées de Chimie Théorique et Computationnelle JCTC12***



**Tizi-Ouzou 27 -30 mars 2017**

Le deuxième Congrès de Physique et Chimie Quantique CPCQ2017 et les douzièmes Journées de Chimie Théorique et Computationnelle JCTC12, prévus du 28 au 30 mars 2017 à l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, ont pour objectifs de :

- permettre aux jeunes chercheurs de présenter leurs derniers travaux de recherche,
- leur offrir l'occasion de débattre et d'échanger avec des experts scientifiques de haut niveau,
- promouvoir et renforcer les échanges scientifiques au sein de cette communauté.

Nous prévoyons, dans le cadre de cette manifestation scientifique, l'accueil de 200 participants avec un programme riche et varié, qui couvrira différents thèmes:

#### CPCQ17

- A. Plasmas et Lasers.*
- B. Photonique et Phononique.*
- C. Propriétés magnétiques et électroniques.*
- D. Elaboration, caractérisation, applications.*
- E. Physico-chimie des solides*

#### JCTC12

- A. Méthodes de la chimie quantique.*
- B. Systèmes moléculaires: Structure électronique, Réactivité, Spectroscopies, Catalyse.*
- C. Macromolécules, QM/MM, Simulation Monte Carlo et dynamique moléculaire.*

Ainsi, sont prévues au cours de ces journées, 12 conférences Invitées, 29 Communications Orales (dont 02 'longues') et 165 communications par affiches (Posters), qui traiteront de tous les aspects de la physique et de la chimie théorique ainsi que de leurs applications technologiques éventuelles.

### **En marge du congrès**

Le Dr Ivan LABAYE, de l'université du Maine (France), animera un Workshop durant le congrès sur la parallélisation des codes de calculs, illustrée par des exemples de calculs en C++ effectués sur le cluster ASELKAM de l'UMMTO.

Le workshop est programmé le 27 mars à 13h30 (salle de télé-enseignement-Service des Réseaux-2ème étage de la faculté des Sciences Economiques) pour 40 participants.

Le workshop consiste en :

- Une séance de cours (1h30) en séance plénière (Auditorium) qui sera ouverte à tous les participants.
- Une séance Atelier ouverte uniquement aux 40 participants retenus pour le Workshop.

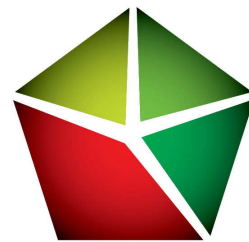
### **Remerciements**

Nous remercions très sincèrement les autorités universitaires pour les moyens mis à notre disposition et la Société Algérienne d'Optique et de Photonique (SAOP) pour sa collaboration dans l'organisation de cet événement. Nous adressons également nos vifs remerciements aux différentes institutions publiques et privées qui ont apporté leur contribution financière pour la concrétisation de cette manifestation.

Enfin, le Comité d'organisation souhaite la bienvenue à tous les participants et espère une totale réussite à ces journées scientifiques.

*Le Comité d'Organisation CPCQ2017 - JCTC12*

## NOS SPONSORS



## Comité d'Honneur

Pr AOURAG Hafid, DGRSDT

Pr TESSA Ahmed, Recteur de l'UMMTO

## Comité Scientifique

Aourag	Hafid	(U. Tlemcen)	Lamrous	Omar	(UMMTO)
Belabbas	Imad	(U. Bejaia)	Lounis	Samir	(FZ Jülich)
Belaidi	Salah	(U. Biskra)	Mahtout	Sofiane	(U. Béjaia)
Belkhir	Abderrahmane	(UMMTO)	Meghezzi	Hacène	(USTHB)
Belkhiri	Lotfi	(U. Constantine)	Megchiche	El Hocine	(UMMTO)
Benakki	Mouloud	(UMMTO)	Mekelleche	Sidi Mohamed	(U. Tlemcen)
Benbrahim	Nassima	(UMMTO)	Ouahrani	Tarik	(U. Tlemcen)
Bouarab	Said	(UMMTO)	Ouamerali	Ourida	(USTHB)
Boucekkine	Abdou	(U. Rennes 1)	Saillard	Jean-Yves	(U. Rennes 1)
Bouhafs	Bachir	(SidiBelAbbes)	Tchouar	Noureddine	(USTO)
Bourahla	Boualem	(UMMTO)	Touam	Tahar	(U. Annaba)
Brahimi	Meziane	(USTHB)	Tribeche	Mouloud	(USTHB)
Demagh	Nacereddine	(U. Sétif)	Zemirli	Mourad	(UMMTO)
Guittoum	Abderrahim	(CRNA)	Zenia	Hend	(U. Béjaia)
Halit	Mohamed	(U. Laghouat)	Ziane	Omar	(USTHB)
Hamadou	Lamia	(UMMTO)	Zouchoune	Bachir	(U. OUM El
Hammoutène	Dalila	(USTHB)			

## Comité d'organisation

Hamidi Mahdi (Président CPCQ 2017)

El Kechai Aziz (Président JCTC12)

## Membres

Amar	Anissa	Hammoutène	Dalila
Amitouche	Fadila	Haddadou	Atika
Ammi	Dahbia	Kermoun	Fatma
Belkhir	Abderrahmane	Klaleche	Lynda
Benakki	Mouloud	Lamrous	Omar
Bouarab	Said	Megchiche	El Hocine
Boucherrab	Malika	Messad	Leila
Bourahla	Boualem	Mezeghrane	Abdelaziz
Bouzar	Hamid	Nafa	Ouahiba
Chadli	Rabah	Saad	Farida
Cheballah	Yamina	Saal	Amar
Deghiche	Djamel	Tazibt	Slimane
Djouder	Madjid	Zemirli	Mourad



# Sommaire

## Conférences Plénières

<b>CI1</b>	HOW THE MATERIALS GENOME PROJECT CAN BOOST MATERIALS INNOVATION?	<b>11</b>
<b>CI2</b>	MODELISATION EN METHODE DFT DE NANOCLUSTERS DE METAUX DU GROUPE 11 STABILISES PAR DES LIGANDS.	<b>11</b>
<b>CI3</b>	IMPORTANCE DES LIAISONS HYDROGENE DANS L'ETUDE QUANTIQUE DE LA SOLVATATION DU PROTON	<b>12</b>
<b>CI4</b>	LA NANO-OPTIQUE A FEMTO-ST : RECENTES AVANCEES.	<b>13</b>
<b>CI5</b>	THEORETICAL INVESTIGATION OF CYCLOADDITION REACTIONS: MECHANISM, SELECTIVITIES, SOLVENT AND CATALYST EFFECTS.	<b>14</b>
<b>CI6</b>	CRISTAUX PHOTONIQUES ET METAMATERIAUX ACOUSTIQUES: D'UNE HISTOIRE RICHE A UN AVENIR PROMETTEUR.	<b>15</b>
<b>CI7</b>	ERREUR DE SELF-INTERACTION DANS LES CALCULS DFT: ORIGINE, IMPORTANCE DANS LES CALCULS D'ANIONS MONOATOMIQUES, REPERCUSSIONS SUR CERTAINS PROFILS DE REACTION: CORRECTION PROPOSÉE.	<b>16</b>
<b>CI8</b>	LA DYNAMIQUE INTERNE DES PROTEINES; LE CAS DES PROTEINES FLUORESCENTES.	<b>17</b>
<b>CI9</b>	DFT STUDIES OF LINEAR AND NON LINEAR OPTICAL PROPERTIES OF TRANSITION METAL COMPLEXES	<b>18</b>
<b>CI10</b>	MICROSTRUCTURES ET PROPRIETES MECANIQUES DES NANOVERRES METALLIQUES	<b>19</b>
<b>CI11</b>	LES METHODES DE LA CHIMIE QUANTIQUE. APPLICATIONS ET AMERTUME DE NE PAS POUVOIR FINALISER LE TRAVAIL EXPERIMENTALEMENT	<b>20</b>
<b>CI12</b>	SINGLE MAGNETIC SKYRMIONS FROM FIRST-PRINCIPLES: FROM PINNING EFFECTS TO ELECTRICAL AND X-RAY READING.	<b>21</b>

## Communications Orales (CPCQ 2017)

<b>COL</b>	STRUCTURE ELECTRONIQUE DES DISLOCATIONS DANS LE NITRURE DE GALLIUM.	<b>27</b>
<b>CO1</b>	PREPARATION, STRUCTURAL AND OPTICAL CHARACTERIZATION OF NaCl SINGLE CRYSTAL DOPED WITH CdSe NANOCRYSTALS.	<b>28</b>
<b>CO2</b>	TURBULENT EJECTION AND COOLING OF STAINLESSSTEEL FILM DURING LASER CUTTING PROCESS.	<b>30</b>
<b>CO3</b>	EXPERIMENTAL MEASUREMENT OF THE PASCHEN CURVE IN A XENON-NEON MIXTURE.	<b>31</b>
<b>CO4</b>	REFORMULATION DES GRANDEURS THERMODYNAMIQUES DU CORPS NOIR DANS LE CADRE DE LA K-STATISTIQUE DE KANIADAKIS.	<b>32</b>
<b>CO5</b>	SOURCE PLASMA MICRO-ONDE COAXIALE APPLIQUEE A LA DECONTAMINATION DES EPICES.	<b>34</b>
<b>CO6</b>	ANALYSE DES SIGNAUX DE PHOTO-DETACHEMENT POUR LE DIAGNOSTIC DES PLASMAS ELECTRONEGATIFS.	<b>35</b>
<b>CO7</b>	SYNTHESE, PROPRIETES STRUCTURALES ET MICROSTRUCTURALES DES NANOSTRUCTURES DE CONI ELABOREES PAR VOIE HYDROTHERMALE.	<b>36</b>

<b>CO8</b>	FIRST-PRINCIPALES STUDY OF THE STRUCTURAL, VIBRATIONA, PHONON AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE COMPLEX $K_2PtCl_6$ STRUCTURE HYDRIDES $Ca_2OsH_6$ .	<b>37</b>
<b>CO9</b>	SYNTHESE, PROPRIETES STRUCTURALES, MICROSTRUCTURALES ET MAGNETIQUES DES NANOSTRUCTURES HIERARCHIQUESDE $Ni_75Fe_{25}$ ELABOREES PAR VOIE HYDROTHERMALE.	<b>39</b>
<b>CO10</b>	PROPRIETES STRUCTURALES ET MAGNETIQUES DE NANOCOMPOSITES $Co/SiO_2$ .	<b>40</b>
<b>CO11</b>	AMÉLIORATION DE LA PHOTOACTIVITÉ DES NANOTUBES DE $TiO_2$ DANS LE VISIBLE PAR INTRODUCTION D'ÉTATS DE SURFACE ( $Ti^{3+}$ ).	<b>41</b>
<b>CO12</b>	LA DEGRADATION PHOTOCATALYTIQUE DES POLLUANTS ORGANIQUES PAR LES NANOMATERIAUX A BASE D'OR.	<b>42</b>
<b>CO13</b>	DIRECT GROWTH OF $VO_2$ NANOPATELETS ON GLASS AND SILICON BY PULSED LASER DEPOSITION TECHNIQUE.	<b>44</b>
<b>CO14</b>	$ZnO/P-Si$ HETEROJUNCTION SOLAR CELLS, EXPERIMENTS AND SIMULATIONS.	<b>45</b>

### Communications Posters (CPCQ)

<b>CP-01</b>	SPECTROSCOPIC PROPERTIES AND JUDD-OFELT INTENSITY PARAMETERS OF $Er^{3+}$ DOPED OXYFLUORO-TELLURITE GLASSES.	<b>49</b>
<b>CP-02</b>	EFFET DE LA CONFIGURATION À CŒUR EXCITÉ $5P^54F^35D$ SUR LA RÉDUCTION DES PROBABILITÉS DE TRANSITION DU FAISCEAU $5P^64F^3-5P^64F^25D$ DANS LE CAS DU ND IV.	<b>50</b>
<b>CP-03</b>	ETUDE PAR SIMULATION DES DIODES ELECTROLUMINESCENTES À BASE DE NITRURE D'INDIUM DE GALLIUM (INGAN) POUR ECLAIRAGE.	<b>52</b>
<b>CP-04</b>	EFFECT OF AN ADSORBED ATOMIC CHAIN ON THE DYNAMIC PROPERTIES OF AN HEXAGONAL STRUCTURE.	<b>53</b>
<b>CP-05</b>	MESURE ET ANALYSE D'UNE COURBE DE DIFFRACTION D'UNE FIBRE OPTIQUE DANS L'APPROXIMATION FRAUNHOFER.	<b>54</b>
<b>CP-06</b>	SPECTRES DE VIBRATION AUX VOISINAGE D'UNE INTERFACE RELIANT DEUX MÉTAUX NOBLES.	<b>56</b>
<b>CP-07</b>	IMPLÉMENTATION DE LA PSTD POUR DES APPLICATIONS EN PHOTONIQUE.	<b>57</b>
<b>CP-08</b>	MESURE DES PARAMETRES DES SURFACES OPTIQUES EN ANALYSANT LE FRONT D'ONDE PAR VOIE INTERFEROMETRIQUE.	<b>58</b>
<b>CP-09</b>	GAUSSIAN LASER BEAMS AND THEIR INTERFERENCES TO IMPROVE RESOLUTION IN MICROSCOPY.	<b>59</b>
<b>CP-10</b>	PROPRIETES THERMODYNAMIQUES DU SYSTÈME DE SURFACE ALLIAGE MÉTALLIQUE ORDONNÉE $Au(110)$ - $1X2$ - $Pd$ .	<b>60</b>
<b>CP-11</b>	INFLUENCE DE LA MASSE ATOMIQUE ET DES CONSTANTES ÉLASTIQUES SUR LE TRANSPORT DE PHONONS VIA UNE INTERFACE MÉTALLIQUE DANS DES STRUCTURES CFC[110].	<b>61</b>
<b>CP-12</b>	CALCUL DES ÉTATS LOCALISÉS AU VOISINAGE DE DEUX INTERFACES MÉTALLIQUES $Au/Pd(110)$ ET $Cu/Pt(110)$ .	<b>62</b>
<b>CP-13</b>	MODELISATION DES STRUCTURES PERIODIQUES METALLO-DIELECTRIQUES POUR EXCITER LES RESONANCES DE FANO.	<b>63</b>
<b>CP-14</b>	PROPRIÉTÉS PHYSICOCHIMIQUES ET STRUCTURALES DU REVETEMENT $MnZn$ ÉLABORÉ PAR VOIE ÉLECTROCHIMIQUE.	<b>64</b>
<b>CP-15</b>	NANOCATALYST $Cu-Zn-La/SiO_2$ , SYNTHESIS-CHARACTERIZATION-APPLICATION IN THE CATALYTIC HYDROGENATION OF $CO_2$ .	<b>65</b>
<b>CP-16</b>	STUDY THE EFFECT OF THE SOLUTION MOLARITY ON THE STRUCTURAL PROPERTIES OF $NiO$ THIN FILM.	<b>66</b>
<b>CP-17</b>	COMPORTEMENT D'UNE COUCHE DE $TiO_2$ DEPOSEE SUR ACIER INOXYDABLE 316L DANS UN MILIEU PHYSIOLOGIQUE. BIOMATERIAUX.	<b>67</b>
<b>CP-18</b>	SYNTHÈSE ET CARACTERISATION DES CATALYSEUR A BASE DE COBALT. REACTIVITE EN REFORMAGE SEC DU METHANE.	<b>68</b>
<b>CP-19</b>	DEPOT DE NANOSTRUCTURE D'OXYDE DE ZINC SUR LES NANOFILS DE SILICIUM PAR VOIE HYDROTHERMALE ; APPLICATION EN PHOTODIODE.	<b>69</b>

<b>CP-20</b>	ELABORATION ET CARACTERISATION STRUCTURALE ET OPTIQUE DE POINTS QUANTIQUES DE ZnS DOPES AU CUIVRE ET DISPENSES DANS LA SILICE SOL-GEL.	<b>70</b>
<b>CP-21</b>	ELABORATION AND CHARACTERIZATION OF THE SPINEL OXIDE $\text{Ni}_{0.3}\text{CO}_{2.7}\text{O}_4$ NANOPARTICLES FOR $\text{O}_2$ REDUCTION ELECTOCATALYSIS.	<b>71</b>
<b>CP-22</b>	INDIUM DOPED ZnO LAYERS PRODUCED BY SPRAY PYROLYSIS ROUTE.	<b>73</b>
<b>CP-23</b>	ELABORATION AND CHARACTERISATION OF ZINC TITANIUM Oxide (TZO) THIN FILMS GROWN BY DC MAGNETRON SPUTTERING.	<b>74</b>
<b>CP-24</b>	MECANISME DE NUCLEATION ET DE CROISSANCE ELECTROCHIMIQUE DU MANGANESE SUR UN SUBSTRAT DE CUIVRE.	<b>75</b>
<b>CP-25</b>	SYNTHESIS OF ZINC OXIDE NANOSTRUCTURES ON GaAs BY CHEMICAL BATH DEPOSITION (CBD).	<b>76</b>
<b>CP-26</b>	EFFECT OF POTENTIAL ON THE PROPERTIES OF ELECTRODEPOSITED $\text{SnO}_2$ THIN FILM.	<b>77</b>
<b>CP-27</b>	INFLUENCE DU BROUAGE A HAUTE ENERGIE SOUS ATMOSPHERE D'AZOTE SUR LA STRUCTURE D'UN MATERIAU A BASE DE Ni-Al.	<b>77</b>
<b>CP-28</b>	INFLUENCE DE LA DUREE DU TRAITEMENT HYDROTHERMALE SUR LA FORMATION DES NANO-BATONNETS D'OXYDE DE VANADIUM.	<b>78</b>
<b>CP-29</b>	PHOTO-DEGRADATION DE RHODAMINE B EN PRESENCE DE 5 % PdO/ZnO PREPARE PAR LA METHODE CO-PRECIPITATION.	<b>80</b>
<b>CP-30</b>	MODELISATION ET SIMULATION DE LA CONDUCTION ELECTRIQUE DANS LE PDMS NANOCOMPOSITES.	<b>81</b>
<b>CP-31</b>	PENTE DE TRANSITION DE PHASE DES COUCHES NANOMETRIQUES D'OXYDE DE VANADIUM ( $\text{VO}_2$ ).	<b>82</b>
<b>CP-32</b>	SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF COBALT FERRITE NANOPARTICLES BY HYDROTHERMAL METHOD.	<b>83</b>
<b>CP-33</b>	ELECTROCHEMICAL DEPOSITION AND CHARACTERIZATION OF $\text{Cu}_2\text{O}$ NANOSTRUCTURES ON FTO SUBSTRATE.	<b>85</b>
<b>CP-34</b>	MORPHOLOGICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF ZnO/CdS CORE-SHELL USED AS LIGHT HARVESTER.	<b>86</b>
<b>CP-35</b>	ELABORATION AND CHARACTERISATION OF Si /PBT AND ITO /PBT COMPOSITE FILMS.	<b>87</b>
<b>CP-36</b>	STRUCTURAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF CRYSTALLINE $\text{Ni}_{70}\text{Co}_{30}$ ALLOY PREPARED BY MECHANICAL MILLING.	<b>88</b>
<b>CP-37</b>	DETERMINATION OF THE DOPING DENSITY OF ZINC OXIDE NANOPARTICLES BY THE ELECTROCHEMICAL TECHNIQUE.	<b>89</b>
<b>CP-38</b>	ELECTRODEPOSITION DE L'ALLIAGE $\text{CO}_{50}\text{FE}_{50}$ : COUCHES MINCES ET NANOFILS.	<b>90</b>
<b>CP-39</b>	ELABORATION ET CARACTERISATION DES NANOCOMPOSITES.	<b>91</b>
<b>CP-40</b>	PROPRIETES OPTIQUES ET STRUCTURALES DES NANOPARTICULES D' $\text{Ag}_2\text{S}$ .	<b>93</b>
<b>CP-41</b>	SUPERCAPACITANCE PERFORMANCE OF HEMATITE $\text{Fe}_2\text{O}_3$ NANOPARTICLES USING POLYOL PROCESS.	<b>94</b>
<b>CP-42</b>	ETUDE EXPERIMENTALE ET THEORIQUE D'UNE LAMPE A KRYPTON PURE EXCITEE PAR DECHARGE A BARRIERES DIELECTRIQUES.	<b>95</b>
<b>CP-43</b>	EFFECT OF APPLIED VOLTAGE IN DIELECTRIC BARRIER DISCHARGE FOR THE CONTROL OF THE RADIATED ULTRAVIOLET EFFICIENCY.	<b>96</b>
<b>CP-44</b>	DIFFUSION IN QUASI-ONE-DIMENSIONAL STRONGLY COUPLED SYSTEM ON A QUASI-PERIODIC SUBSTRATE.	<b>98</b>
<b>CP-45</b>	EFFETS DE LA CONCENTRATION Bi SUR L'OPTIMISATION D'UN LASER A DOUBLE CAVITES PASSIVEMENT Q-DECLENCHE DOPÉ Yb: Bi.	<b>99</b>
<b>CP-46</b>	SOME CHARACTERISTICS OF THE DECONFINEMENT PHASE TRANSITION IN A FINITE VOLUME FROM THE ORDER PARAMETER AND ITS DERIVATIVES.	<b>100</b>
<b>CP-47</b>	MOBILITE DES IONS $\text{N}^+$ DANS UN GAZ D'HELIUM PAR TRAITEMENT QUANTIQUE DES SECTIONS EFFICACES.	<b>101</b>
<b>CP-48</b>	ÉTUDE DE L'ÉVOLUTION SPATIALE ET TEMPORELLE D'UNE LAMPE PLASMA DE DÉCHARGE À BARRIÈRE DIÉLECTRIQUE (Xe-Ne).	<b>102</b>
<b>CP-49</b>	EFFET D'UNE CIBLE ERODEE SUR LES PROPRIETES DES COUCHES MINCES DEPOSEES PAR PULVERISATION MAGNETRON.	<b>103</b>

<b>CP-50</b>	ETUDE DE L'ÉMISSION DE LA MOLÉCULE C <sub>2</sub> DANS UN PLASMA DE CARBONE INDUIT PAR LASER SOUS AMBIANCE DE MÉTHANE.	<b>104</b>
<b>CP-51</b>	THEORETICAL STUDY ON THE CHEMICAL REACTIVITY IN THE ARMCHAIR SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBE.	<b>105</b>
<b>CP-52</b>	AB-INITIO STUDY OF THE SiF MOLECULE ADSORPTION ON Si(001) SURFACE.	<b>106</b>
<b>CP-53</b>	STRUCTURAL, ELECTRONIC AND ELASTIC PROPERTIES OF FULL-HEUSLER ALLOYS Cs <sub>2</sub> Vge.	<b>107</b>
<b>CP-54</b>	ETUDE AB-INITIO DE LA DOUBLE PEROVSKITE Ba <sub>2</sub> MnReO <sub>6</sub> .	<b>108</b>
<b>CP-55</b>	SIMULATION AB INITIO DES PROPRIETES PHYSIQUE DES CLUSTERS DE FeTi <sub>n</sub> (n=1-10).	<b>109</b>
<b>CP-56</b>	IMPACT OF ANTI-SITE DEFECT ON ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF THE FePt THIN FILMS.	<b>110</b>
<b>CP-57</b>	EFFECTS OF LITHIUM INTERCALATION ON STRUCTURAL, ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF WO <sub>3</sub> : A FIRST PRINCIPLES INVESTIGATION	<b>110</b>
<b>CP-58</b>	DOPING CR <sub>n</sub> (n=2-6) NANOPARTICLES WITH AN S IMPURITY. IMPACT ON THE STRUCTURAL, ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES.	<b>112</b>
<b>CP-59</b>	SPIN-FLIP TRANSITIONS INDUCED BY TIME-DEPENDENT ELECTRIC FIELDS IN TUNED TRANSITION METAL DICHALCOGENIDES MAGNETIC THIN FILMS.	<b>113</b>
<b>CP-60</b>	STUDY OF ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF CoRhMnSn HEUSLER COMPOUND.	<b>114</b>
<b>CP-61</b>	INFLUENCE OF THE SINGLE IRON ANISOTROPY FIELD AND THE DZYALOSHINSKII-MORIYA TERM ON BULK AND SURFACE SPIN FLUCTUATIONS DYNAMICS IN TRIFLUORIDES MF <sub>3</sub> (M= Fe, Cr).	<b>115</b>
<b>CP-62</b>	ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF COBALT DOPED ARSENIC CLUSTERS CoAs <sub>n</sub> (n=15-24).	<b>115</b>
<b>CP-63</b>	ETUDE D'ONDE DE SPINS AU VOISINAGE D'UNE INTERFACE DU TYPE Fe(110)/Ni(110).	<b>117</b>
<b>CP-64</b>	ETUDE AB INITIO DES PROPRIETES STRUCTURALES, ELECTRONIQUES ET OPTIQUES DU SYSTEME Li <sub>2</sub> Te.	<b>118</b>
<b>CP-65</b>	DENSITY FUNCTIONAL STUDY OF THE STRUCTURES AND ELECTRONIC PROPERTIES OF SULFUR-DOPED Mo <sub>n</sub> S CLUSTERS, n=1-10.	<b>119</b>
<b>CP-66</b>	THE ELECTROCHEMICAL BEHAVIOUR OF ALUMINIUM ALLOY IN CHLORIDE SOLUTION IN THE PRESENCE OF INORGANIC ADDITIVES AS CORROSION INHIBITORS.	<b>120</b>
<b>CP-67</b>	ÉTUDE PHYSICO-CHIMIQUE DE L'ADSORPTION DES IONS METALLIQUES PAR UNE ARGILE ACTIVEE.	<b>121</b>
<b>CP-68</b>	ETUDE PAR DFT DE LA CALCITE-VI SOUS PRESSION.	<b>122</b>
<b>CP-69</b>	ELECTROSYNTHESE ET CARACTERISATION DE COUCHES MINCES D'OXYDE DE CERIUM (CeO <sub>2</sub> )	<b>123</b>
<b>CP-70</b>	THE AB INITIO STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF THE FULL-HEUSLER COMPOUNDS X-N (X = Rb,K AND Cs) USING THE LOCAL SPIN DENSITY APPROXIMATION (LSDA) AND THE MODIFIED BECKE-JOHNSON (MBJ) POTENTIAL.	<b>124</b>
<b>CP-71</b>	ETUDE DES PROPRIETES MAGNETIQUES DE ZnSiAs <sub>2</sub> DOPE PAR LES METAUX DE TRANSITION.	<b>125</b>
<b>CP-72</b>	ETUDE PAR SIMULATION ATOMISTIQUE DE L'IKAITÉ.	<b>126</b>
<b>CP-73</b>	SYNTHESIS OF AN IONIC LIQUID & APPLICATION IN THE EXTRACTION OF CHROMIUM.	<b>127</b>
<b>CP-74</b>	THERMAL STUDY OF PHOTO-POLYMERIZATION REACTION IN POLYACRYLATE/LIQUID CRYSTAL BLENDS.	<b>128</b>
<b>CP-75</b>	ETUDE AB INITIO DE L'EFFET DE TEMPERATURE HYDROSTATIQUE SUR UN COMPOSE CRISTALLIN : Sr <sub>2</sub> YTaO <sub>6</sub>	<b>129</b>
<b>CP-76</b>	SYNTHESIS BY SOL GEL AND CHARACTERIZATION OF ZnCO <sub>2</sub> O <sub>4</sub> PYRAMIDAL MICROCRYSTALS AS A HIGH PERFORMANCE PSUEDOCAPACITOR ELECTRODE	<b>129</b>
<b>CP-77</b>	EFFECT OF SINTERING TIME ON THE MICROSTRUCTURE, DENSITY, AND POROSITY OF CHROMIUM FERRITE.	<b>130</b>
<b>CP-78</b>	ELABORATION DE L'ANODE AlZnSnMg POUR LA PROTECTION CATHODIQUE DE L'ACIER DANS L'EAU DE MER.	<b>132</b>

<b>CP-79</b>	STUDIES OF TEMPERATURE-DEPENDENT BEHAVIOR AND CRYSTALLIZATION KINETICS OF (CO <sub>58</sub> Fe <sub>32</sub> Ta <sub>10</sub> ) <sub>80</sub> B <sub>20</sub> SOFT MAGNETIC METALLIC GLASS BY ELECTRONIC AND CALORIMETRIC MEASUREMENTS.	<b>133</b>
--------------	---	------------

### Communications Orales (JCTC12)

<b>COL</b>	FIRST-PRINCIPLE CALCULATIONS OF H <sub>2</sub> MOLECULE INSIDE BORON-NITROGEN NANOTUBES.	<b>139</b>
<b>CO-01</b>	ETUDE THEORIQUE DE LA COMPLEXATION DE N-BENZOYL-β-PHENYLISOSERINE PAR L'EXCES DU Ca <sup>2+</sup> PRESENT DANS LA CELLULE.	<b>141</b>
<b>CO-02</b>	ACIDITIES OF HYDROCARBONS AND NITROGEN-CONTAINING HETEROCYCLES IN DMSO: A THEORETICAL INVESTIGATION.	<b>142</b>
<b>CO-03</b>	ETUDE THÉORIQUE DES PROPRIETES STRUCTURALES ET ANTIOXYDANTE DE LA CURCUMINE.	<b>143</b>
<b>CO-04</b>	ETUDE THEORIQUE ET EXPERIMENTALE DE MOLECULES D'INTERET ASTROCHIMIQUE.	<b>144</b>
<b>CO-05</b>	THEORETICAL SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION OF ETHYLENE GLYCOL AT LOW TEMPERATURES (HIGHLY CORRELATED AB INITIO CALCULATIONS AND VARIATIONAL PROCEDURE).	<b>145</b>
<b>CO-06</b>	ETUDE THEORIQUE DU MECANISME ET SELECTIVITE DE LA REACTION DE CYCLOADDITION [3+2] ENTRE L'YLURE D'AZOMETHINE ET LE NITROSTYRENE.	<b>146</b>
<b>CO-07</b>	STRUCTURAL, CHEMICAL REACTIVITY OPTICAL AND NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF Ln(Tp) <sub>2</sub> COMPLEXES: A DFT+TD-DFT STUDY	<b>147</b>
<b>CO-08</b>	SOLVATATION DE Mg <sup>+</sup> DANS L'AMMONIAC ET EFFETS DE LA TEMPERATURE	<b>148</b>
<b>CO-09</b>	SIMULATION PAR DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE DU COMPORTEMENT INTERFACIAL DES FONDUS DE POLYMÈRES LINÉAIRES ET CYCLIQUES	<b>149</b>
<b>CO-10</b>	ENANTIOSELECTIVE REDUCTION OF PROCHIRAL KETONES PROMOTED BY AMINO AMIDE RUTHENIUM COMPLEXES: A DFT STUDY	<b>150</b>
<b>CO-11</b>	SUBSTITUENT EFFECT ON THE INTRAMOLECULAR AREN/ALLENE DIELS-ALDER REACTION: sEDA AND pEDA DESCRIPTORS.	<b>151</b>
<b>CO-12</b>	THEORETICAL STUDY OF ATMOSPHERIC REACTION OF OXYGEN ATOM O( <sup>3</sup> P) WITH TRICHLOROETHYLENE. O-ADDITION AND H-ABSTRACTION.	<b>152</b>
<b>CO-13</b>	MAGNETIC PROPERTIES OF DIOXO-BRIDGED DIURANIUM COMPLEXES WITH DIAMOND-CORE STRUCTURAL MOTIFS : A RELATIVISTIC DFT STUDY.	<b>153</b>

### Communications Posters (JCTC12)

<b>CP-01</b>	ETUDE THEORIQUE DE LA REACTIVITE DE NOUVELLES MOLECULES HETEROCYCLIQUES DERIVANT DES BENZIMIDAZOLONES.	157
<b>CP-02</b>	PREDICTION OF THE RP-HPLC RETENTION OF O-METHOXYPHENOL BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY MODEL.	158
<b>CP-03</b>	DENSITY FUNCTIONAL THEORY MODEL FOR THE PREDICTION OF THE ADSORPTION CENTERS OF ORGANIC CORROSION INHIBITORS WITHIN ACIDIC MEDIUM.	159
<b>CP-04</b>	SYNTHÈSE, CARACTÉRISATION ET OPTIMISATION STRUCTURELLE À L'AIDE DE LA DFT DE CERTAINES BASES DE SCHIFF BENZOAZOLINONIQUE DÉRIVÉES DE SALICYLALDÉHYDE.	160
<b>CP-05</b>	DETERMINATION STRUCTURALE ET ETUDE THEORIQUE DES COMPOSES HYBRIDES RICHE EN LIAISON HYDROGENE.	161
<b>CP-06</b>	ETUDE DE L'EFFET JAHN-TELLER MULTIMODE DANS LES HETEROPOLYANIONS DE TYPE ANDERSON.	162
<b>CP-07</b>	ETUDE PAR DES METHODES QSAR DE PHENOTHIAZINE ANTIPSICHIQUES	163
<b>CP-08</b>	ETUDE DFT ET TD-DFT DES PROPRIETES SPECTROSCOPIQUES ET D'OPTIQUE NON LINEAIRE DE COMPOSES A CŒUR ISOCYANURATE.	164
<b>CP-09</b>	THE ASM-EDA MODEL FOR RESOLVE THE AMBIGUOUS ENDO SELECTIVITY IN THE DIELS-ALDER REACTIONS.	165
<b>CP-10</b>	PROPRIETES ENERGETIQUES ET TRANSFERT DE CHARGE DANS DES COMPOSES	166

	ORGANIQUES.	
CP-11	ETUDE PAR LA MODELISATION MOLECULAIRE DES PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES DES DERIVES DE 1,3,4-THIADIAZOLE.	167
CP-12	IN SILICO STUDY OF THE ANTIOXIDANT ACTIVITY OF 4-(5-CHLORO-2-HYDROXY-PHENYLAMINO)-4-OXOBUT-2-ENOIC ACID DERIVATIVES.	168
CP-13	LUMINESCENT CYCLOMETALLATED ALKYNYL GOLD(III) COMPLEXES. A DFT STUDY.	169
CP-14	DETERMINATION DES PROPRIÉTÉS STRUCTURALES DU COMPOSE ORGANIQUE: ETUDE DFT.	170
CP-15	IN SILICO ANALYSIS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITIES OF A SERIES OF SULFADRUQS AND THE N-[P-FLUOROPHENYL] N'- SULFAMOYL PERHYDROOXAZINONE].	171
CP-16	DFT AND TDDFT STUDY OF PHOTOCROMIC PROPERTIES OF DTE PLATINUM COMPLEXES DERIVATIVES.	172
CP-17	ETUDE THEORIQUE DE L'EFFET DE LA CONJUGAISON SUR LA STRUCTURE ET LES PROPRIETES SPECTRALES DU COLORANT SENSIBILISATEUR N3 A BASE DE SELENOPHENE.	173
CP-18	STUDY OF PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF THE I-C <sub>4</sub> H and c-C <sub>4</sub> H IN THE INTERSTELLAR ENVIRONMENT.	174
CP-19	STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF CsPbX <sub>3</sub> AND CsSnX <sub>3</sub> (X: Cl, Br, I): FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS.	175
CP-20	DFT STUDIES OF A NEW TERNARY RUTHENIUM (III) COMPLEX WITH 1, 3 BIS (SALICYLIDENEAMINO) PROPAN-2-OL AND 3-PICOLYLAMINE.	176
CP-21	TD-DFT CALCULATIONS AND NBO ANALYSIS OF CTC BASED ON SUBSTITUTED IMINES WITH $\pi$ -ELECTRON ACCEPTORS.	177
CP-22	SPECTROPHOTOMETRIC DETERMINATION OF KINETIC CONSTANTS OF Fe (III)-AMINES'S CHARGE TRANSFER COMPLEXES.	178
CP-23	THEORETICAL INSIGHTS INTO THE FORMATION OF ASPIRIN / $\beta$ -CYCLODEXTRIN INCLUSION COMPLEX.	180
CP-24	ETUDE DFT RELATIVISTE DES PROPRIETES MAGNETIQUES DE COMPLEXES BIMETALLIQUES DE L'URANIUM.	181
CP-25	ETUDE THEORIQUE DU MODE DE COORDINATION DES LIGANDS CHELATANTS DANS LES LANTHANIDES.	182
CP-26	ETUDE DFT RELATIVISTE DE LA SPECIATION LANTHANIDES(III)/ACTINIDES(III).	183
CP-27	ETUDE PAR MODELISATION MOLECULAIRE DU COMPLEXE D'INCLUSION ISOTHIOCYANATE DE BENZYLE AVEC LA $\beta$ -CYCLODEXTRINE.	184
CP-28	SPECTROSCOPIE INFRAROUGE ET RAMAN, STRUCTURE CRISTALLINE DU BIS(4-ACETYLPHENYL) SELENIDE: CONFRONTATION EXPERIENCE(DIFFRACTION RX)-THEORIE (DFT).	185
CP-29	DFT STUDIES OF COMPLEXES OF COPPER(II), MANGANESE(II), AND NICKEL(II) WITH DERIVED BENZOXAZOLE LIGANDS.	186
CP-30	THEORETICAL INVESTIGATION OF SQUARE PLANAR NICKEL (II) THIOSEMICARBAZONES COMPLEXES.	187
CP-31	RELAXED ENERGETIC MAPS OF SUCROSE: A AM1 STUDY.	188
CP-32	DFT STUDIES ON VIBRATIONAL SPECTRA, HOMO-LUMO AND NBO OF TETRODOTOXINE.	189
CP-33	ETUDE THÉORIQUE PAR LES MÉTHODES QUANTIQUES PM7 et ONIOM2 DU COMPLEXE D'INCLUSION N-NITROSO-N-(2-CHLOROETHYL)-N'-SULFAMOYLPROLinate/ $\beta$ -CD.	190
CP-34	THEORETICAL STUDY OF GEOMETRIC STRUCTURES AND ELECTRONIC ABSORPTION SPECTRA OF IRIIDIUM (III) COMPLEXES BASED ON 2-PHENYL-5-NITROPYRIDYL WITH DIFFERENT ANCILLARY LIGANDS.	191
CP-35	ETUDE THEORIQUE DES STRUCTURES, DES PROPRIETES ELECTRONIQUES ET DU SPECTRE D'ABSORPTION ELECTRONIQUE DU COMPLEXE DE CUIVRE AVEC DES LIGANDS TRIPODES : EFFETS DU COUPLAGE SPIN-ORbite	192
CP-36	ETUDE THEORIQUE DES SPECTRES D'ABSORPTION ELECTRONIQUE DES COMPLEXES DE PALLADIUM (II).	193



<b>CP-37</b>	ETUDE THEORIQUE EN PHASE GAZEUSE ET EN SOLVANT PAR LA METHODE D.F.T/B3LYP 6-31G DE LA REGIO ET STEREO-SELECTIVITE DE LA REACTION DE CYCLOADDITION INTERMOLECULAIRE [3+2].	<b>194</b>
<b>CP-38</b>	ANALYSE THEORIQUE DE LA REGIO-SELECTIVITE DE LA CYCLOADDITION DIPOLAIRE 1,3-DES NITRONES AVEC 3,3-METHYLENE-5,5-DIMETHYL 2-PYRROLIDINONE. UNE ETUDE BASEE SUR LES INDICES DE REACTIVITE DERIVES DE LA DFT CONCEPTUELLE	<b>195</b>
<b>CP-39</b>	ETUDE THEORIQUE DES COMPLEXES ORGANOMETALLIQUES [COT (M(CO) <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ] (M: Cr, Fe, Co) EN DFT/BP	<b>196</b>
<b>CP-40</b>	DENSITY FUNCTIONAL STUDY OF INCLUSION COMPLEX OF PYRAZINAMIDE/CUCURBIT[7]URIL: STRUCTURE, ELECTRONIC PROPERTIES, NBO, GIAO AND TD-DFT ANALYSIS	<b>197</b>
<b>CP-41</b>	EFFET DE LA STRUCTURE MOLECULAIRE SUR LES ENERGIES D INTERACTION DE DIMERES DE HAP.	<b>198</b>
<b>CP-42</b>	A THEORETICAL STUDY OF ANTIOXIDANT PROPERTIES OF SOME NEW 2-STYRYLCHROMONES.	<b>199</b>
<b>CP-43</b>	INTERACTION OF IOTA -CARRABIOSE WITH LITHIUM CATION, STUDIED BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY.	<b>200</b>
<b>CP-44</b>	ETUDE DFT DE LA STABILITE ET DE LA STRUCTURE DES TAUTOMERES DE 4-HYDROXY QUINAZOLINE.	<b>202</b>
<b>CP-45</b>	SYNTHESIS, EXPERIMENTAL AND THEORETICAL VIBRATIONAL STUDIES OF IMIDAZOLIUM AND PHOSPHONIUM BASED IONIC LIQUIDS, CASE OF THE HYDROGEN BONDING INTERACTIONS AND THEIR INFLUENCE ON THERMOPHYSICAL PROPERTIES.	<b>203</b>
<b>CP-46</b>	THE IONIC STRUCTURE AND THE SELF-DIFFUSION PROPERTIES OF LIQUID MERCURY.	<b>204</b>
<b>CP-47</b>	PERMEABILITE DES MOLECULES D'EAU DANS LA MEMBRANE PROTEIQUE (AQUAPORINE).	<b>206</b>
<b>CP-48</b>	ETUDE THEORIQUE DU COMPLEXE D'INCLUSION ISONIAZIDE/ $\beta$ -CYCLODEXTRINE.	<b>208</b>
<b>CP-49</b>	ETUDE EN THEORIE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITE DES PROPRIETES STRUCTURALES DU DURENE ET DE SES DERIVES.	<b>209</b>
<b>CP-50</b>	THREE DIMENSIONAL QUANTITATIVE STRUCTURE ACTIVITY RELATIONSHIPS OF EIGHTY-THREE FLAVONOÏDES DERIVATIVES BASED ON MOLECULAR INTERACTION FIELDS DESCRIPTORS.	<b>210</b>
<b>CP-51</b>	A THEORETICAL STUDY OF REGIO- AND STEREOSELECTIVITIES OF THE ASYMMETRIC DESYMMETRIZATION OF MESO-CYCLIC IMIDES COMPOUNDS WITH CHIRAL BORANE.	<b>211</b>
<b>CP-52</b>	ETUDE THEORIQUE DES PROPRIETES OPTIQUES LINEAIRES ET NON LINEAIRE (TPA) D'UNE SERIE DE CHROMOPHORES D'OLIGOTHIOPHENE.	<b>212</b>
<b>CP-53</b>	REACTION DE CYCLOADDITION AZOTURE-ALCYNE CATALYSEE PAR LES COMPLEXES TREN DE CUIVRE (I).	<b>213</b>
<b>CP-54</b>	L'APPROCHE DFT/ZORA/COSMO: OUTIL DE CHOIX POUR L'ETUDE DU COMPORTEMENT REDOX DES COMPLEXES ORGANOMETALLIQUES D'ACTINIDES.	<b>214</b>
<b>CP-55</b>	REDOX PROPERTIES OF A SERIES OF MIXED-SANDWICH URANIM (III) COMPLEXES. A RELATIVISTIC DFT INVESTIGATION.	<b>215</b>
<b>CP-56</b>	THEORETICAL STUDY OF SOME LOWEST ELECTRONIC STATES OF CsO.	<b>216</b>
<b>CP-57</b>	ADSORPTION MODEL FOR H <sub>2</sub> AND CO ON SINGLE CRYSTAL METAL SURFACE WITH MEAN FIELD THEORY AND (DFT) CALCULATION.	<b>217</b>
<b>CP-58</b>	ETUDE DE LA STRUCTURE ELECTRONIQUE DU COMPLEXE [(Cp*)(dppe)M-(C $\equiv$ C) <sub>n</sub> -M(dppe)(Cp*)] <sup>0/+2</sup> : M=Fe, Ru (n=2-6).	<b>218</b>
<b>CP-59</b>	BONDING INTERACTIONS IN GLDA COMPLEXES.	<b>219</b>
<b>CP-60</b>	THEORETICAL INVESTIGATION ON HOMOLEPTIC YTTRIUM TRI-GUANIDINATES.	<b>220</b>
<b>CP-61</b>	THEORETICAL STUDY OF THE GROUPMENT METHYL TRANSFER REACTION IN THE IMIDATES N-ACYLATED.	<b>221</b>
<b>CP-62</b>	CALCULS MONTE-CARLO CINETIQUE DES COEFFICIENTS DE DIFFUSION DES DEFAUTS PONCTUELS DANS LE NICKEL MASSIF.	<b>222</b>
<b>CP-63</b>	REDUCTION OF ALIPHATIC KETONES CATALYSED BY RU-PROLINE AMIDE: EXPERIMENTAL AND THEORETICAL APPROACH.	<b>223</b>
<b>CP-64</b>	ETUDE THEORIQUE DE LA REACTION D'ABSTRACTION D'ATOME D'HYDROGENE DU	<b>224</b>



	METHANOL.	
CP-65	ÉTUDE ONIOM ET DFT DES COMPLEXES D'INCLUSION DU FLURBIPROFENE AVEC LA $\beta$ -CYCLODEXTRINE.	225
CP-66	ETUDE QUANTITATIVE DES RELATIONS STRUCTURE-ACTIVITE(QSAR) DES DERIVES DE THIAZOLIDINE-2,4-DIONE.	226
CP-67	ETUDE THÉORIQUE DU DÉCLIN DE FLUORESCENCE DE LA YFP.	227
CP-68	ETUDE DFT DE LA STRUCTURE ELECTRONIQUE ET DES PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES DE COMPLEXES ORGANOMETALLIQUES D'ELEMENTS f.	228
CP-69	BINDING MODES STUDY BY MOLECULAR DOCKING AND DYNAMIC SIMULATIONS OF CURCUMIN AND ITS ANALOGUES	229
CP-70	PROFIL D'ABSORPTION DE RAIE DE LA VAPEUR DE CESIUM IMMERGE DANS UN BAIN DE GAZ D'HELIUM.	230
CP-71	ETUDE THEORIQUE DES FORMES OXYDEES ET REDUITES DES HETEROPLYANIONS $[\text{Cr}^{\text{III}}(\text{OH})_6\text{Mo}_{6-\text{N}}\text{W}_{\text{N}}\text{O}_{18}]^{3-}$ .	231
CP-72	ETUDE THEORIQUE DE L'INCLUSION DE LA TETRACAINE-HYDROCHLORIDE/BETACYCLODEXTRINE.	232
CP-73	SAR AND QSAR MODELING OF KINASE INHIBITORS ACTIVITIES OF PYRAZOLES DERIVATIVES.	233
CP-74	ANALYSE CONFORMATIONNELLE ET LA LIAISON D'HYDROGENE INTRAMOLECULAIRE DU CIS 1.2 INDANEDIOL.	235
CP-75	STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING AND DRUG-LIKE OF QUERCETIN DERIVATIVES WITH ANTI-MALARIA ACTIVITY .	236
CP-76	ETUDE THEORIQUE DU REARRANGEMENT DYOTROPIQUE DU CYCLOADDUIT D'HIMBERT.	238
CP-77	COORDINATION CHEMISTRY OF TRINUCLEAR $[\text{M}_3(\text{Tr})_2(\text{L})_3]^{2+}$ (M = Fe, Ni, Pd, Pt, Tr = TROPYLIUM AND L = CO, CNH AND C2H4) SANDWICH COMPOUNDS: THEORETICAL INVESTIGATION.	239
CP-78	APPROCHE THEORIQUE DE LA REACTIVITE CHIMIQUE DES HETEROCYCLES SUBSTITUES.	240
CP-79	ETUDE PAR DES METHODES QSAR DES DERIVES DE 1,2,5-THIADIAZOLE A L'AIDE DES DESCRIPTEURS MOLECULAIRES.	241
CP-80	ÉTUDE DES PROPRIETES ELECTRONIQUES ET QSAR DANS DES DERIVES DE PYRAZINE.	242
CP-81	STRUCTURAL, ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF IRON-DISULPHIDE $\text{Fe}_n\text{S}_2^{0/-+}$ n=1-6 CLUSTERS.	243
CP-82	ETUDE QUANTIQUE DE L'ACTIVITE ANTIOXYDANTE DE L'HYDROXYTYROSOL ET DE SON INTERACTION AVEC LA $\beta$ -CYCLODEXTRINE.	244
CP-83	COMPORTEMENT REDOX DE COMPLEXES TRIS(CYCLOPENTADIENYLE) D'URANIUM. ETUDE DFT/ZORA RELATIVISTE.	245
CP-84	ETUDE THEORIQUE DE COMPLEXES METALLIQUES DE REPAGLINIDE	246
CP-85	ETUDE DES COMPLEXES MONO-NUCLEAIRES DE METAUX DE TRANSITION DU LIGAND INDENYLE CYCLOPENTADIENYLE; STRUCTURE ELECTRONIQUE ET MODES DE COORDINATION	247
CP-86	FIRST PRINCIPLES STUDY OF THE STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF HfX (X= C, N, B)	248

---

**Index des Auteurs**

249



## CONFÉRENCES INVITÉES





## CI1

## HOW THE MATERIALS GENOME PROJECT CAN BOOST MATERIALS INNOVATION?

Hafid Aourag

University of Tlemcen, Algeria

**Abstract**

Our world is living a universal crisis, we are asking them to find ways to get advanced materials into innovative products. So scientists need to change the paradigm of how materials are discovered, developed. New vision should be introduced in order to integrate experiments, computation, and theory in this talk I will try to explore some ways and I will give some breakthrough of this world initiative.

## CI2

## MODELISATION EN METHODE DFT DE NANOCLUSTERS DE METAUX DU GROUPE 11 STABILISES PAR DES LIGANDS

Jean-Yves Saillard

Institut des Sciences Chimiques de Rennes, CNRS-Université de Rennes 1, 35042 Rennes cedex, France  
[saillard@univ-rennes1.fr](mailto:saillard@univ-rennes1.fr)

**Résumé**

Alors que la chimie des clusters d'or diamagnétiques à valence mixte (nanoclusters) s'est énormément développée durant les dernières décennies, celles du cuivre et de l'argent n'en sont qu'à leur début. La chimie des nanoclusters d'argent n'est connue que depuis quelques années et à notre connaissance seulement deux nanoclusters homonucléaires de cuivre ont été publiés à ce jour.

Nous présentons ici la contribution de nos études théoriques à l'interprétation de la stabilité, de la structure et des propriétés de nanoclusters réels ou hypothétiques d'argent et de cuivre, tels que par exemple  $[Ag_{21}\{S_2P(O^iPr)_2\}_{12}]^+$ ,<sup>1</sup>  $[Ag_{20}\{S_2P(O^iPr)_2\}_{12}]^+$ ,<sup>2</sup>  $[Ag_{13}\{\mu_3\text{-Fe}(\text{CO})_4\}_8]^{n-}$  ( $n = 3, 4, 5$ ),<sup>3</sup>  $[(\text{CuCN}^t\text{Bu})_4(\text{ZnCp}^*)_4]^4$ ,  $[\text{Cu}_{13}(\text{S}_2\text{CN}^n\text{Bu}_2)_6(\text{CCR})_4]^{+5}$  et  $[\text{Cu}_{43}(\text{AlCp}^*)_{12}]^6$ .

Ces travaux théoriques ont été menés en collaboration avec des équipes d'expérimentateurs à Taiwan et en Allemagne.

**Références**

- [1] Dhayal, R.-S.; Liao, J.-H.; Liu, Y.-C.; Chiang, M.-H.; Kahlal, S.; Saillard, J.-Y.; Liu, C.-W. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 54, 2015, 3702-3706.
- [2] Dhayal, R. S.; Lin, Y.-R.; Liao, J.-H.; Chen, Y.-J.; Liu, Y.-C.; Ming-Hsi Chiang, M. H.; Kahlal, K.; Saillard, J.-Y.; Liu, C.-W. *Chem. Eur. J.* 22, 2016, 1-6.
- [3] (a) Albano, V. G.; Grossi, L.; Longoni, G.; Monari, M.; Mulley, S.; Sironil, A. *J. Am. Chem. Soc.* 114, 1992, 5708 – 5713. (b) Albano, V. G.; Calderoni, F.; Iapalucci, M. C.; Longoni, G.; Monari, M.; Zanello, P. *J. Cluster Sci.* 6, 1995, 107-123.
- [4] Freitag, K.; Banh, H.; Gemel, C.; Seidel, R. W.; Kahlal, S.; Saillard, J.-Y.; Fischer R. A. *Chem. Comm.* 50, 2014, 8681-8684.
- [5] Chakrahari, K. K.; Jian-Hong Liao, J.-H.; Kahlal, S.; Yu-Chiao Liu, Y.-C.; Ming-Hsi Chiang, M. C.; Saillard, J.-Y.; Liu C.-W. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 55, 2016, 14704 -14708.
- [6] R. A. Fischer *et al.* to be published.

## CI3

## IMPORTANCE DES LIAISONS HYDROGENE DANS L'ETUDE QUANTIQUE DE LA SOLVATATION DU PROTON

Zoubeida Dhaouadi<sup>a\*</sup>, Jean Jules Fifen<sup>b</sup> et Alhadji Malloum<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Spectroscopie Atomique Moléculaire et Applications, Faculté des Sciences de Tunis, Université de Tunis El Manar, Campus Universitaire, 1060, Tunis, Tunisie<sup>b</sup>Département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Ngaoundere, B.P. : 454, Ngaoundere, Cameroun\*[dhaouadiz@yahoo.fr](mailto:dhaouadiz@yahoo.fr)

## Résumé

Calcul ab initio des structures et des paramètres thermodynamiques des clusters de méthanol, d'ammoniac, des formes protonées correspondantes et effets de température. Rôle des liaisons hydrogène, influence de leur nature dans la stabilisation de ces clusters de solvants et leur efficacité dans le transfert de proton.

**Mots clés :** Clusters, Solvatation, transfert du proton, liaisons hydrogène

Le nombre et la nature des liaisons hydrogène jouent un rôle capital dans la stabilisation des clusters de solvants. Ils influencent aussi le transfert de charge (proton ou électron) dans ces solvants. Nous avons étudié deux agrégats de solvants et leurs formes protonées : les clusters de molécules de méthanol  $(\text{CH}_3\text{OH})_{n=1-9}$  [1], les clusters de molécules d'ammoniac  $(\text{NH}_3)_{n=1-10}$  [2], les formes protonées  $\text{H}^+(\text{CH}_3\text{OH})_{n=1-9}$  [3] et  $\text{H}^+(\text{NH}_3)_{n=1-10}$  [4]. Nous avons également déterminé leurs structures et leurs stabilités relatives en fonction de la température ; en utilisant des méthodes de calcul ab-initio de chimie quantique. Du point de vue électronique, les structures les plus stables des agrégats étudiés sont celles qui renferment le plus grand nombre de liaisons hydrogène. La stabilité de ces structures dominantes est fonction de la nature des liaisons hydrogène qu'elles renferment. Nous notons précisément que, les clusters renfermant le plus grand nombre de liaisons de type AD, ADD et/ou AADD sont les plus stables lorsque les rotations et les vibrations moléculaires sont gelées. Le comportement reste le même en variant la température. Les mêmes critères de stabilité et l'analyse de population statistique montrent que généralement, les structures les plus compactes sont privilégiées à basses températures et les moins compactes le sont à hautes températures ; à température ambiante, on assiste généralement à un mélange d'isomères. De ces résultats, nous avons pu évaluer les enthalpies et les énergies libres de solvatation partielles du proton dans ces agrégats comme des fonctions explicites de la température. En assurant la convergence uniforme de ces énergies, nous avons montré que neuf molécules de solvant seraient suffisantes pour mimer efficacement les interactions à courte portée dans la solvatation du proton par l'un des solvants étudiés. Donc, la solvatation du proton dans l'un de ces solvants pourrait être correctement décrite uniquement avec neuf molécules de solvant plongées dans un continuum diélectrique. Enfin, nous notons que la solvatation facilite le transfert de proton. En outre, l'énergie de déprotonation d'un système moléculaire plongé dans un solvant diminue avec l'accroissement du nombre de liaisons hydrogène du solvant et leur nature favorisante.

## Références

- [1] Jean Jules Fifen, Mama Nsangou, Zoubeida Dhaouadi, Ousmanou Motapon and Nejm-Eddine Jaidane. Solvation Energies of the Proton in Methanol. *J. Chem. Theory Comput.* 9 (2013) 1173-1181.
- [2] Jean Jules Fifen, Mama Nsangou, Zoubeida Dhaouadi, Ousmanou Motapon and Nejm-Eddine Jaidane. Structures of protonated methanol clusters and temperature effects. *J. Chem. Phys.* 138 (2013) 184301.
- [3] Alhadji Malloum, Jean Jules Fifen, Zoubeida Dhaouadi, Serge Guy Nana Engo and Nejm-Eddine Jaidane. Structures and relative stabilities of ammonia clusters at different temperatures: DFT vs. ab initio. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (2015) 29226-29242.
- [4] Alhadji Malloum, Jean Jules Fifen, Zoubeida Dhaouadi, Serge Guy Nana Engo and Nejm-Eddine Jaidane. Structures and spectroscopy of protonated ammonia clusters at different temperatures. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18 (2016) 26827-26843.

## CI4

## LA NANO-OPTIQUE A FEMTO-ST : RECENTES AVANCEES

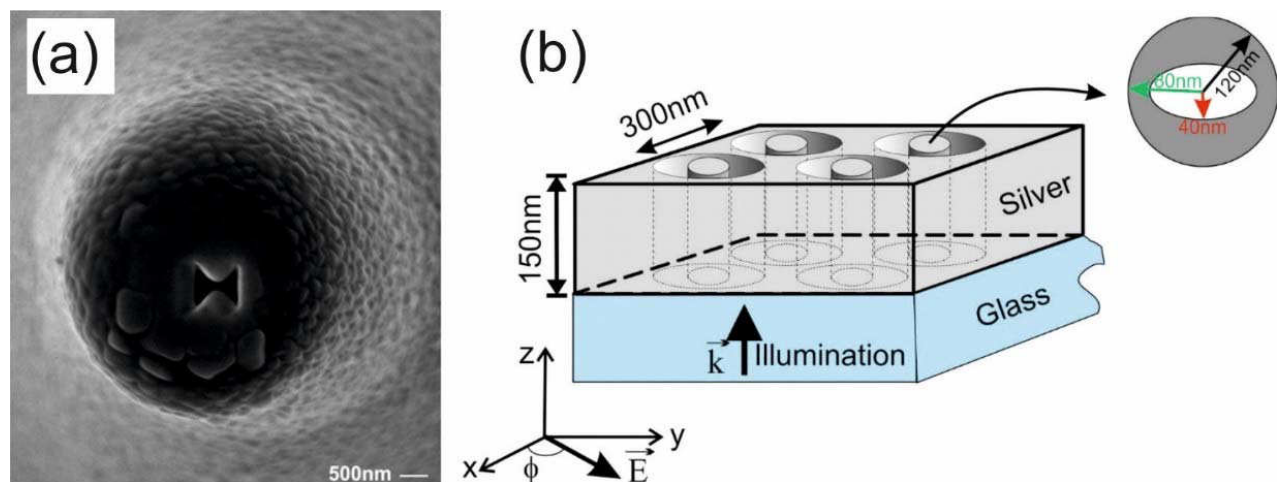
Fadi I. Baida

Institut FEMTO-ST, UMR 6174 CNRS-Université Bourgogne Franche Comté, 15 B av. des Montboucons, 25030 Besançon cedex (France)  
fbaida@univ-fcomte.fr

## Résumé

Cette présentation sera dédiée à une introduction rapide de la nano-optique et aux récentes avancées dans ce domaine au sein de l'institut FEMTO-ST. Des exemples de réalisations de cristaux photoniques [1], de nano-antennes [2,3], de sondes exotiques pour microscopie de champ proche [4] et de métamatériaux à transmission exaltée [5] seront discutés chacun en fonction de l'application visée (détecteurs de champ électrique, modulateur électro- et acousto-optique, exaltation de la génération du second harmonique, piégeage optique 3D, ...).

A titre d'exemple, la figure 1a ci-dessous montre une image MEB d'une nano-antenne fibrée jouant le rôle d'une pince optique permettant le piégeage de particules de latex de 250nm de rayon. La figure 1b représente le schéma d'un métamatériau à transmission exaltée présentant une biréfringence artificielle géante de  $\Delta n=0.75$ .



**Figure 1:** (a) Image MEB de l'extrémité d'une fibre optique taillée en pointe et métallisée avec 100nm d'aluminium où une ouverture en forme de noeud papillon a été réalisée par gravure au faisceau d'ions focalisé. (b) Schéma d'une structure périodique d'ouvertures annulaires à section elliptique perforées dans une couche d'argent déposée sur un substrat de verre. L'anisotropie géométrique (ellipse) permet de réaliser des lames biréfringentes ( $\lambda/2$  ou  $\lambda/4$ ) de très faible épaisseur et de très bonne efficacité de transmission ( $T > 40\%$ ) aussi bien dans le domaine du visible que dans celui du microonde ou du THz.

## Références:

- [1] M. Roussey, *et al.*, Appl. Phys. Lett. 89, 241110 (2006).
- [2] A. El Eter *et al.*, Opt. Express, 22, 10072 (2014).
- [3] F. I. Baida and T. Grosjean, Sci. Rep. 5, 17907 (2015).
- [4] F. I. Baida and A. Belkhir, Plasmonics 4, 51-59 (2009).
- [5] A. Ndao *et al.*, Appl. Phys. Lett. 103, 211901 (2013).

## C15

**THEORETICAL INVESTIGATION OF CYCLOADDITION REACTIONS:  
MECHANISM, SELECTIVITIES, SOLVENT AND CATALYST EFFECTS**

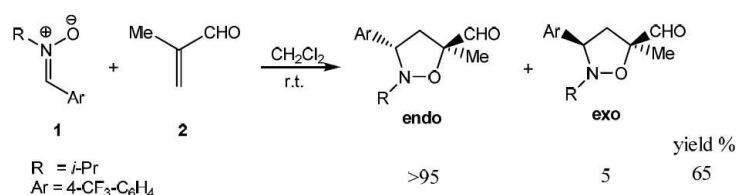
Sidi Mohamed Mekelleche

Laboratory of Applied Thermodynamics and Molecular Modelling, Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Tlemcen, PB 119, Tlemcen, 13000, Algeria  
[sm\\_mekelleche@mail.univ-tlemcen.dz](mailto:sm_mekelleche@mail.univ-tlemcen.dz)

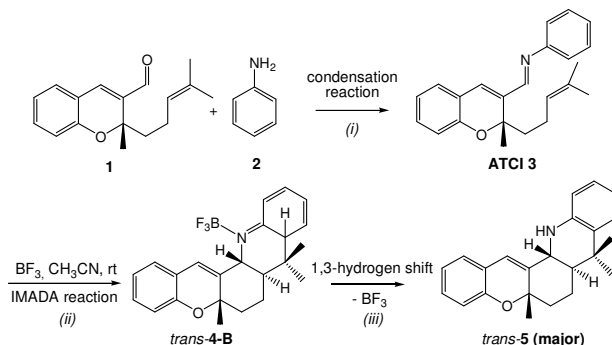
**Abstract**

In this communication, we present recent quantum-chemistry approaches used for the study of the different characteristics of cycloaddition reactions, namely, the mechanism, the regioselectivity, the stereoselectivity, the diastereoselectivity, solvent effects, and catalyst effects. For this purpose, three applications are discussed:

i) the 1,3-dipolar cycloaddition of N-iso-propyl, $\alpha$ -(4-trifluoromethyl)-phenyl nitron with methacrolein yielding the racemic mixture of the (3R,5R) and (3S,5S) isoxazolidine cycloadducts [1].



ii) The intramolecular Povarov reaction (Diels-Alder followed by 1,3-H shift) yielding 5H-chromeno[2,3-c]acridine derivatives [2].



iii) The kinetic effect of the 1-ethyl-pyridinium trifluoroacetate [EtPy]<sup>+</sup>[CF<sub>3</sub>COO]<sup>-</sup> ionic liquid in the promotion of Diels-Alder reactions of isoprene with different dienophiles [3].

**Keywords:** Cycloaddition, Diels-Alder, 1,3-dipolar, mechanism, regioselectivity, stereoselectivity, diastereoselectivity, Lewis acids, ionic liquids, ELF analysis, DFT calculations.

**References:**

- [1] W. Benchouk and S. M. Mekelleche, RSC Advances, 5, 22126 (2015)  
 [2] M. A. Mahi, S. M. Mekelleche, W. Benchouk, M. J. Aurell and L. R. Domingo, RSC Advances, 6, 15759 (2016).  
 [3] H. Chemouri and S. M. Mekelleche (submitted)



**CI6**

**CRISTAUX PHOTONIQUES ET METAMATERIAUX ACOUSTIQUES: D'UNE HISTOIRE RICHE A UN AVENIR PROMETTEUR**

Abdelkrim Khelif

Directeur de recherche CNRS Institut FEMTO-ST, UMR CNRS 6174 (UBFC) Micro Nano Sciences & Systems department (MN2S) Institut FEMTO-ST 15B Avenue des Montboucons 25030 Besançon Cedex, France

**Résumé**

La phononique est un domaine de recherche naissant qui cherche à analyser et manipuler les phonons. Elle se nourrit d'un ensemble de disciplines connexes, habituellement dénommées en fonction du "matériau" hôte de la propagation des ondes acoustiques et élastiques. Celles-ci incluent les cristaux phononiques ou soniques, les métamatériaux acoustiques, les super-réseaux et les structures périodiques. Les domaines d'applications que les matériaux phononiques impactent s'étendent de l'isolation des vibrations, aux MEMS, au contrôle des fréquences dans les communications RF, jusqu'au transport thermique à l'échelle nanoscopique. Avec l'émergence récente des métamatériaux, des applications exotiques s'ajoutent maintenant à cette liste, des capes d'invisibilité aux super-lentilles. L'interaction des ondes mécaniques avec les ondes optiques dans les cavités et les réseaux ordonnés, ou optomécanique, ouvre un autre front d'opportunités, en particulier vers les télécommunications et les capteurs ultimes. Dans ce vaste ensemble, ma présentation parcourra les résultats les plus importants dans le domaine et donnera un aperçu sur les sujets émergents

## CI7

**ERREUR DE SELF-INTERACTION DANS LES CALCULS DFT:  
ORIGINE, IMPORTANCE DANS LES CALCULS D'ANIONS MONOATOMIQUES,  
REPERCUSSIONS SUR CERTAINS PROFILS DE REACTION: CORRECTION PROPOSÉE**

Henry Chermette<sup>1</sup>, Walid Lamine<sup>1,2</sup>, Salima Boughdiri<sup>2</sup>, Lorraine Christ<sup>3</sup>, Christophe Morell<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université de Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, UMR5280 CNRS, Institut des Sciences Analytiques, Villeurbanne, France;

<sup>2</sup> Université de Tunis El Manar, Faculté des Sciences de Tunis, UR11ES19 Unité de recherche Physico-Chimie des Matériaux condensés, Tunis, Tunisie; <sup>3</sup> Université de Lyon, Université Lyon 1(UCBL), IRCELYON, Villeurbanne, France

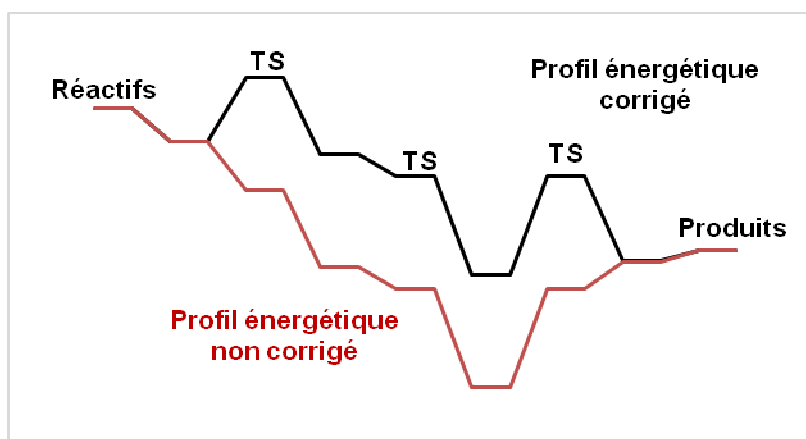
[henry.chermette@univ-lyon1.fr](mailto:henry.chermette@univ-lyon1.fr)

### Résumé

La modélisation de la réaction catalytique impliquant un anion monoatomique comme co-catalyseur conduit souvent à des chemins de réaction irréalistes dans la plupart des calculs DFT. Nous montrons que la raison en est la sous-estimation de l'énergie de l'anion. La cause vient de ce que, dans les calculs DFT, on obtient, d'une part et d'une manière générale, une trop grande délocalisation de la densité électronique associée aux orbitales de valence, et d'autre part la méthode DFT dans sa formulation Kohn-Sham (la seule utilisée), calcule pour chaque orbitale une interaction électronique avec tous les électrons (la densité électronique totale), et non pas avec tous les électrons sauf celui de l'orbitale en question. Il en résulte une erreur systématique, dite erreur de self-interaction, qui est l'énergie d'interaction de l'électron avec lui-même. La délocalisation électronique, qui, on l'a dit, est généralement surestimée, permet en fait de moyenner et de minimiser cette erreur de self-interaction dans les systèmes moléculaires. En revanche, cette délocalisation électronique ne peut se produire dans un système constitué d'un seul atome. Plusieurs schémas ont été proposés dans le passé pour pallier cet inconvénient; Aucun d'entre eux ne s'est avéré efficace et peu coûteux.

Dans le présent travail, nous avons quantifié cette erreur en effectuant un calcul « Linear Transit », à partir d'un état de transition vers des fragments séparés[1]. A titre d'exemple, nous décrivons un système modélisant l'insertion du CO<sub>2</sub> dans des époxydes catalysés par un complexe Zn en présence d'un ion iodure, introduit sous la forme Bu<sub>4</sub>N<sup>+</sup> I<sup>-</sup>. Le ligand dans le complexe Zn est une base de Schiff.

Cela a permis d'obtenir un moyen efficace pour corriger cette erreur avec les fonctionnelles GGA. Il est intéressant de noter que l'erreur de self interaction dépend moins de la quantité d'échange Hartree-Fock dans les fonctionnelles hybrides que prévu. De façon inattendue, aucune amélioration significative n'est obtenue avec les "Long-Range-corrected density functionals".



### Références:

[1] W. Lamine et al., Molecular Physics. 2016, 114, 1066-1075.

**CI8**

**LA DYNAMIQUE INTERNE DES PROTEINES; LE CAS DES PROTEINES FLUORESCENTES**

B. Lévy<sup>a</sup>, I. Demachy<sup>a</sup>, J. Ridard<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de Chimie-Physique CNRS-Université Paris Sud, Orsay*

**Résumé**

On discute de l'interprétation résultats expérimentaux portant sur des processus physico-chimique se produisant à l'intérieur des protéines, principalement de protéines fluorescentes.

Dans une première partie on présente des exemples de processus montrant comment la structure des protéines (ni solide, ni liquide) limite ou même empêche l'utilisation des méthodes/concepts qui sont efficaces en solution, en particulier l'existence d'un chemin de réaction et la décorrélation entre les mouvements du système sur ce chemin (les réactifs) et les autres mouvements (l'environnement).

Dans une seconde partie on présente un mode de calcul de dynamique moléculaire qui permet, au moins dans les protéines fluorescentes étudiées, d'identifier des déplacements d'atomes ou de groupements qui sont d'une part couplés entre eux et d'une part couplés de façon significative avec le processus étudié (isomérisation, branchement entre deux voies réactives ...).

## CI9

## DFT STUDIES OF LINEAR AND NON LINEAR OPTICAL PROPERTIES OF TRANSITION METAL COMPLEXES

Abdou Boucekkine

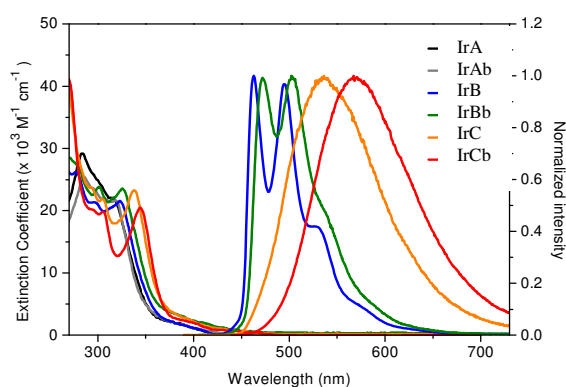
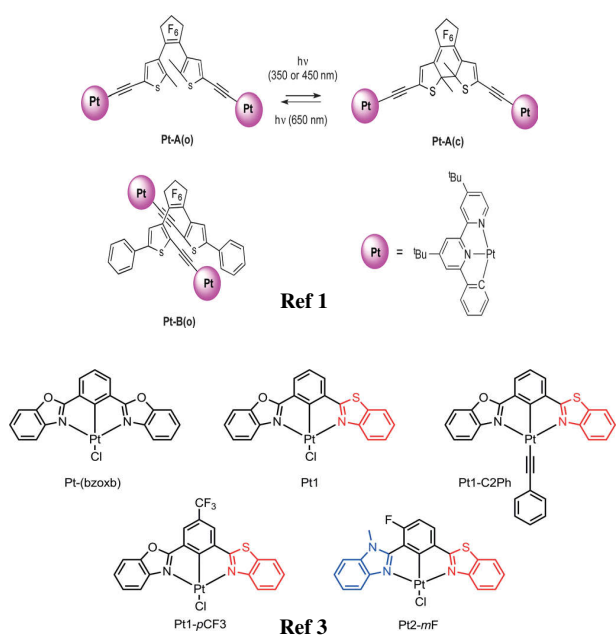
Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS-Université de Rennes 1, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes cedex (France);

[abdou.boucekkine@univ-rennes1.fr](mailto:abdou.boucekkine@univ-rennes1.fr)

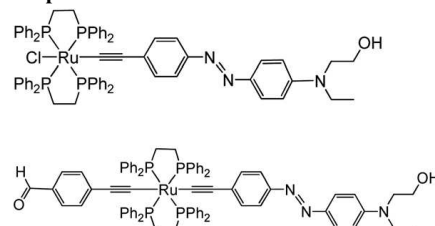
## Abstract

Linear and non linear optical (NLO) properties of transition metal complexes can lead to numerous applications in the field of LED, lasers, medical imaging, ... It is shown that techniques based on Density Functional Theory (DFT) and Time dependent DFT (TD-DFT) permit not only a good description of the ground state properties of such species but also a rationalization of their optical properties and thus can help to the design of new molecules with improved properties. In this paper, the methodology for these kinds of investigations will be presented, as well as several joint experimental and theoretical studies, among them, Contrasted photochromic and luminescent properties in dinuclear Pt(II) complexes linked through a central dithienylethene unit [1], Vibronic coupling to simulate the phosphorescence spectra of Ir(III)-based OLED systems, when TD-DFT results meet experimental data[2], Asymmetrical 1,3-Bis(heteroazoly)benzene Platinum Complexes with Tunable Second-Order Non-Linear Optical Properties [3], Nonlinear optical properties of intriguing Ru  $\sigma$ -acetylide complexes [4].

**Keywords:** DFT, TD-DFT, Organometallic, Luminescence, NLO



Ref 2. absorption and emission spectra



## References

- [1] J. Boixel, Y. Zhu, H. Le Bozec, M. A. Benmensor, A. Boucekkine, K. M.-C. Wong, A. Colombo, D. Roberto, V. Guerschais, D. Jacquemin, *Chem. Commun.* 2016, 52, 9833.
- [2] H. Belaidi, S. Belaidi, C. Katan, C. Latouche, A. Boucekkine, *J. Mol. Model.*, 2016, 22, 265.
- [3] T. T. Dang, J.-F. Soule, H. Doucet, M. A. Benmensor, A. Boucekkine, A. Colombo, C. Dragonetti, S. Righetto, D. Jacquemin, J. Boixel, V. Guerschais, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2016, 55, 4774.
- [4] A. Colombo, C. Dragonetti, D. Marinotto, S. Righetto, G. Griffini, S. Turri, H. Akdas-Kilig, J.-L. Fillaut, A. Amar, A. Boucekkine, C. Katan, *Dalton Trans.*, 2016, 45, 11052.

## C110

## MICROSTRUCTURES ET PROPRIETES MECANIQUES DES NANOVERRES METALLIQUES

Omar Adjaoud\*<sup>a</sup>, Karsten Albe<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Technische Universität Darmstadt, Fachbereich Material- und Geowissenschaften, Fachgebiet Materialmodellierung, Jovanka-Bontschits-Str. 2, D-64287 Darmstadt, Germany

\*[adjaoud@mm.tu-darmstadt.de](mailto:adjaoud@mm.tu-darmstadt.de)

**Résumé**

Les verres métalliques sont dotés d'une résistance mécanique exceptionnelle associée à un comportement plastique unique. Ils disposent aussi d'une excellente dureté mais présentent généralement une plasticité globale négligeable sous une tension uniaxiale. Un moyen prometteur d'améliorer la plasticité est d'utiliser des nanoverres métalliques, qui sont des matériaux entièrement amorphes. Ces matériaux montrent une plasticité améliorée sous compression et tension. Les nanoverres métalliques ont été produits en consolidant des sphères vitreuses de taille nanométrique qui sont préparées par condensation de gaz inerte. Les nanoverres métalliques sont des matériaux amorphes possédant une microstructure inhomogène qui consiste en des grains vitreux reliés par des joints verre-verre et qui peuvent donc être comparés à des matériaux nanocristallins.

Les expériences révèlent que ces joints sont caractérisés par un excès de volume et une composition différente de celle des grains vitreux. Bien que les simulations antérieures de la dynamique moléculaire aient contribué de manière significative à la compréhension de la microstructure des nanoverres métalliques, l'origine de la différente composition dans les joints n'est pas encore bien comprise.

Dans cette contribution je vais présenter une analyse détaillée de la formation de la microstructure des nanoverres métalliques en utilisant la dynamique moléculaire. Je vais discuter les effets de la microstructure sur les propriétés mécaniques des nanoverres métalliques.

## CI11

**LES METHODES DE LA CHIMIE QUANTIQUE.  
APPLICATIONS ET AMERTUME DE NE PAS POUVOIR FINALISER LE TRAVAIL  
EXPERIMENTALEMENT**Meziane Brahimi<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de Physico Chimie Théorique et Chimie Informatique. Faculté de Chimie. Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene (USTHB). BP N° 32 El Alia. Alger. Algérie*

\* [mez\\_brahimi@yahoo.fr](mailto:mez_brahimi@yahoo.fr)

**Résumé**

La chimie théorique prend toute sa part dans le développement des thématiques de recherche liées à de forts enjeux comme :

Comprendre les phénomènes électroniques microscopiques à l'origine de la production et du stockage de l'énergie qui est un défi particulièrement important pour la chimie théorique.

Les sciences de la vie, soit à travers l'axe de conception rationnelle de molécules actives d'intérêt pharmaco-chimique, soit à travers la résolution de structures via des méthodes de la biologie structurale comme la cristallographie ou la RMN. Il est maintenant avéré que les phénomènes biologiques nécessitent une description de l'évolution dynamique des macromolécules dans leurs environnements complexes.

L'objectif de notre travail se situe dans ces dimensions en appliquant les méthodes de la chimie quantique, pour déterminer les structures, les propriétés électronique et énergétique de nouvelles molécules antipaludiques et/ou anticancéreuses [1, 2] d'une part et d'examiner le phénomène de transfert d'électrons (TE), de proton (TP), de groupement méthyle (TGM) et du groupement méthyle assisté par un TP (TGM-A-TP) [3] d'autre part.

Nous avons aussi appliquer les mêmes méthodes pour proposer et enrichir, la base de données des molécules, par de nouvelles structures de type  $C_nGe_nH_n$  et  $C_nH_nGe_nH_n$  [4].

**Mots-clés** : DFT, Transfert d'Electron, Transfert de Proton, Transfert de Groupement Methyl, Antipaludiques et Anticancéreux.

**Références**

- [1] Sihem Zaater, Meziane Brahimi and Ali Rahmouni, Polyhedron 31(2012) 29-36.
- [2] Nabila Triaki, Sihem Zaater, Soraya Abtouche and Meziane Brahimi. Polyhedron 119(2016) 471-482.
- [3] Razika Larabi, Soraya Abtouche and Meziane Brahimi, J. Mol. Model. (2014) 20 :2302.
- [4] A novel Carbone/Germanium conics structures: Theoretical Study with Density Functional Theory. M. BRAHIMI, M. ELKEBICHE, R. LARABI, S. ABTOUCHE. The 15<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry. 8-13, June, 2015. Pékin (Chine).

## CI12

**SINGLE MAGNETIC SKYRMIONS FROM FIRST-PRINCIPLES: FROM PINNING EFFECTS TO ELECTRICAL AND X-RAY READING**Samir Lounis<sup>a</sup>, G. Peter<sup>a</sup>

GrünbergInstitut and Institute for Advanced Simulation, Forschungszentrum Jülich GmbH, Germany

**Abstract**

Skyrmions are robust non-collinear textures stabilized and protected by their topological nature. They can be moved with low current densities in a racetrack memory, which promotes them to be potential bits for future information technology by promising devices of low energy consumption. I will discuss first-time ab-initio based simulations of single magnetic skyrmions by highlighting our proposals to detect them with electrical means via the tunneling spin-mixing resistance (TXMR) [1] or with soft x-ray spectroscopy [2]. For instance the TXMR effect can be used within a current perpendicular-to-plane geometry, which has immediate implications for device concepts. We explore the physics behind such a mechanism by studying the atomistic electronic structure of the magnetic quasiparticles. I will show that by hosting ground state emergent magnetic fields, magnetic skyrmions can carry a non-trivial orbital magnetization, even without the spin-orbit interaction. This means that the orbital moment contains a topological contribution that does not change under continuous deformations of the magnetic structure. This feature can be used in a new experimental protocol to identify topological magnetic structures. Finally, I will discuss a crucial issue in the physics of skyrmions, namely the impact of defects in a realistic device. Imperfections affect the creation, stability and motion of these non-collinear structures. I will discuss the case of 3d and 4d impurities and present an analysis based on the hybridization of the electronic states and identify the important mechanisms behind the expulsion or pinning of single magnetic skyrmions as function of the chemical nature of the impurities. This translates on a bigger picture to an energy landscape with attractive and repulsive potentials determining the skyrmion motion.

Work done together with: I. Fernandes, D. Crum, J. Bouaziz, M. dos Santos Dias, M. Bouhassoune, A. Ziane, S. Blügel.

**References**

- [1] D.M. Crum, M. Bouhassoune, J. Bouaziz, B. Schweflinghaus, S. Blügel, S. Lounis, *Nature Commun.* **6**, 8541 (2015).
- [2] M. dos Santos Dias, J. Bouaziz, M. Bouhassoune, S. Blügel, S. Lounis, *Nature Commun.* **7**, 13613 (2016)
- Funding provided by the HGF-YIG Programme VH-NG-717 (Funsilab), the ERC-consolidator grant Dynasore and CNPq (Brazil).







## **2<sup>ÈME</sup> CONGRES DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE**







## COMMUNICATIONS ORALES





## COL - CPCQ

## STRUCTURE ELECTRONIQUE DES DISLOCATIONS DANS LE NITRURE DE GALLIUM

Imad Belabbas<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Equipe de cristallographie et simulation des matériaux, Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse, Université Abderahmane Mira. Bejaia (06000). Algérie.

\* [belabbas\\_imad@yahoo.fr](mailto:belabbas_imad@yahoo.fr)

**Résumé**

Les matériaux nitrures-III, que sont le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN), le nitrure d'indium (InN) ainsi que leurs alliages ternaires et quaternaires, constituent une classe de matériaux très attractive en optoélectronique, de part ses applications réalisées ou potentielles. Bien que ces matériaux ont été exploités initialement dans la réalisation d'émetteurs de lumière bleue (LEDs et Lasers), le contrôle de la composition des alliages nitrures-III a permis d'obtenir des dispositifs émettant dans une large gamme du spectre électromagnétique, allant de l'ultra-violet à l'infrarouge en passant par le domaine visible [1]. L'effort déployé par la communauté scientifique des matériaux nitrures-III, au cours de ces trois dernières décennies, a été récompensé par l'attribution, en 2015, du prix Nobel de physique à S. Nakamura, H. Amano et I. Akasaki.

Due à la non-disponibilité d'un substrat natif bon marché, la quasi-majorité des couches minces de GaN, destinées à l'industrie, sont élaborées par hétéro-épitaxie sur des substrats d'alumine, de silicium ou de carbure de silicium. Ces derniers présentant un écart paramétrique important, pouvant atteindre 15%, les couches de GaN ainsi élaborées présentent de fortes concentrations de dislocations [2]. Il a été clairement établi que la présence de ces dislocations est à l'origine de la réduction de l'efficacité des dispositifs optiques à base de GaN.

Dans la présente contribution, nous avons mené des simulations atomistiques, basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité, des différentes configurations du cœur relatives aux trois types de dislocations prépondérantes dans GaN, à savoir : la coin-a, la vis-c ainsi que la mixte-(a+c) [3]. Les structures atomiques et électroniques de ces configurations du cœur ont été analysées et systématiquement comparées. Les dislocations vis-a et mixte-(a+c) introduisent à la fois des niveaux d'énergie profonds et peu-profonds dans la bande interdite du GaN, alors que la majeure partie des configurations de la dislocation coin-a introduisent seulement des niveaux peu-profonds. Nous avons montré qu'une métallisation unidimensionnelle associée aux niveaux non-occupés est une propriété exclusive de la dislocation vis-c. Cette métallisation étendue associée à une grande dispersion des niveaux d'énergie dans le gap est proposée pour être à l'origine de la conduction électrique le long des dislocations vis-c, observée expérimentalement.

**Mots-clés :** GaN, dislocations, cœur, simulation atomistique, DFT, structure électronique.

**Références**

- [1] Morkoc et al., MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 4S1, G1 (1999).
- [2] Qian et al., Appl. Phys. Lett. 67, 2284 (1995).
- [3] I. Belabbas, J. Chen and G. Nouet, Comput. Mat. Sci. 90, 71 (2014).

## CO1 - CPCQ 2017

## PREPARATION, STRUCTURAL AND OPTICAL CHARACTERIZATION OF NaCl SINGLE CRYSTAL DOPED WITH CdSe NANOCRYSTALS.

L. Bouhdjer, S. Addala, M. Sebais, O. Halimi, B. Boudine

Laboratory of Crystallography, Department of physics, Mentouri- University of Constantine, Constantine 25000, Algeria  
 \* [bouhdjerlazhar@gmail.com](mailto:bouhdjerlazhar@gmail.com)

**Abstract**

Structural and optical properties of NaCl single crystal indoped and doped with CdSe nanocrystals (NCs) were studied. NaCl and NaCl: CdSe single crystals have been pulled using the Czochralski (CZ) method with pulling rates in the 8-10 m/h range. The nano-size of CdSe aggregates in NaCl host determined from XRD measurements by using the Sherrer formula. The Raman spectroscopy presented the LO mode vibration relative of (Cd-Se) chemical liaison. Moreover, the results of the optical absorption and photoluminescence spectra confirmed the nano-size of CdSe aggregates were observed band absorption located at 622.5nm relative of electronic transition  $1s_e-1s_{3/2}$  of CdSe, with a blue shift from the bulk gap of  $\Delta E_g=0.26\text{eV}$  ( $E_g$  (CdSe) bulk=1.73eV), while the photoluminescence showed a band situated at 643.55 nm, with displacement  $E_g$  towards the short wavelength (blue shift), this blue shift due to the nanometric size of CdSe aggregates.

**Keywords** :CdSe nanocrystals, XRD, Raman spectroscopy, PL spectroscopy.

**Introduction**

Recently Cadmium Selenide (CdSe) and the binary semiconductor compounds are attracting a lot of attention by researchers due to its wide range of opto-electronic properties, which make it a good candidate for solar cells; solar selective coating [1-2]. In the semiconductor nanocrystals size the charges are confined, so the effect of confinement leads to a fundamental change in the electronic structure. When the particle size approaches the Bohr radius scale of massive exciton, it exhibits new optical properties [3]. Among these NCs; CdSe has been extensively investigated for its potential applications such as biomedical tags [4], light-emitting diodes [5], lasers [6] and gamma ray detectors [7-9]. The work on structural and optical properties of KBr:ZnO and NaCl: CdS crystals have been reported earlier from this laboratory [10-11]. In the present papers, NaCl and NaCl: CdSe have been synthesized successfully. The NaCl host has a wide energy gap ( $E_g \approx 6.43\text{ eV}$ ), which makes it a transparent matrix in the UV-VIS spectral range, these properties supported that, to study the optical properties of CdSe NCs in the UV-VIS range.

**Experimental details**

NaCl and NaCl: CdSe were prepared using the Cz method. In the present work, NaCl powder procured from "LABOSI/Chemicals products and reaction laboratory" with 99,9% purity, and CdSe powder procured from "Aldrich chemicals" with 99,99% purity. Concrete weighting of NaCl powder was thoroughly mixed with CdSe nano-powder and these mixtures were heated in becoming crucible to melt. The oven temperature has been controlled by the control system: Controller [REX-C100 SEPIES] and the platinum/platinum Radium (10%) thermocouple, the pulling rates in the 8-10 mm/h range and the rotation speed is  $V_r=1$  round/minute. During the growth, changing the thermal gradient to control the diameter of the NaCl and NaCl: CdSe ( 2.5 cm) with long in the ( 7.5 to 10 cm) range.





The growth is carried out following the crystallography [100] axes. The obtained crystals are cleaved parallel to the (100) plane with required size. Figure 1: presented photograph of NaCl: CdSe single crystal. XRD data have been obtained using the Cu K $\alpha$  radiation ( $\lambda K\alpha=1,5402 \text{ \AA}$ ) and graphite filter with BRUKER-AXS D8 diffractometer. The structural composition of layers was carried out by using a (Jobin-Yvon)  $\mu$ -Raman spectrometer in Room Temperature (RT). Optical properties were analyzed using UV-visible spectrophotometer (Shimadzu, UV-3101). Furthermore, the photoluminescence (PL) was measured in RT and the samples were excited by an argon laser (ionized light  $E_{exc}=514,5 \text{ nm}$ ) with output power of 10 mW.

### Conclusion

In the present work, we report an experimental study contain a preparation, structural and optical characterization of NaCl single crystal doped with CdSe nanocrystals (NCs) as bulk defects. NaCl and NaCl: CdSe single crystals are growing by the Czochralski method along [100] crystallographic axes. In order to characterize the samples with comfortably, the obtained crystals are cleaved parallel to the (100) face with suitable size. The XRD results indicate that the NaCl and NaCl: CdSe have a single crystal character with high purity. In addition, the estimated size of CdSe crystallites in NaCl: CdSe crystal is about 35nm and the orientation of CdSe NCs have only two directions preferred (110) and (112). In other side, Raman spectroscopy and Fourier transform infrared (FT-IR) confirm the existence of Cu-O chemical liaison in the CdSezinc blind phase. Regarding the optical properties, the Uvi-Vis absorption exhibited a bond absorption located at 622.5nm due to the allowed direct transitions of CdSe NCs. The nano-size of doping CdSe translated by exhibiting a blue shift of the gap ( $\Delta E_{gap}= 0.26\text{eV}$ ) toward high energies. Furthermore, Photoluminescence (PL) spectroscopy appear a loading and intense band located at around 643nm due to CdSe NCs, which supported these samples to introduce them in optical devises active in the visible range. The whole results prove that the elaboration of NaCl: CdSe single crystal starting from inhomogeneous melt phase has been achieved, where the CdSe NCs keep their properties.

### References

- [1] X. Mathew, J.P. Enriquez, A.N. Tiwari, A. Romeo, Sol. Energy 77 (2004) 831.
- [2] V.P Singh, J.C. McClure, G.B. Lush, W. Wang, G.W. Thompson, E. Cleark, Sol. Energy Mater. Sol. Cells 59 (1999) 35.
- [3] O. Codo, A.G. Rolo, L.G. Vieira, M.J.M. Gomes, Ricolleau, D.J. Barber, J. Crystal. Growth 247 (2003) 371.
- [4] M.Bruchez, M.Moronne. P. Gins, S. Weiss, A.P. Alivisatos, Science 281 (1998) 2013.
- [5] M.C. Schlamp, X.G. Peng, A.P. Alivisatos, J. Appl. Phys. 82 (1997) 5837.
- [6] M. Kazes, D.Y. Lewis, Y. Ebenstein, T. Mokari, U. Bannin, Adv. Mater. 14 (2002) 317.
- [7] Y.A. Afuzov, E.T.Bilyalov, V.M. Sviriuv, Galiotekhnika 4 (1984) 69.
- [8] S. Uthana, P.J. Reddy, Phys. StatusSolidi A 65 (1981) 269.
- [9] A. K. Rautri, R. Thangraj, A.K. Sharma, B.B. Tripathi, O.P. Agnivotri, Thin Solid Films 91 (1982) 55.
- [10] O. Halimi, B. Boudine, M. Sebais, A. Challouche, R. Mouras, A. Boudrioua, J. Materials Science and Engineering C 23 (2003) 1111.
- [11] B. Boudine, M. Sebais, O. Halimi, H. Alliouche, A. Boudrioua, R. Mouras, J. CatalysisToday 89 (2004) 293.

CO<sub>2</sub> - CPCQ 2017

## TURBULENT EJECTION AND COOLING OF STAINLESSSTEEL FILM DURING LASER CUTTING PROCESS.

Samia Aggoune<sup>a\*</sup>, El-Hachemi Amara<sup>a</sup>, Chérifa Abid<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Centre de Développement des Technologies Avancées, LaserMaterialProcessing Team, P.O. Box 17 Baba- Hassen, 16303Algiers, Algeria

<sup>b</sup>Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille, IUSTI UMR 7343, 13453 Marseille, France

\*[saggoune@cdta.dz](mailto:saggoune@cdta.dz)

### Abstract

An analytical approach based on the boundary layer theory is developed to treat the effect of a turbulent assist gas jet during fusion laser cutting of stainless steel workpiece. Three inert gases (nitrogen, argon and helium) are used in our investigation to analyze and to deduce the most efficient one for evacuating the molten material out of the kerf and for cooling the cut edges. The obtained results allow to conclude that the argon and the nitrogen shearing is more efficient for cutting stainless steel compared to helium gas, and that the obtained cooling rates remain negligible near the incident laser power generally required for the laser cutting process.

**Keywords:**cutting, laser, turbulent, boundary layers, metal, gas, cooling.

### Introduction

Laser cutting is one of largest engineering applications of lasers and an efficient method for cutting of a wide range of materials with a higher degree of accuracy. Its main characteristic is related to the fact that the laser beam can be focused to a spot of less than 0.5mm diameter with numerous advantages, namely narrow kerf width (minimum material lost), straight smooth cut edges, low roughness of cut surfaces, minimum distortions, and reduced heat affected zone [1-3]. Laser cutting which is a contactless thermal process is capable to cut metals, mainly steels, with a power density ranging between  $10^7$  to  $10^8$  W/cm<sup>2</sup>. This power density is sufficient to melt locally or even vaporize most materials.

### Shearing at the interface gas-melt and cooling as a function of the gas Re number

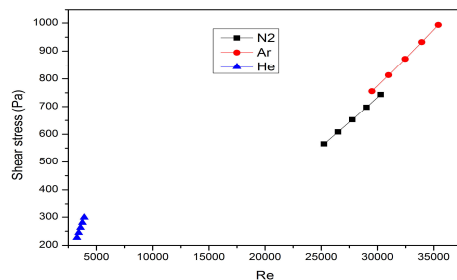


Fig. 1: Shear stress intensity versus gas Reynolds

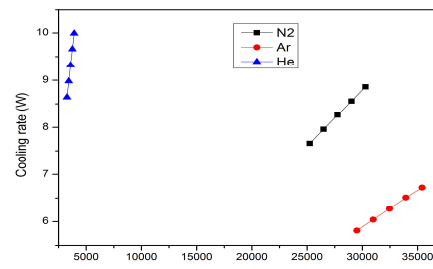


Fig 2: Cooling rates versus gas Reynolds number for the three gases.

### References

- [1] S. Chen, The effects of high-pressure assistant-gas flow on high-power CO<sub>2</sub> laser cutting, J. Mater. Process. Tech. 88 (1999) 57–66.
- [2] Schulz W, Becker D, Franke J, Kemmerling and Herziger G, Heat conduction losses in laser cutting of metals J. Phys. D:Appl. Phys. 26 1357-1363. (1993)
- [3] D. Petring, J. F. Ready and D. F. Farson (Eds.), Laser cutting processes, LIA Handbook of Laser Materials Processing, Magnolia Publishing, Orlando, FL, (2001) 425–426.

## CO3 - CPCQ 2017

## EXPERIMENTAL MEASUREMENT OF THE PASCHEN CURVE IN A XENON-NEON MIXTURE.

Fatiha Ghaleb<sup>a\*</sup>, B. Caillier<sup>b</sup>, P. Guillot<sup>b</sup>, B. Larouci<sup>a</sup> and A. Belasri<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique des Plasmas Matériaux Conducteurs et leurs Applications, Université des Sciences et de la Technologie Mohamed Boudiaf USTOMB, Oran, Algérie<sup>b</sup> Laboratoire Diagnostic des Plasmas Hors Equilibre DPHE, Institut national Universitaire Champollion, Albi, France  
<sup>\*</sup> [ghaleb.fatiha@gmail.com](mailto:ghaleb.fatiha@gmail.com)**Abstract**

The electrical breakdown in a gas is the transition from the quasi-insulating state to a conductive state when a sufficiently intense electrical field is applied. The value of the voltage associated with this transition is called breakdown voltage and corresponds to the first value of the voltage and therefore the optimum energy for which the discharge becomes autonomous or self-sustaining. Our work is an experimental measurement of breakdown voltage according to the product of the electrode spacing and the pressure in a lamp that consists of two planilux glass plates designated by PLX, these two barriers are filled with a xenon-neon mixture gases, These results are compared with a two-dimensional geometry which is based on the resolution of the continuity equations and the quasi-motion coupled to the Poisson equation.

**Keywords:** Breakdown voltage, dielectric barrier, two-dimensional model

**Introduction**

The breakdown voltage is obviously a very significant size that it is necessary to try to decrease to avoid a too great consumption and to simplify the electronics of order [1]. The well-known Paschen curve describes the gaseous breakdown voltage as a function of the reduced variable of the pressure-gap spacing product. Typically, breakdown voltage generally forms a fairly smooth curve with a minimum breakdown voltage at a specific P.d [2].

**Experimental measurements**

The lamp used in the experiment is characterized by a square power supply, at a pressure which varies from 450 to 1 mBar, consisting of two "Planilux" glass plates and designated "PLX" and measures 4 mm thick, which fill the role of dielectric barriers. An interelectrode space of 3 mm between the dielectric barriers filled with a mixture of rare gases is maintained over their entire surface which is equal to 30x30 cm<sup>2</sup>.

**Results and Discussions****Effect of the electrode surface**

This part, we chose to put three electrode surfaces above the dielectric barriers (5x5 cm<sup>2</sup>, 1x1 cm<sup>2</sup> et aussi 3x3 cm<sup>2</sup>). fig. 2, to see the influence of these surfaces on the breakdown voltage.

**Conclusion**

We used two plane-plane and coplanar geometries in this experiment to measure the Paschen voltage, in a mixture of 50% xenon in neon. This allowed us to describe and verify the validity of our results

**References**

- [1] H.S. Uhm, E.H. Choi., Thin Solid Films 475(2005) pp 327-331  
 [2] F. Ghaleb, and A. Belasri, Radiation Effects & Defects in Solids, 167(6) (2012) pp 377–383.  
 [3] B. Caillier, T. Beaudette, L. Therese, P. Belenguer, and P. Guillot,, European Journal of Electrical Engineering-ing, vol. 16, no. 5–6, (2013) pp. 565–582

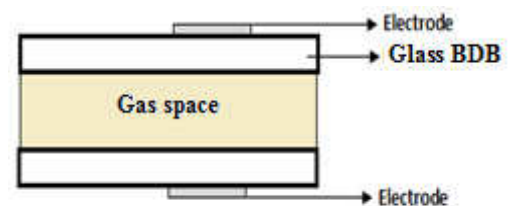


Fig. 1: Structure of the lamp BD[3]

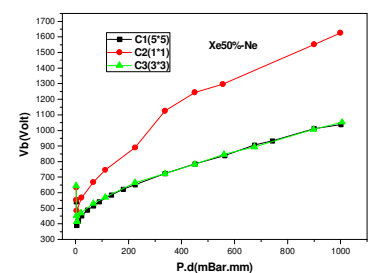


Fig.2. Variation of the Paschen curve for three geometries

## CO4 - CPCQ 2017

## REFORMULATION DES GRANDEURS THERMODYNAMIQUES DU CORPS NOIR DANS LE CADRE DE LA K-STATISTIQUE DE KANIADAKIS.

Imene Lourek\*, Mouloud Tribeche

<sup>a</sup> Physique théorique, Equipe de Physique des Plasmas, USTHB, Alger, Algérie\* [imene.lourek@gmail.com](mailto:imene.lourek@gmail.com)**Résumé**

Les propriétés thermodynamiques du rayonnement du corps noir sont revisitées, pour la première fois, dans le cadre de la théorie des  $\kappa$ -statistiques introduite par Kaniadakis. En utilisant la distribution de Bose-Einstein, des expressions généralisées pour l'énergie libre, l'entropie, la chaleur spécifique, et la pression ont été établies. La réexamination des propriétés thermodynamiques du rayonnement du corps noir montre qu'il émet plus d'énergie par rapport à la loi de Planck usuelle en augmentant la valeur de  $|\kappa|$ . De plus, les effets des statistiques de Kaniadakis déformées sont plus grandes dans les hautes températures. Nos résultats pourraient servir comme un support théorique aux études expérimentales du rayonnement du corps noir tel que l'étude du rayonnement du fond diffus cosmologique.

**Mots clés :** Propriétés thermodynamiques, Rayonnement du corps noir, statistique de Kaniadakis...

**Introduction**

En dépit de son grand succès, la loi de Planck usuelle qui a été observée expérimentalement à montré de faibles déviations dans le rayonnement du fond diffus cosmologique (observations faites par FIRAS spectrographer in the Cosmic Background Explorer satellite) [1]. Des explications ont été données est que ces déviations sont due à la non-extensivité du système [1]. C'est pour cela que la loi de Planck a été généralisée dans le cadre de la statistique de Tsallis (statistique non extensive) [2]. Dans le but de contourner certains anomalies que présente cette dernière à son tour, nous avons réexaminé les grandeurs thermodynamiques du corps noir [3] dans le cadre d'une autre généralisation introduite en (2001) par Kaniadakis [4] dans un contexte relativiste.

**La loi de Planck**

Rappelons brièvement la loi de Planck. Cette dernière est basée sur la distribution de Bose-Einstein (BE):

$$n_i = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right) - 1} \quad (1)$$

Où  $g_i$  étant la dégénérescence du niveau d'énergie  $E_i$ ,  $n_i$  le nombre de micro-état correspondant,  $\mu$  le potentiel chimique,  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température. Un photon se propage comme une onde de pulsation  $\nu$ , de fréquence  $\omega$ , et de longueur d'onde  $\lambda$  ces différentes quantités sont reliées entre elles par :

$$E = h\nu = \hbar\omega = \frac{hc}{\lambda} \quad (2)$$

Comme le potentiel chimique du gaz des photons est nul

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = \mu = 0 \quad (3)$$

L'expression du nombre moyen des photons devient

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_i}{k_B T}\right) - 1} \quad (4)$$

**La loi de Planck généralisée**

La distribution de Bose-Einstein déformée s'écrit dans le cadre de la statistique de Kaniadakis sous cette forme :

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp_{\kappa} \left( \frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T} \right) - 1} \quad (5)$$

A partir de laquelle nous avons établie les expressions des propriétés thermodynamiques que nous explicitons dans ce qui suit.

### Les grandeurs thermodynamiques du corps noir dans le cadre de statistique de Kaniadakis

Il est intéressant de revoir les propriétés thermodynamiques du corps noir dans le contexte de la kappa statistique où l'énergie du rayonnement, l'énergie libre et la pression, sont données respectivement par les expressions suivante

$$E_{\kappa} = \frac{V\hbar}{\pi^2 C^3} \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^4 J_3^{\kappa}(0) \quad (6)$$

$$F_{\kappa} = \frac{-V(k_B T)^4}{3\pi^2 C^3 \hbar^3} J_3^{\kappa}(0) \quad (7)$$

$$p_{\kappa} = \frac{(k_B T)^4}{3\pi^2 C^3 \hbar^3} J_3^{\kappa}(0) \quad (8)$$

Où les  $J_n^{\kappa}(t)$  sont définis par :

$$J_n^{\kappa}(t) = \int_0^{\infty} \frac{x^n dx}{\exp_{\kappa}(x+t) - 1} \quad (9)$$

Nous avons ainsi rétablie les expressions de l'entropie et la chaleur spécifique à volume constant

$$S_{\kappa} = \frac{4Vk_B^4}{3\pi^2 C^3 \hbar^3} J_3^{\kappa}(0) T^3 \quad (10)$$

$$C_V^{\kappa} = \frac{4Vk_B^4}{3\pi^2 C^3 \hbar^3} J_3^{\kappa}(0) T^3 \quad (11)$$

Notons que l'équation de l'énergie peut s'écrire dans le contexte de la  $\kappa$ -statistique sous cette forme

$$E_{\kappa} = F_{\kappa} + TS_{\kappa} \quad (12)$$

Ce qui montre l'invariance de cette dernière par rapport à la statistique usuelle de Boltzmann Gibbs. Il est important de noter que l'équation d'état est restée aussi invariante dans la  $\kappa$ -statistique de Kaniadakis.

$$p_{\kappa} V = \frac{1}{3} E_{\kappa} \quad (13)$$

### Conclusion

En conclusion, nous avons reconsidéré et généralisé les quantités thermodynamiques du rayonnement du corps noir dans le cadre de la théorie des  $\kappa$ -statistiques. En outre, les effets de la  $\kappa$ -statistique de Kaniadakis sur ces grandeurs thermodynamiques généralisées ont été mis en évidence. L'énergie du rayonnement généralisée, l'énergie libre, l'entropie, la pression et la chaleur spécifique ont été rétablie dans le formalisme de la  $\kappa$ -statistique. Malgré la grande sensibilité de ces grandeurs thermodynamiques généralisées, nous montrons que l'équation d'état reste invariante. Dans ce travail nous avons montré qu'en augmentant la valeur de  $|\kappa|$ , le rayonnement du corps noir émet plus d'énergie que le rayonnement standard de la loi de Planck. De plus, les effets des statistiques de Kaniadakis déformées montrent une grande sensibilité aux hautes températures. Notons qu'en mesurant des quantités macroscopiques, on peut avoir des informations sur les conditions microscopiques sous-jacentes, qui sont expérimentalement beaucoup plus difficiles à obtenir.

### Références

- [1] C. Tsallis, F. C. SàBarreto et E. D. Loh, Phys. Rev. E 52, 1447 (1995).
- [2] C. Tsallis, J. Stat. Phys. 52, 479 (1988).
- [3] I. Lourek, M. Tribeche, Phys. Lett. A 381 (2017) 452-456.
- [4] G. Kaniadakis, Physica A 296 (2001) 405.

## CO5 - CPCQ 2017

## SOURCE PLASMA MICRO-ONDE COAXIALE APPLIQUEE A LA DECONTAMINATION DES EPICES.

A. Kais\*, J. Lo, C. Muja, L. Therese and Ph. Guillot

Laboratoire Diagnostics des Plasmas Hors Equilibre, Université de Toulouse, INU Champollion, Albi

\*abderrahmane.kais@univ-jfc.fr

## Résumé

Dans ce travail, l'efficacité biocide d'une source plasma micro-onde basse pression est étudiée. Dans un premier temps, la source a été caractérisée en utilisant la sonde de Langmuir afin de définir les conditions de traitement. Ensuite, des échantillons de graines de poivre contaminés par une souche bactérienne (*E.coli*) ont été traités pendant différents temps d'exposition au plasma. Les courbes de survie sont tracées et commentées. La température du substrat pendant le traitement est mesurée et les puissances (fournie par le plasma et absorbée par le substrat) sont calculées. Une relation entre la puissance déposée par les ions positifs et la puissance absorbée par le substrat a été établie. En utilisant cette relation, une méthode de calcul de la densité des électrons connaissant leur température a également été démontrée.

**Mots clés :** plasma micro-onde, décontamination, sonde de Langmuir

## Introduction

Deuxième marché des produits d'assaisonnements, les épices et les herbes représentent une part de 13.6 milliards de dollars par an dans le marché mondial. Les conditions de transformation et de commercialisation de ces produits peuvent créer des situations favorables à la prolifération des micro-organismes. Sans traitement, la multiplication de ces micro-organismes réduit la durée de vie des produits, et dans le pire des cas, provoque de graves maladies. Récemment, des études ont montré la possibilité d'inactivation endosporique par plasma [1]. Toutefois, compte tenu de la nécessité de traiter en grands volumes dans les processus industriels, le plasma utilisé devrait offrir un traitement uniforme en surface et en volume. Une des solutions consiste à utiliser des sources plasma micro-onde de type coaxial et envisager leur utilisation en réseau de matrices à deux ou trois dimensions [2].

## Matériels et méthodes

L'étude a été menée dans une enceinte sous vide schématisée sur la Fig. 1a-1b. La source est alimentée par un générateur micro-onde (Solid State Generator) d'une fréquence de 2,45 GHz, dans une gamme de pression allant de 10 à 100 Pa. Un spectromètre optique (Avaspec 2048-2, Avantes), un thermocouple de type K et une double sonde de Langmuir (Impedans Ltd) ont été utilisés. Les mesures obtenues donnent accès à : l'émission optique, la température et la densité électroniques, et la température de traitement.

L'étude a été conduite dans trois mélanges gazeux [Ar-O<sub>2</sub> (10%), He-O<sub>2</sub> (2%) et l'air]. L'efficacité biocide a été évaluée sur des graines de poivre contaminées par une suspension d'*Escherichia coli*. Une comparaison entre les taux de survie obtenus (Fig. 2) et les conditions plasma a été présentée et discutée.

## Remerciements

Ce travail a été cofinancé par la Région Midi-Pyrénées.

## Références

- [1] D. Butscheret *al*, *Food Control*, **60**, 636, (2016).  
 [2] A. Lacoste *et al*, *Plasma Sources Science and Technol.* **11**, 407, (2002)

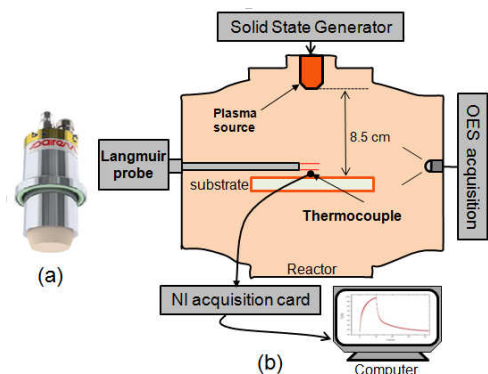


Fig. 1: (a) Source, (b) dispositif expérimental

## CO6 - CPCQ 2017

## ANALYSE DES SIGNAUX DE PHOTO-DETACHEMENT POUR LE DIAGNOSTIC DES PLASMAS ELECTRONEGATIFS.

N. Oudini<sup>a\*</sup> A. Bendib<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire des plasmas de décharges, Centre de Développement des Technologies Avancées, Cité du 20 Aout BP 17 Baba Hassen, 16081 Algiers, Algeria.

<sup>b</sup>Laboratoire Electronique Quantique, Faculté de Physique, USTHB, El Alia BP 32, Bab Ezzouar 16111, Algiers, Algeria.  
[noudini@cdta.dz](mailto:noudini@cdta.dz)

**Résumé**

Le photo-détachement des ions négatifs induit par une impulsion laser (Laser pulse induced Photo-Detachment:LPD) combiné à une sonde Langmuir (Langmuir Probe:LP) a été introduit pour diagnostiquer les plasmas électronégatifs. Cette technique utilise une impulsion laser pour convertir les ions négatifs en paires électron-atome ainsi qu'une sonde de Langmuir qui mesure l'évolution temporelle du courant de saturation électronique (signal LPD). Dans ce travail, nous présentons un nouveau modèle pour l'analyse des signaux de LPD afin d'améliorer la précision des mesures d'électronégativité et d'étendre cette technique pour mesurer la température électronique ainsi que la densité des espèces chargées. Ce modèle analytique est corroboré par des simulations particulières (Particle-In-Cell) de la réponse du plasma électronégatif à l'impulsion laser.

**Mots clés / Keywords :** ions négatifs, plasmas électronégatifs, diagnostic des plasmas, photo-détachement induit par laser et sonde de Langmuir

**1. Introduction**

Les plasmas électronégatifs sont impliqués dans une variété d'applications technologiques, telles que le traitement de surface [1], la fusion thermonucléaire [2] et la propulsion électrique [3]. De ce fait, le diagnostic de ces plasmas est primordial pour l'optimisation des applications précitées. Parmi les méthodes consacrées à mesurer l'électronégativité  $\alpha = n_-/n_e$  ( $n_-$ : densité d'ions négatifs et  $n_e$ : densité électronique), le photo-détachement des ions négatifs induit, par une impulsion laser, combiné à une sonde Langmuir est probablement la technique la plus utilisée [4]. Le rôle de l'impulsion laser est de convertir les ions négatifs en paires électron-atome, alors que la sonde de Langmuir, située au centre de la région éclairée et polarisée positivement par rapport au potentiel du plasma, enregistre l'évolution temporelle du courant de saturation électronique. Malheureusement, le modèle analytique utilisé pour le traitement du signal de photo-détachement n'est pas suffisamment réaliste pour remonter à des mesures précises de l'électronégativité [5-7].

Le but de ce travail est de développer un nouveau modèle analytique pour déterminer les paramètres du plasma électronégatifs à partir des signaux LPD. La validité du modèle est confirmée par une expérience numérique réalisée via un modèle particulière [8].

**Références**

- [1] D. J. Economou, Appl. Surf. Sci., **253**, 6672 (2007).
- [2] F. Taccogna *et al.*, IEEE Trans. Plasma Sci. **36**, 1589 (2008).
- [3] A. Aanesland *et al.*, J. Phys: Conf. Ser. **162**, 012009 (2009).
- [4] M. Bacal, Rev. Sci. Instrum., **71**, 3981, (2000).
- [5] N. Oudini *et al.*, Phys. Plasmas **21**, 063515 (2014).
- [6] N. Oudini *et al.*, Phys. Plasmas **22**, 073509 (2015).
- [7] N. Sirseet *et al.*, Plasma Sources Sci. Technol. **25**, 04LT01 (2016).
- [8] N. Oudini *et al.*, Appl. Phys. Lett. **109**, 124101 (2016).



## CO7 - CPCQ 2017

## SYNTHÈSE, PROPRIÉTÉS STRUCTURALES ET MICROSTRUCTURALES DES NANOSTRUCTURES DE CoNi ELABORÉES PAR VOIE HYDROTHERMALE.

A. Bensouilah<sup>a,b</sup>, A. Guittoum<sup>b</sup>, M. Hemmous<sup>b</sup>, D. Martínez-Blanco<sup>c</sup>, Pedro Gorria<sup>d</sup>, J.A. Blanco<sup>e</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique des Matériaux, USTHB, Alger, Algérie

<sup>b</sup>CRNA, 02 Bd Frantz Fanon, Alger, Algérie

<sup>c</sup>SCTs, University of Oviedo, EPM, 33600 Mieres, Spain

<sup>d</sup>Department of Physics & IUTA, EPI, University of Oviedo, 33203 Gijón, Spain

<sup>e</sup>Department of Physics, University of Oviedo, Calvo Sotelo St., 33007 Oviedo, Spain  
amina.bensouilah@gmail.com

### Résumé

Des nanostructures de CoNi ont été synthétisées par voie hydrothermale à faible temps et température de recuit (100°C, 2h). La synthèse a été effectuée sans surfactant, ni agent de nucléation et aussi sans l'assistance d'un champ magnétique externe. Une série d'échantillons a été élaborée en faisant varier la concentration de NaOH. La structure et la microstructure des échantillons élaborés ont été caractérisées par la diffraction des rayons X (DRX) et la microscopie électronique à balayage (MEB). Les images MEB montrent que l'augmentation de la concentration de NaOH conduit à des nanostructures en sphères de morphologie plus homogène. L'affinement Rietveld des spectres DRX montrent la coexistence des deux phases cubique à faces centrées (cfc) et hexagonale compacte (hcp). La variation des paramètres structuraux (taille moyenne des grains et paramètre de maille) en fonction de la concentration de NaOH sera discutée.

**Mots clés :** Nanostructures de CoNi, voie hydrothermale, morphologie, propriétés structurales.

### Introduction

La synthèse des nanostructures métalliques binaires par voie de chimie douce, plus particulièrement la méthode hydrothermale, a suscité l'intérêt de beaucoup de chercheurs et a fait l'objet de plusieurs publications dans le domaine. Cet intérêt est justifié par la pluralité de paramètres de synthèses qu'offre cette méthode et qui permettent de contrôler les propriétés finales des matériaux élaborés. Dans ce travail, nous nous proposons d'étudier l'effet de la concentration NaOH sur les propriétés structurales et microstructurales des nanostructures de CoNi élaborées par voie hydrothermale.

### Variation de la morphologie en fonction de la concentration de NaOH

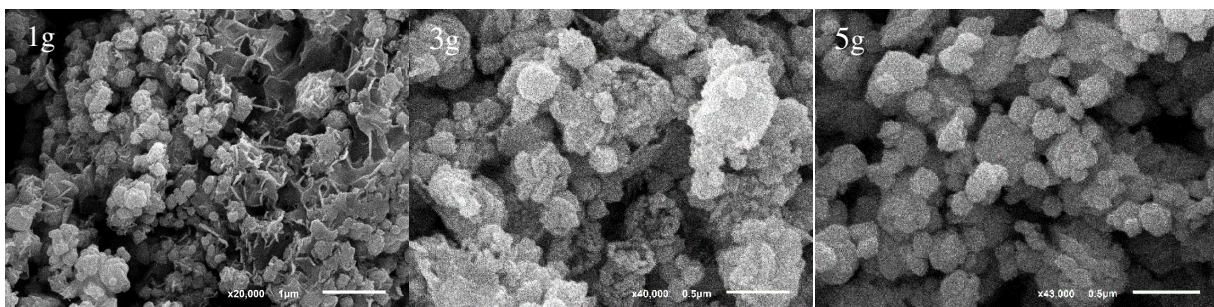


Figure 1: Variation de la morphologie des poudres de CoNi en fonction de la concentration de NaOH

### Conclusion

Nous avons synthétisés, par voie hydrothermale, et pour différentes concentrations de NaOH, des nanostructures de CoNi purs. L'étude structurale et microstructurale a montré que la concentration de NaOH est un paramètre clé dans le contrôle de la morphologie des nanostructures de CoNi.



## CO8 - CPCQ 2017

FIRST-PRINCIPLES STUDY OF THE STRUCTURAL, VIBRATIONAL, PHONON AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE COMPLEX  $K_2PtCl_6$  STRUCTURE HYDRIDES  $Ca_2OsH_6$ .Ouassila Boudrifa<sup>a,\*</sup>, Abdelmadjid Bouhemadou<sup>b</sup><sup>a,b</sup>Laboratory for Developing New Materials and their Characterization, University of Setif 1, 19000 Setif, Algeria.<sup>a</sup> Research Center In Industrial Technologies CRTI, P.O. Box 64, Cheraga 16014, Algiers - Algeria.\* [was.boud@gmail.com](mailto:was.boud@gmail.com)**Abstract**

We have presented a full first-principles study of the structural, phonon and vibrational properties for  $Ca_2OsH_6$  compound at the GGA-PBE level. The calculations are performed using the plane-wave pseudopotential method, density functional perturbation theory and the quasiharmonic approximation implemented in the CASTEP code. In particular, our theoretical lattice parameters obtained using the GGA-PBE to include the exchange-correlation functional are in good agreement with experiment. To our knowledge, there no experimental data or theoretical calculation for the study of frequency modes of NaCl structure of the studied hydrides for comparison.

**Keywords:** ab initio, hydrides, structural, phonon and vibrational properties.

**Introduction**

In the last five years, the study of metal hydrides  $A=Mg, Ca, Sr, Ba, Eu, Sm$ ;  $T=Fe, Ru$ , has expanded enormously due to the potential technology importance of these class materials in hydrogen based energy conversion schemes. This class of hydrides has been suggested as a source of important applications in semiconductor electronics, such as transparent conducting materials [1], photovoltaics [2], and optoelectronics [3].

**Structural and vibrational properties**

The determination of the equilibrium structure is the first step and essential in any calculation, the care which is taken to him will strongly condition the quality of the ulterior analysis. We note that our calculated results by GGA96 are slightly smaller than the experimental values; this means that the experimental data are measured at room temperature whereas our calculated results are predicted at zero temperature. Under hydrostatic pressure effect, the H atom positional parameter has a linear variation with upward bowing. The calculated unit cell volumes at fixed values of applied hydrostatic pressure in the range 0–15GPa were fitted by the fourth equations of state of Birch Murnaghan, Birch, Murnaghan and Vinet. To ensure the thermodynamic stability of  $Ca_2OsH_6$  in its cubic structure, we calculated its formation energy and the cohesive energy with GGA PBE. We found that this material is energetically stable. Under hydrostatic pressure effect, the H atom positional parameter has a linear variation. No imaginary phonons frequency is observed in the whole Brillouin zone suggested by the phonons curves dispersion and PDOS in figure 1, indicating the dynamical stability of Fm-3m phases for these compounds.

Fig 2 depicts the shape of phonons modes for four materials. The arrows present the direction of atomic vibration for  $Ca_2OsH_6$ . Also the length of the arrow is proportional to the contribution of each atom. The irreducible representations of normal modes at the Brillouin zone center ( $\Gamma$ ) can be decomposed as:

$$\Gamma_{ac}^{Ca_2OsH_6} = E_u(S) + A_{2u}(S)$$

$$\Gamma_{opt}^{Ca_2OsH_6} = 3E_u(IR) + 3A_{2u}(IR) + T_u(IR) + 3T_g(R) + E_g(R) + A_{1g}(R)$$

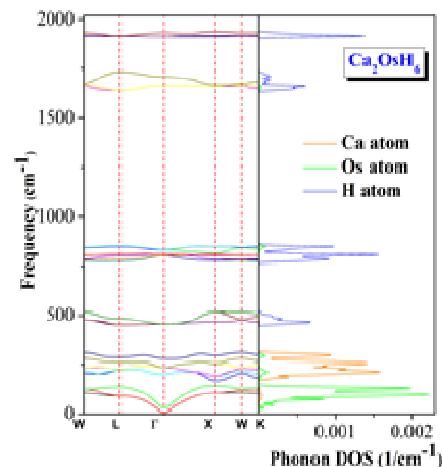


Fig. 1: Calculated phonons dispersion curves, total and partial phonons density of states.

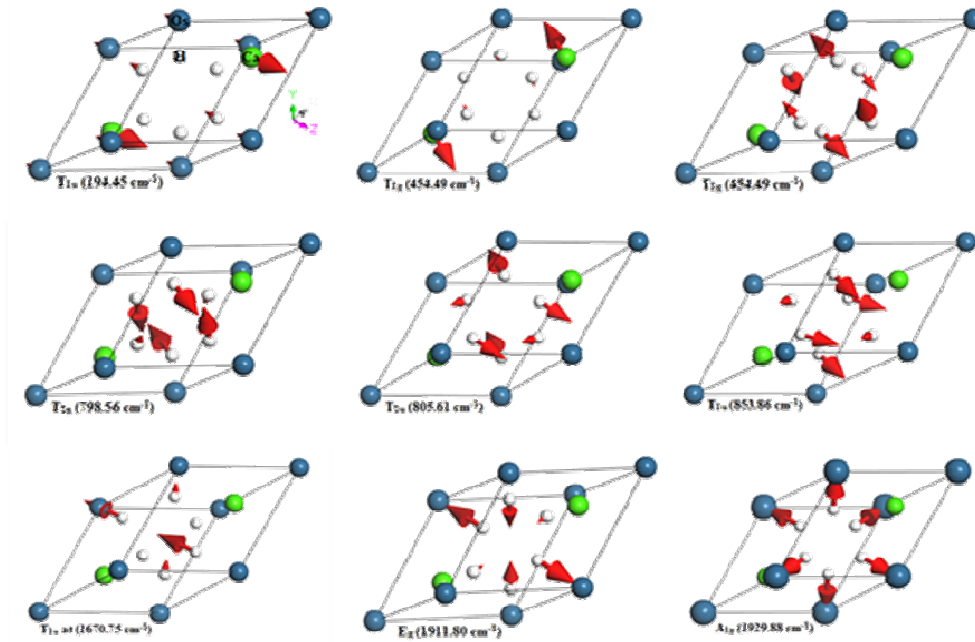


Fig. 2: Schematic representation of optical phonon modes in  $\text{Ca}_2\text{OsH}_6$ , with atomic displacement at the  $\Gamma$  point (arrows) and their phonon frequencies in  $\text{cm}^{-1}$  given in parentheses

### Conclusion

The structural parameters of  $\text{Ca}_2\text{OsH}_6$  compound, calculated after geometry optimization, such as lattice constant and free internal parameter show a good agreement with the experimental and theoretical data. The phonon dispersion relations, phonon density of states, Born effective charge, and optical phonon frequencies at the G point of the Brillouin zone of this compound as well as their infrared and Raman active mode frequencies have been predicted using linear response theory for the first time. Phonon dispersion relations indicate that  $\text{Ca}_2\text{OsH}_6$  compound are dynamically stable.

### References

- [1] S.Zh. Karazhanov, A.G. Ulyashin, P. Ravindran, P. Vajeeston, Euro. Phys. Lett. 82 (2008) 17006pp 1-5.
- [2] S.Zh. Karazhanov, A.G. Ulyashin, Euro. Phys. Lett. 82 (2008) 48004pp 1-6.
- [3] S.Zh. Karazhanov, A.G. Ulyashin, P. Ravindran, P. Vajeeston, Phys. Status Solidi (a) 2004 (2007) 3538 pp 1-8.

## CO9 - CPCQ 2017

SYNTHÈSE, PROPRIÉTÉS STRUCTURALES, MICROSTRUCTURALES ET MAGNÉTIQUES DES NANOSTRUCTURES HIÉRARCHIQUES DE  $\text{Ni}_{75}\text{Fe}_{25}$  ELABORÉES PAR VOIE HYDROTHERMALE.

A. Bouremana<sup>a,b</sup>, A. Guittoum<sup>b</sup>, M. Hemmous<sup>b</sup>, D. Martínez-Blanco<sup>c</sup>, Pedro Gorria<sup>d</sup>, J.A. Blanco<sup>e</sup>, N. Benrekaa<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Physique des Matériaux, Faculté de physique, USTHB, Alger, Algérie

<sup>b</sup>CRNA, 02 Bd Frantz Fanon, Alger, Algérie

<sup>c</sup>SCTs, University of Oviedo, EPM, 33600 Mieres, Spain

<sup>d</sup>Department of Physics & IUTA, EPI, University of Oviedo, 33203 Gijón, Spain

<sup>e</sup>Department of Physics, University of Oviedo, Calvo Sotelo St., 33007 Oviedo, Spain

\* [ahmed.bouremana@gmail.com](mailto:ahmed.bouremana@gmail.com)

### Résumé

Nous avons étudié l'effet de la concentration du NaOH sur la structure, la microstructure et les propriétés magnétiques des nanostructures hiérarchiques de  $\text{Ni}_{75}\text{Fe}_{25}$  élaborées par voie hydrothermale. L'analyse des diffractogrammes RX indique une bonne cristallinité des échantillons avec une taille des cristallites de l'ordre du nanomètre. Nous avons montré que la concentration de NaOH influe sur la taille des cristallites. L'étude de la morphologie a montré que la concentration de NaOH est un facteur important pour le contrôle de la taille et la forme des nanostructures de  $\text{Ni}_{75}\text{Fe}_{25}$ . Les cycles d'hystérésis, relatifs à tous les échantillons, sont typiques des matériaux ferromagnétiques. La forme des nanostructures de NiFe influe sur les valeurs du champ coercitif.

**Mots clés :** Matériaux magnétique, Nanostructures, Diffraction par des poudres, MEB, Hystérésis, Voie hydrothermale.

### Introduction

De nos jours, Plusieurs travaux de recherches ont été effectués dans le but d'étudier les propriétés physiques des nanomatériaux d'alliage à base de Ni ayant différentes morphologies et élaborés par voie hydrothermale. Il en ressort de la littérature que le choix adéquat des paramètres de synthèse a une grande influence sur la taille et la morphologie finale des alliages de NiFe. En effet, l'élaboration de nanomatériaux avec une composition chimique, structure cristalline, taille et morphologie des particules contrôlables, s'est révélée être un défi majeur pour les chercheurs en nanotechnologie.

### Effet de la quantité de NaOH sur la structure cristalline, la microstructure, la morphologie et les propriétés magnétiques d'une série d'échantillons de $\text{Ni}_{75}\text{Fe}_{25}$ .

Nous avons réussi la synthèse, par voie hydrothermale, des nanostructures hiérarchiques de  $\text{Ni}_{75}\text{Fe}_{25}$  pour différentes quantités de NaOH (1 à 5 g). L'analyse des spectres DRX montre que les nanoparticules de  $\text{Ni}_{75}\text{Fe}_{25}$  possèdent une structure cubique à faces centrées. Le paramètre de maille ne change pas avec la quantité de NaOH. La taille des cristallites est de l'ordre du nanomètre. L'analyse EDX révèle que, pour tous les échantillons, la composition chimique est très proche du rapport initial (3 :1) de Ni et Fe. Les micrographies MEB indiquent que les particules se présentent comme des entités individuelles ayant une morphologie qui change avec la variation de la quantité de NaOH. Les cycles d'hystérésis, sont typiquement ceux des systèmes ferromagnétiques. Les valeurs obtenues de  $M_s$  sont plus faibles que les valeurs du NiFe massif. Les grandes valeurs du champ coercitif des échantillons ont été obtenues pour des particules se présentant sous forme de flocons de neige et des feuilles de pin. Ces valeurs élevées peuvent être attribuées à la forte anisotropie de la forme des particules par rapport à celles ayant une forme sphérique.

### Conclusion

L'étude de la structure cristalline, la microstructure, la morphologie et les propriétés magnétiques a montré que la quantité de NaOH est être un paramètre clé dans le contrôle de la morphologie et du champ coercitif des nanostructures hiérarchiques de  $\text{Ni}_{75}\text{Fe}_{25}$ .

## CO10 - CPCQ 2017

PROPRIETES STRUCTURALES ET MAGNETIQUES DE NANOCOMPOSITES Co/SiO<sub>2</sub>.Nihad Douas<sup>a\*</sup>, Nassira Keghouche<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire Microstructure et Défauts Dans les Matériaux, Université Frères Mentouri, Constantine, Algérie\* [douas.nihad@gmail.com](mailto:douas.nihad@gmail.com)**Résumé**

Ce travail traite des nanocomposites Co/SiO<sub>2</sub> préparés par imprégnation suivie d'une calcination, puis d'une réduction sous H<sub>2</sub> à 350°C. L'étude structurale par DRX des échantillons révèle la présence de siliciure de cobalt Co<sub>2</sub>Si après imprégnation, de la phase oxyde Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> après calcination et de Co nanométrique après réduction. Les mesures magnétiques par VSM à 300 K montre un comportement superparamagnétique des nanoparticules de cobalt.

**Mots clés:** nanoparticules, Co<sub>2</sub>Si, Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, Co, superparamagnétique.

**Introduction**

La matière à l'état nanométrique attire une attention croissante des chercheurs en raison de ses propriétés spécifiques, différentes de celles de l'état massif. Plus particulièrement, les nanoparticules de cobalt présentaient un intérêt considérable grâce à leur grande richesse de comportement. Ils trouvent des applications dans divers domaines tels que : l'enregistrement magnétique, médecine [1-2] ( imagerie par résonance magnétique et traitements du cancer) et l'énergie ( stockage d'énergie électrique [1] et catalyse [3] ).

**Résultats**

L'objet de ce travail est l'étude des propriétés morphologiques, structurales et magnétiques des nanoparticules de Co greffées sur une poudre de silice. Les échantillons sont préparés par échange ionique précurseur métallique/SiO<sub>2</sub>, suivie d'une calcination à diverses températures (T = 100, 350, 500, 700°C). Les échantillons calcinés à 350°C sont réduits sous flux de H<sub>2</sub> à la même température. L'étude structurale des échantillons après chaque étape de préparation a été effectuée par diffraction des rayons X et l'étude magnétique des nanoparticules à été faite par VSM.

Après imprégnation, le spectre DRX de la poudre Co<sup>2+</sup>/SiO<sub>2</sub> montre la formation de la phase Co<sub>2</sub>Si de structure orthorhombique. Après calcination, une nouvelle phase oxyde Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> se forme. Celle-ci a une structure cubique. Après réduction, le spectre DRX révèle la présence de phase Co hexagonal. La taille, estimée par la relation de Sherrar, est de l'ordre de 6 nm. Les cycles d'hystérésis à 300 K montrent un comportement superparamagnétique avec une aimantation à saturation de 17 Am<sup>2</sup>/kg.

**Conclusion**

En conclusion, les conditions expérimentales de préparation de composites Co/SiO<sub>2</sub> ont été optimisées. Des nanoparticules de cobalt métallique de 6nm ont été obtenues. Celles-ci présentent un comportement superparamagnétique à 300 K et se prêtent bien à des applicaions médicales.

**Références**

- [1] Roger Rumbu, Métallurgie Extractive du Cobalt, 2RA-Edition, March 2014. 240-246.  
 [2] Lippard, Stephen, Metals in Medicine, Bioinorganic Chemistry, University Science Books, 1994. 505-583.  
 [3] Y.Li, X.Qin, T.Wang, L.Ma, L.Chen, N.Tsubaki, Fischer Tropsch synthesis from H<sub>2</sub>-deficient biosyngas over Mn add Co/SiO<sub>2</sub> catalysts, Fuel 136 (2014) 130-135.

## CO11 - CPCQ 2017

AMÉLIORATION DE LA PHOTOACTIVITÉ DES NANOTUBES DE  $\text{TiO}_2$  DANS LE VISIBLE PAR INTRODUCTION D'ÉTATS DE SURFACE ( $\text{Ti}^{3+}$ ).

L. Aïnouche, L. Hamadou, L. Rekeb, A. Kadri, N. Benbrahim

Laboratoire de Physique et Chimie des Matériaux LPCM, Université de Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou UMMTO B.P. 17, Tizi-Ouzou 15000, Algérie.

## Résumé

Cette étude a pour objectif la sensibilisation des nanotubes de dioxyde de titane (TiNTs) par l'introduction d'états monoénergétiques ( $\text{Ti}^{3+}$ ) dans la bande interdite. La présence de ces niveaux énergétiques est un facteur déterminant dans l'amélioration de la photoactivité des TiNTs dans le spectre visible. Pour ce faire, nous avons adopté une stratégie simple, fiable et des moins coûteuses pour produire ces états de défauts. Cette stratégie consiste en la réduction des TiNTs. Cette réduction correspond à la capture, par les ions  $\text{Ti}^{4+}$  de  $\text{TiO}_2$ , d'électrons photogénérés par un rayonnement UV en produisant des  $\text{Ti}^{3+}$ , peuplant ainsi des états localisés dans la bande interdite de l'oxyde.

Les TiNTs ont été obtenus par anodisation électrochimique à différentes tensions (20, 30, 40, 50 et 60 Volts) dans de l'éthylène glycol/ $\text{NH}_4\text{F}/\text{H}_3\text{PO}_4/\text{H}_2\text{O}$ . Nous avons utilisé principalement la spectroscopie d'impédance électrochimique pour évaluer les capacités de ces états de surface ( $C_{SS}$ ) lorsque les TiNTs sont en contact avec un électrolyte. Pour les mesures photoélectrochimiques, un laser He-Ne (632 nm) a été utilisé comme source de lumière visible. L'intensité de la lumière incidente a été ajustée à  $1 \text{ mW}/\text{cm}^2$ .

L'effet du potentiel d'anodisation sur la présence d'états de surface a été étudié sous rayonnement UV. En effet, une analyse quantitative a été établie par des mesures de capacités. Ces mesures ont bien permis de mettre en évidence la présence de ces états de surface dans la bande interdite (Figure 1). Il a été constaté que la localisation de ces états aussi bien que leur densité dépendent fortement des caractéristiques géométriques des TiNTs. Une large distribution de ces états s'étalant entre 0.17 et 0.35 eV en dessous du bord de la bande de conduction a été enregistrée et le rôle notable de ces états a été considéré. Des photocourants supérieurs à  $16 \text{ mA cm}^{-2}$  ont été enregistrés sur les TiNTs élaborés à 50V (Figure 2) et l'efficacité de la photoconversion a atteint les 4% aux environs de  $1V/ECS$  [1].

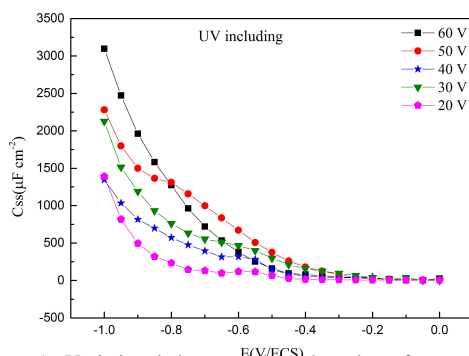


Figure 1 : Variation de la capacité des états de surface en fonction du potentiel appliqué des TiNTs synthésés aux différentes tensions d'anodisation sous illumination UV

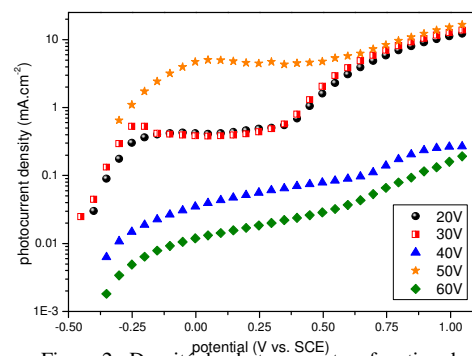


Figure 2 : Densité de photocourant en fonction du potentiel appliqué des TiNTs synthésés aux différentes tensions d'anodisation sous lumière visible après prétraitement UV

## Référence

[1] L. Aïnouche, L. Hamadou, A. Kadri, N. Benbrahim, D. Bradai *Solar Energy Materials & Solar Cells* 151 (2016) 179–190.

## CO12 - CPCQ 2017

## LA DEGRADATION PHOTOCATALYTIQUE DES POLLUANTS ORGANIQUES PAR LES NANOMATERIAUX A BASE D'OR.

H. Chaker<sup>a\*</sup>, L. Chérif<sup>a</sup>, S. Khalouani<sup>b</sup>, S. Fourmentin<sup>b</sup>, A. Bengueddach<sup>c</sup>.

<sup>a</sup>. Laboratoire de catalyse et synthèse en chimie organique, université de Tlemcen, Algérie

<sup>b</sup>. Université Lille de France, ULCO 59140 Dunkerque, France

<sup>c</sup>. Laboratoire de Chimie des Matériaux, Université d'Oran, BP 1524, 31100 Oran, Algérie

\* [hanane.chaker@hotmail.fr](mailto:hanane.chaker@hotmail.fr)

### Résumé

La protection de l'environnement est devenue un enjeu politique et économique majeur, tous les pays du monde sont concernés par la sauvegarde en eau douce. La consommation et les besoins en eau augmentent avec le développement de nos sociétés. Selon l'ONU une crise d'eau affectera près de la moitié de la population d'ici 2030. Par conséquent, plusieurs traitements des eaux usées ont été proposés dans la littérature afin de multiplier les ressources en eau douce. Parmi ces traitements on trouve la photocatalyse, qui s'est imposée avec son pouvoir autonettoyant. Le but de notre travail est d'étendre l'activité photocatalytique dans le domaine de visible, par le dopage de TiO<sub>2</sub> mésoporeux à l'or à trois différentes teneurs (0,5, 1,5 et 3%) en poids massique. Les catalyseurs préparés ont été testés dans la dégradation photocatalytique d'une molécule modèle qui est le méthyle orange. Le catalyseur 3%Au/TiO<sub>2</sub> est un candidat potentiel dans la dégradation des colorants azoïques (MO) sous les rayons des UVC et de la lumière visible d'un simulateur solaire.

**Mots clés :** Nanomatériaux, Photocatalyse, TiO<sub>2</sub>, Au, MO.

### Introduction

L'industrie, qui est une très grande consommatrice d'eau, génère une pollution très importante dans le milieu aquatique avec des rejets fortement contaminés par des polluants organiques. Le traitement de ces eaux reste un défi majeur. Le fait que ces polluants ne soient pas facilement biodégradables en raison de la complexité de leur structure chimique et de la présence de cycles aromatiques, implique que les effluents aqueux contenant ces polluants nécessitent un traitement spécifique vu l'impact négatif qu'ils causent dans les milieux naturels. Les traitements conventionnels (adsorption sur charbon actif, procédés membranaires, coagulation-floculation, oxydations chimiques...) ont l'inconvénient de transférer la pollution d'une phase aqueuse vers une nouvelle phase, et conduisent pour la plupart à la formation de boues concentrées. Parmi toutes les techniques de traitement possibles des effluents aqueux contaminés, les processus d'oxydation avancés (POA) apparaissent comme des procédés de choix car ils permettent d'obtenir une minéralisation totale des polluants en association avec une diminution de la toxicité globale de l'effluent. Un de ces procédés d'oxydation est la photocatalyse à base de TiO<sub>2</sub> en milieu hétérogène ; le dioxyde de titane est le semi-conducteur le plus approprié pour la photocatalyse dans un but de dépollution grâce à sa stabilité photochimique, son inertie chimique et biologique.

### Photodégradation du méthyle orange par des catalyseurs à base d'or supportés sur oxyde de titane mésoporeux (Au/TiO<sub>2</sub>)

L'activité photocatalytique des catalyseurs à base d'or préparés par dépôt précipitation à l'urée a été évaluée sous UVC et sous simulateur solaire. La figure 1 montre la cinétique de photodégradation de MO en présence de TiO<sub>2</sub> mésoporeux, P25 et Au/TiO<sub>2</sub> à différentes teneurs en or sous irradiation UVC et sous irradiation de la lumière d'un simulateur solaire. La figure 1 montre que la photodégradation du MO est exaltée en présence de Au et ceci d'autant plus que la teneur en Au est plus élevée. Mansoob Khan et al.[1] ont étudié la dégradation de deux colorants azoïques (le méthyle orange et le bleu de méthylène) et Sakthivel et al.[2] ont étudié la dégradation d'un colorant azoïque (Acid Green 16) en présence des nanoparticules d'Or supportées sur le TiO<sub>2</sub> ; en accord avec nos résultats, ils ont reporté que la présence de Au améliore l'activité photocatalytique de TiO<sub>2</sub>.

L'activité photocatalytique des échantillons sous irradiation UV et sous irradiation de la lumière d'un simulateur solaire varie selon l'ordre décroissant suivant:

$3\%Au/TiO_2 > 1,5\%Au/TiO_2 > 0,5\%Au/TiO_2 > TiO_2 > P25$ .

Il est à noter que pour tous les catalyseurs étudiés, la dégradation du MO est plus rapide sous irradiation UVC.

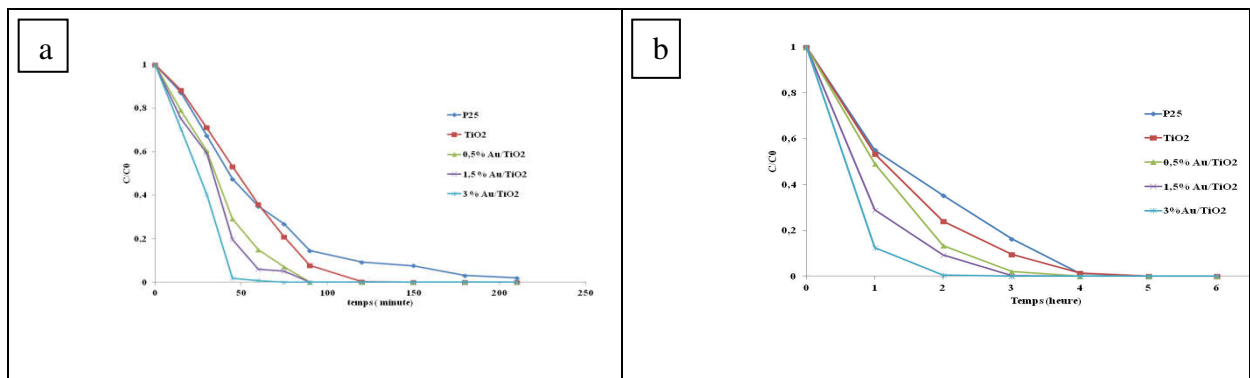


Fig.1: Photodégradation du MO en présence de  $TiO_2$  mésoporeux, P25 et les catalyseurs  $X\%Au/TiO_2$  par (a) UVC et (b) la lumière visible

### Conclusion

Les performances des catalyseurs  $Au/TiO_2$  dans la photodégradation du MO sous UVC et lumière visible dépendent de la teneur en métal ; l'amélioration de la photoréactivité de  $TiO_2$  après dopage est d'autant plus importante que la teneur en or est plus élevée .

Il ressort de cette étude que le catalyseur  $3\%Au/TiO_2$  préparé est un candidat potentiel pour la dépollution des eaux usées chargées de méthyle orange par photocatalyse solaire et les UVC.

### Références

- [1] M.M. Khan, J. Lee, M.H. Cho, Journal of Industrial and Engineering Chemistry 20 (2014) 1584-1590.  
 [2] S. Sakthivel, M.V. Shankar, M. Palanichamy, B. Arabindoo, D.W. Bahnemann, V. Murugesan, Water Research 38 (2004) 3001-3008.



## CO13 - CPCQ 2017

DIRECT GROWTH OF VO<sub>2</sub> NANOPATELETS ON GLASS AND SILICON BY PULSED LASER DEPOSITION TECHNIQUE.

Slimane Lafane<sup>a,b\*</sup>, Samira Abdelli-Messaci<sup>a</sup>, Smail Malek<sup>a</sup>, Guedouar Bendiba<sup>a</sup>, Mohamed Kechouane<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Division des Milieux Ionisés et Laser, Centre de Développement des Technologies Avancées, Algiers, Algeria

<sup>b</sup>Faculté de Physique, Université des Sciences et Technologies Houari Boumediene, Algiers, Algeria

\*slafane@cdta.dz

### Abstract

we have established a one step growth protocol of pulsed laser deposited VO<sub>2</sub> nanostructures with a high surface-to-volume ratio which can find a potential application in gas sensing devices. Successfully, catalyst free and dense VO<sub>2</sub> nanoplatelets were grown on glass and silicon substrates. The study of the metal-insulator phase transition using a four probe technique evidenced the effect of the substrate nature on the transition properties through its influence on the grain size, shape and density.

**Keywords:** VO<sub>2</sub> nanostructures, substrate nature, pulsed laser deposition, phase transition.

### Introduction

Vanadium dioxide (VO<sub>2</sub>) has attracted a lot of interest from several scientists because of its semiconductor-metallic transition (SMT) characteristic, since it discovered by Morin [1]. Nanostructured VO<sub>2</sub> becomes a relevant research field, because of its innovative applications [2]. In this context, we report the successful synthesis of free catalyst, high dense and highly (011) oriented VO<sub>2</sub> nanostructures, without any post-treatment, that were directly deposited.

### Microstructural and SMT transition properties

The obtained VO<sub>2</sub> platelets with a rectangular shape observed by SEM are displayed in fig. 1. While the platelets deposited on glass in an open structure show a high aspect ratio, the ones deposited on silicon are flattened along the substrate surface with a higher density but a limited aspect ratio. The higher transition performances concern the VO<sub>2</sub> films deposited on silicon which is very consistent with the high and relatively homogenous grain size observed on VO<sub>2</sub>/Si films [3].

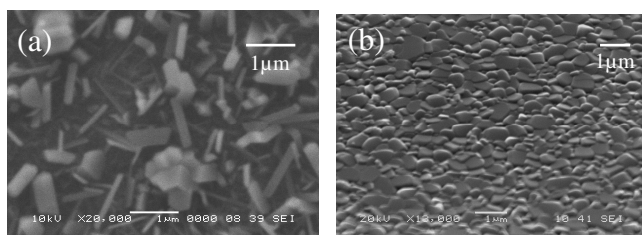


Fig. 1 : SEM micrographs of VO<sub>2</sub> films deposited on: (a) glass and (b) Si (100) substrates.

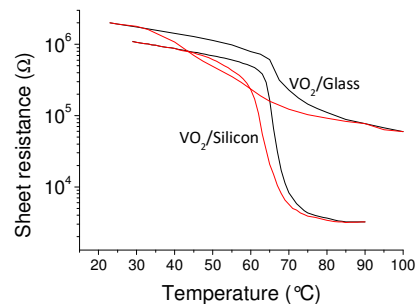


Fig. 2 : Thermal hysteresis of VO<sub>2</sub> thin film sheet resistance deposited on Si (100) and glass substrates.

### Conclusion

The substrate nature controls the size, the shape and the density of VO<sub>2</sub> nanoplatelets deposited by pulsed laser technique. The SMT characteristics are very sensitive to VO<sub>2</sub> films morphology.

### References

- [1] F.J. Morin, Phys. Rev. Lett. 3 (1959) pp 34-36.
- [2] E. Strelcov, Y. Lilach, A. Kolmakov, Nano Lett. 9 (2009) pp 2322-2326.
- [3] L. Wang, Y. Yang, J. Zhao, B. Hong, K. Hu, J. Peng, H. Zhang, X. Wen, Z. Luo, X. Li, C. Gao, J. Appl. Phys. 119, (2016) pp 145301.



## CO14 - CPCQ 2017

## ZnO/P-SI HETEROJUNCTION SOLAR CELLS, EXPERIMENTS AND SIMULATIONS.

Nora Ziani<sup>a\*</sup>, F. Bouaraba<sup>a</sup>, O. Boussoum<sup>a</sup>, M. S. Belkaid<sup>a</sup>, B. Damien<sup>b</sup>, M. Pasquinel<sup>b</sup>, R. Grus<sup>b</sup>, K.K.D. N'konou<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire des Technologies Avancées du Génie Electrique, Université Mouloud Mammeri de TiziOuzou, TiziOuzou, Algérie

<sup>b</sup> Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence, Université d'Aix Marseille, Marseille, France

\* [nziani14@gmail.com](mailto:nziani14@gmail.com)

### Abstract

ZnO/Si heterojunction solar cells were fabricated and investigated. In this structure ZnO plays a role as a transparent current spreading layer and rectifying junction with silicon (Si). Important aspects for the optimization of such induced junctions are addressed by means of numerical device simulations. Experimentally, ZnO film was deposited by direct-current (DC) magnetron sputtering on p-Si wafer to fabricate n-ZnO/p-Si heterojunctions. The silicon heterojunction solar cells were characterized by measuring the Quantum Efficiency External (EQE) and the current versus voltage (I-V) under a dark condition. We accompanied our experiments by simulations, considering special models (i.e., surface recombinations, interface traps, thermionic field emission tunneling model for carrier transport at the heterojunction etc) at the semiconductor-semiconductor interfaces. The electrical junction properties were investigated by I-V measurement, which reveals that the heterojunction shows rectifying behavior under a dark condition.

**Keywords:** ZnO, ZnO/p-Si, heterojunction, solar cells, I-V characteristics

### Introduction

The interest of zinc oxide (ZnO) has been growing. The existence of their two properties, electrical conductivity and transparency in the visible, making the ideal candidate for applications in photovoltaic and optoelectronics [1,2]. With a wide bandgap, high transparency and low resistivity material, it can be used as a window layer and simultaneously heterojunction partner for heterojunction based solar cells [3,4]. This double role of ZnO material in heterojunction solar cells offers some advantages such as an excellent blue light response, simple processing steps, low processing temperatures, and non toxicity virtue.

### Results

Fig. 1 displays results I-V shows current voltage graph under dark for ZnO/p-Si junction. The data show a clear rectifying behaviour for both measure.

### Conclusion

The proposed ZnO/p-Si based heterojunction solar cell shows great potential alternative from the viewpoint of performance efficiency, simple and low temperature processing steps and hence low cost candidate.

### References

- [1] E Fortunato, L. Raniero, L. Silva, A.G. Alves, A. Pimentel, P. Barquinha, H.A. Guas, L. Pereira, G.G. Alves, I. Ferreira, E. Elangovan and R. Martins, *Materials Letters*, 96, 237–239, 2013.
- [2] M. Berginski, J. Hüpkes, M. Schulte, G. Schöpe, H. Stiebig and B. Rech, *Journal of Applied Physics*, 101, 074903, 2007.
- [3] H. H. Afify et al., "Realization and Characterization of ZnO/n-Si Solar Cells by Spray Pyrolysis", *Egypt. J. Solids*, Vol. 28, No. 2, 2005, pp. 243-254.
- [4] Tingfang Yen et al., "Current transport in ZnO/Si heterojunctions for low-cost solar cells", 4th photovoltaic energy conversion conference, 2006, pp. 1653-1656.

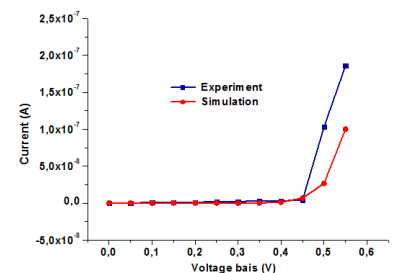


Fig. 2: I-V characteristic curve ZnO/p-Si heterojunction in dark.





## COMMUNICATIONS POSTERS





## P1 – CPCQ2017

SPECTROSCOPIC PROPERTIES AND JUDD-OFELT INTENSITY PARAMETERS OF Er<sup>3+</sup> DOPED OXYFLUORO-TELLURITE GLASSES.Samah Amrouch<sup>a,b,\*</sup>, Mohand Chalal<sup>b,c</sup>, Omar Lamrous<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud MAMMERRI Tizi-Ouzou, Algérie<sup>b</sup> Département de Physique, Faculté des Sciences, Université M'Hamed Bougara de Boumerdès(UMBB), Algérie<sup>c</sup> Laboratoire d'Electronique Quantique, Faculté de Physique, USTHB-Alger, Algérie\* [thiziri.samah@yahoo.com](mailto:thiziri.samah@yahoo.com)**Abstract**

Erbium doped oxyfluoro-tellurite glasses of molar compositions 65TeO<sub>2</sub>-20ZnO-10BaF<sub>2</sub>-(5-x)La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-xEr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 1 ≤ x ≤ 3, were prepared by conventional melting quenching method. Optical and spectroscopic properties of these glasses were characterized with using UV-Visible and NIR absorption spectroscopy. From absorption spectra the Judd-Ofelt parameters (Ω<sub>t</sub>, t = 2,4,6), transition probabilities, branching ratios of various transitions and their radiative lifetimes are calculated. The emission cross-section spectrum of the <sup>4</sup>I<sub>13/2</sub> → <sup>4</sup>I<sub>15/2</sub> transition of erbium is deduced by the application of McCumber theory and the gain cross section of this transition is reported. All results are compared to those of other glasses.

**Keywords:** Er<sup>3+</sup> doped tellurite glasses, spectroscopic properties. Judd-Ofelt parameters.

**Introduction**

Er<sup>3+</sup> doped tellurite glasses are promising host materials due to their important optical properties which make them suitable for application in photonic, such as broad band optical amplifier at 1.5 μm through the <sup>4</sup>I<sub>13/2</sub> → <sup>4</sup>I<sub>15/2</sub> transition [1,2]. Addition of La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> to tellurite glasses increases stability of the glasses against crystallisation [2]. In this work we report the optical and spectroscopic properties of 65TeO<sub>2</sub>-20ZnO-10BaF<sub>2</sub>-(5-x)La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-xEr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> glasses by applying the Judd-Ofelt analysis.

**Experimental results and Judd-Ofelt parameters calculation**

The UV-Visible and NIR absorption spectra of Er<sup>3+</sup> doped TZBF glasses are shown in Fig 1. Judd-Ofelt analysis is applied to calculate the oscillator strengths for electric dipole transition between |4fα[SL]J⟩ and |4fα'[S'L']J'⟩ states through the determination of phenomenological intensity parameters (Ω<sub>t</sub>, t = 2,4,6). The procedure is based on comparison between expressions for the theoretical line strength (S<sub>cal</sub>) which contain the Ω<sub>λ</sub> parameters, and the experimental line strength (S<sub>exp</sub>) determined from absorption spectra.

$$S_{cal} = \sum_{k=2,4,6} \Omega_k | \langle J' | U^{(k)} | J \rangle |^2, \quad (1)$$

$$S_{mes} = \frac{9n}{(n^2 + 2)^2} \left[ \frac{3hc(2J+1)}{8\pi^3 e^2 N} \int_{J \rightarrow J'} \alpha(\sigma) d\sigma - S_{md} \right], \quad (2)$$

with U<sup>(k)</sup> the reduced matrix element, N the concentration of ions /cm<sup>3</sup>, α(σ) the absorption coefficient in cm<sup>-1</sup>, σ the wave number, n the refractive index, c the celerity of light, m and e the mass and electric charge of an electron, S<sub>md</sub> the magnetic line strength.

**References**

- [1] A. Maaoui et al, Journal of Alloys and compounds 681 (2016) 115-123  
 [2] I. N. Sapian, M. I M Yusof, A. K. Yahya, Chalcogenide Letters, 11 (2014) 471-484

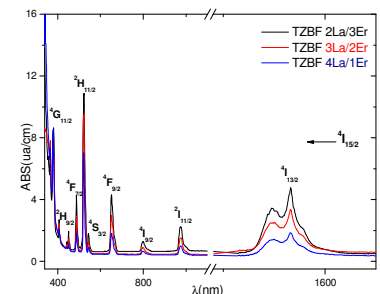


Fig.1 : Absorption spectra of the Er<sup>3+</sup> doped tellurite glasses

## P2 – CPCQ2017

EFFET DE LA CONFIGURATION À CŒUR EXCITÉ  $5p^5 4f^3 5d$  SUR LA RÉDUCTION DES PROBABILITÉS DE TRANSITION DU FAISCEAU  $5p^6 4f^3 - 5p^6 4f^2 5d$  DANS LE CAS DU ND IV.

Kamel Arab\*, Djamel Deghiche

Laboratoire de physique et chimie quantique, Faculté des sciences, Université de MOULOUD MAMMERI de Tizi Ouzou. Algérie

\*[kamel-sub@outlook.fr](mailto:kamel-sub@outlook.fr)

## Résumé

Les ions de lanthanides qui ont de nombreuses applications dans la physique des matériaux possèdent une structure de niveaux d'énergie très complexe. Seule l'étude de leurs spectres à haute résolution dans le domaine ultraviolet du vide (VUV) permet de déduire le diagramme de niveaux et de décrire les fonctions d'onde et les propriétés radiatives de ces ions. La présente étude en particulier, la détermination des niveaux d'énergie des configurations électroniques à cœur excité, permettrait de confirmer l'effet de réduction des intensités observé dans le spectre NdV [1]. Dans le cas du spectre de  $Nd^{3+}$  (Nd IV), les intensités du faisceau de transitions fondamental  $5p^6 4f^3 - 5p^6 4f^2 5d$  sont réduites au profit du faisceau  $5p^6 4f^3 - 5p^5 4f^3 5d$  par interaction de  $5p^6 4f^2 5d$  avec la configuration à cœur excité  $5p^5 4f^3 5d$ . Pour cela, les enregistrements du spectre de néodyme ionisé effectués à l'Observatoire de Meudon ont été étendus aux courtes longueurs d'onde jusqu'à 400 Å.

**Mots clés:** Spectroscopie atomique; Etincelle glissante; Slater-Racah; Lanthanide; Configuration à cœur excité.

## Introduction

Les spectres et les niveaux d'énergie des ions de lanthanides dans ses différents états d'ionisation intéressent plusieurs disciplines de la physique tels que l'astrophysique, les diagnostics plasma, les matériaux laser, ... En particulier, pour ces derniers, les données relatives aux ions trois fois chargés ont toujours été utilisées depuis même l'invention du laser. Ces données servent de références pour déterminer l'influence de l'environnement cristallin sur les niveaux d'énergie et les probabilités de transition radiatives de ces ions.

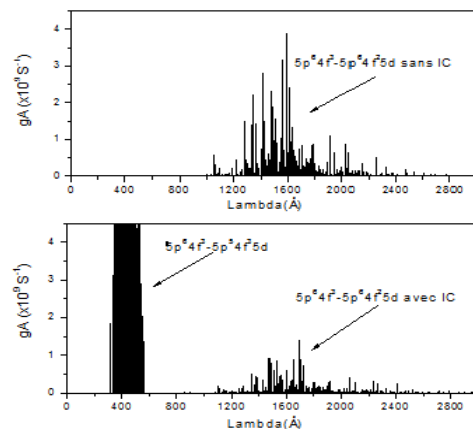
Le but de ce travail est de présenter le spectre de raies qui nous a permis de localiser la configuration à cœur excité  $5p^5 4f^3 5d$  et de confirmer l'effet de réduction des intensités du faisceau fondamental  $5p^6 4f^3 - 5p^5 4f^3 5d$  par interaction de configurations entre  $5p^6 4f^2 5d$  et  $5p^5 4f^3 5d$ .

## Méthodologie

Les spectres expérimentaux sont obtenus par une source de décharge de type étincelle glissante. En plus des données utilisées dans [2], deux jeux d'enregistrements ont été exploités : région (400 - 450 Å) sur écrans phosphores avec le spectrographe VUV de 10.7 m de l'Observatoire de Paris-Meudon et région (450 - 550 Å) sur plaques photographiques au Bureau National des Standards NIST.

L'analyse théorique est basée sur la méthode paramétrique de Slater-Racah au moyen de la série de codes Cowan (RCN/RCN2/RCG/RCE) [3]. Le point de départ est donné par les calculs Hartree-Fock Relativistes (HFR du code RCN) où la même base de configurations que dans [2] a été utilisée. Les valeurs *ab initio* des paramètres (intégrales radiales électrostatiques et de spin-orbite) obtenues à la sortie du code RCN2 sont corrigées par des facteurs d'échelle ( $SF = P_{fit}/P_{HFR}$ ) avant d'être injectées dans le code RCG de diagonalisation de l'Hamiltonien. La dernière étape (RCE) consiste à effectuer un ajustement par moindres carrés des paramètres qui minimise les écarts énergies calculées-énergies observées.

Les transitions à partir de la configuration  $5p^5 4f^3 5d$  observées dans la région 400-550Å forment



principalement deux faisceaux (voir figure) : le premier, situé autour de 480 Å, est large et les niveaux associés sont déterminés avec plusieurs transitions ; le deuxième, autour de 415Å, est plus étroit et les niveaux impliqués sont déterminés avec une seule transition. Cette observation renforce la conclusion sur la réduction des probabilités de transition du faisceau  $5p^64f^3-5p^64f^25d$  par interaction de configurations entre  $5p^64f^25d - 5p^54f^35d$  [1].

### Conclusion

La prédiction selon laquelle les probabilités de transition du faisceau fondamental  $5p^64f^3 - 5p^64f^25d$  sont réduites par interaction de configurations entre  $5p^64f^25d$  et  $5p^54f^35d$  a été confirmée et les valeurs des paramètres correspondants ont été précisées.

### Références

- [1] A. Meftah, J.F. Wyart, J. Sinzelle, W.-Ü L. Tchang-Brillet, N. Champion, N. Spector et J. Sugar, Phys. Scr. **77**, 55302 (2008).
- [2] J.F. Wyart, A. Meftah, W.-Ü L. Tchang-Brillet, N. Champion, O. Lamrous, N. Spector et J. Sugar, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.**40**, 3957(2077).
- [3] R D Cowan 1981, the theory of Atomic structure and Spectra (Berkeley, CA: University of California Press).

## P3 – CPCQ2017

## ETUDE PAR SIMULATION DES DIODES ELECTROLUMINESCENTES À BASE DE NITRURE D'INDIUM DE GALLIUM (INGAN) POUR ECLAIRAGE.

Fazia Bouaraba <sup>a\*</sup>, Amel Sidi Said <sup>a</sup>, Belkaid M.S<sup>a</sup>, Oussalah Slimane<sup>b</sup>, Benkhelfa Nabila<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire des Technologies Avancées du Génie Electrique LATAGE, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou.

<sup>b</sup> Centre de Développement des Technologies Avancées Alger, Algérie .

\* [fazibarque@hotmail.fr](mailto:fazibarque@hotmail.fr)

### Résumé

L'ampoule à incandescence est le composant dominant utilisé pour l'éclairage depuis plus d'une centaine d'années malgré une efficacité atteignant à peine 17 lumens par watt [1]. Aujourd'hui, une nouvelle source d'éclairage permettant de réduire la consommation électrique et donc la production de gaz à effet de serre est disponible, on parle de SSL « Solid-State Lighting » : Il s'agit en fait d'utiliser des composants à semiconducteur classiques de l'optoélectronique et de la photonique : les diodes électroluminescentes blanches à haute intensité, leurs efficacités énergétiques, leur fiabilité et leurs durées de vie très longues comparativement aux ampoules incandescentes, sont à l'origine de leur succès. Notre travail présenté porte sur une étude par simulation d'une diode électroluminescente à simple puits quantique (SQW), à base de matériau nitrure le InGaN. Afin de tirer les caractéristiques électriques et optiques de notre dispositif, nous avons procédé à une simulation à l'aide du logiciel SILVACO.

**Mots clés :** LED, InGaN, optoélectronique, photonique.

### Introduction

Une diode électroluminescente est un dispositif issu de la technologie des semiconducteurs, qui émet de la lumière lorsqu'un courant électrique la traverse. La diode produit une lumière quasi monochrome d'une longueur d'onde donnée dépend du semiconducteur utilisé. Les LEDs consomment très peu d'énergie, elles ont une durée de vie importante par rapport aux sources de lumière ordinaires [2]. L'InGaN apparaît à l'heure actuelle comme le matériau le plus prometteur pour l'émission de la lumière visible. C'est un matériau semiconducteur de bonne conductivité thermique, c'est un ternaire groupe III/groupe V à bande interdite directe. Son espace de bande peut être accordé en changeant la quantité d'indium dans l'alliage [1-3].

### Description de la structure

La structure que nous avons simulée est une LED bleue à base de puits quantique InGaN/GaN dont l'épaisseur est de l'ordre de 0.003  $\mu\text{m}$ , réalisée sur substrat saphir suivant la direction (0001), prise en sandwich entre deux couches de GaN dopées respectivement n et p (voir figure).

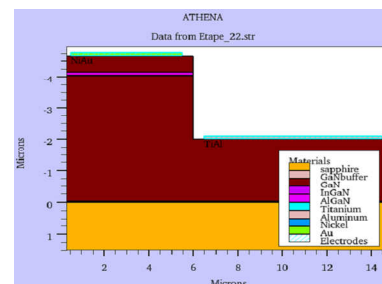


Figure : Structure finale simulée.

### Conclusion

La simulation électrique de la diode électroluminescente en utilisant l'outil de simulation ATLAS nous a permis d'extraire les différentes caractéristiques électriques de la LED bleue à puits quantique InGaN/GaN. Nous avons aussi montré l'influence du changement de la composition x de l'indium dans la couche active sur la couleur émise.

### Références

- [1] Yi.C.Hsu<sup>3</sup>, C.C. Tsai<sup>1</sup>, M.H. Chen, Electronic Components and Technology Conference (2008).
- [2] B. Monteil, J.F. Bassereau, Y. Desnouveaux, Arts et Métiers, Paris, (2006).
- [3] S.Nakamura, T.Mukai, M.Yamada, Journal of Applied Physics Vol.38 pp. 3976-3981 Part 1(1999)



## P4 – CPCQ2017

## EFFECT OF AN ADSORBED ATOMIC CHAIN ON THE DYNAMIC PROPERTIES OF AN HEXAGONAL STRUCTURE.

Malika Boucherrab<sup>(1,2)</sup>, Rachid Tigrine<sup>(1)</sup>, Boualem Bourahla<sup>(1)</sup> and Fazia Lekadir<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup>Laboratory of Physics Quantum Chemistry, M. Mammeri University, BP17 RP, Tizi Ouzou, Algeria

<sup>(2)</sup>University Akli Mohand Oulhadj of Bouira, Algeria

[mali\\_bou@yahoo.fr](mailto:mali_bou@yahoo.fr)

**Abstract**

A theoretical formalism for calculating the vibration spectra and scattering phenomena at the inhomogeneous adsorbed atomic chain on an hexagonal nanostructure system is developed. Our numerical results are presented for three different positions of each atom of the adsorbed atomic chain, Top, Hollow and Bridge. The breakdown of translation symmetry induced by the inhomogeneity, gives rise to localized elastic wave modes in its neighbourhood. The matching method and the Newton equation are used, in the harmonic approximation, to analyze the phonons scattering phenomena for the system model inhomogeneities. In this approximation, short range disorder effects are not predicted.

The transmission and reflection probabilities as well as the elastic wave average transmittance across adsorbed atom are determined, and numerical results are presented in a large band of scattering energies. The coherent coupling between the localized elastic wave induced by the defect and the propagating modes of the perfect hexagonal structure leads to Fano resonances in the vibration spectra of the studied structure. The vibration density of states (DOS) and phononic conductance are determined as function of the exciting dimensionless frequencies and the elastic constants of the model. Significant shifts of Rayleigh branches vibration are found, as functions of the adsorbed atomic chain position and the dimensionless frequencies.

**Keywords:** Vibrational properties; Adsorbed chain; Matching method; hexagonal nanostructure; Green functions.

**References**

- [1] A. Khater, B. Bourahla and R. Tigrine, *J. Phys. Cond. Matter. Conf. Ser.* 92, 012032 (2007).
- [2] S.-G. Cheng, X.-J. Zhao and P. Zhao, *Int. J. Mod. Phys. B* 25, 1671 (2011).
- [3] A. van de Walle and G. Ceder, *Rev. Mod. Phys.* 74, 11 (2002).
- [4] A. Khater, R. Tigrine and B. Bourahla, *Phys. Status Solidi B* 246(7), 1614 (2009).
- [5] R. Tigrine *et al.* *Phys. Status Solidi B* 239, 144 (2003).
- [6] M. Belhadi *et al.* *Eur. Phys. J. B* 15, 435 (2000).

**P5 – CPCQ2017****MESURE ET ANALYSE D'UNE COURBE DE DIFFRACTION D'UNE FIBRE OPTIQUE DANS L'APPROXIMATION FRAUNHOFER**K. Boumrar <sup>(a)</sup>, A. Boukellal <sup>(a)</sup>, P. Pfeiffer <sup>(b)</sup>, R. Mokdad <sup>(a)</sup>

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

<sup>b)</sup> Université de Strasbourg / Telecom Physique Strasbourg, Icube/Instrumentations et Procédés Photoniques Bld S. Brant BP 10413 67412 Illkirch Cedex.

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

**Résumé**

L'étude présentée dans cette communication, concerne la possibilité d'extraire à partir d'une figure de diffraction relative à une fibre optique, certains paramètres caractéristiques de cette même fibre à savoir sa position en ligne par rapport au plan d'enregistrement (écran CCD, CMOS), son indice de réfraction, son diamètre etc... La modélisation utilisée à cet effet est du type autorégressif à l'ordre deux accompagnée d'une technique de fenêtrage glissant. Les fréquences chirpées considérées dans l'analyse rentrent dans le cadre de l'approximation du champ lointain (approximation de Fraunhofer). Cette présentation montre le résultat de mesures expérimentales dont l'analyse permettrait de valider les résultats de simulation précédemment effectuées.

**Mots clés :** Fibre optique, Interférométrie, paramétrique, Approximation de Fraunhofer.

**Introduction**

L'holographie numérique [1] consiste à enregistrer sur une caméra CCD ou CMOS un hologramme constitué de la superposition cohérente d'une onde de référence avec onde diffractée par un objet. Appliquée au domaine rhéologique, l'analyse de courbes de diffraction relatives à des microparticules est d'une grande utilité, car elle permet de restituer des paramètres tant intrinsèques (indice de réfraction, dimensions, ...) que spatiales (positions, vitesses, ...) de ces particules.

Dans cette présente étude, notre travail a consisté en une mesure de courbes de diffraction concernant des fibres optiques, dont l'analyse validerait nos précédents travaux de simulations en conformité avec les résultats obtenus [2,3]. Le traitement à l'aide d'une approche paramétrique, de signaux interférométriques issus de courbes de diffraction mesurées nous permettrait, dans le premier temps, de montrer par une restitution fréquentielle à l'aide d'un modèle autorégressif [2,3], qu'il est possible de déterminer la position spatiale par rapport au détecteur de la microparticule ainsi que son indice de réfraction.

**Travail réalisé et résultats**

Des mesures ont été effectuées à l'Icube / Télécom Physique Strasbourg laboratoire de l'Université de Strasbourg. Un exemple de telles mesures est présenté sur la figure 1 donnant la courbe de diffraction à 2D relative à une fibre optique de 50 $\mu$ m de diamètre située à une distance z par rapport au plan d'enregistrement égale à 60 mm, la figure 2 représente un signal interférométrique pour une direction donnée selon l'axe X. Le laser He-Ne émet à une longueur d'onde  $\lambda=632,8$  nm. Le détecteur utilisé pour ces mesures est une caméra Ophir analyseur de faisceau sans atténuateur de 1024X768 pixels.

**Conclusion**

L'étude a pour but de déterminer l'indice de réfraction d'une fibre micrométrique ainsi que sa position par rapport au plan d'enregistrement à partir de sa figure de diffraction mesurée. Dans l'exemple considéré, notre objectif est de restituer ces grandeurs avec une résolution améliorée par rapport aux résultats de précédentes mesures (0.1%).

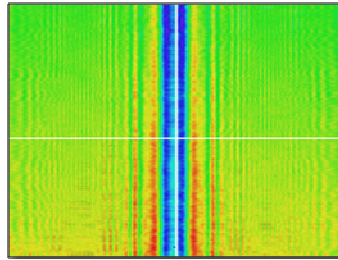


figure1 : Courbe de diffraction à 2D.

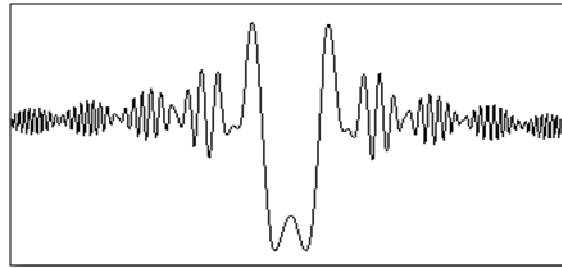


figure2 : Signal interférométrique.

### Références

- [1] Nicolas Verrier, Sébastien Coëtmellec, Marc Brunel, and Denis Lebrun, Digital in-line holography in thick optical systems: application to visualization in pipes , APPLIED OPTICS / Vol. 47, No. 22 / 1 August 2008.
- [2] Ali Boukellal, Rabah Mokdad, Farid Ait Ouamer, Pierre Pfeiffer, Omar Lamrous, 'Phase analysis with autoregressive modeling in holographic interferometry', Optical Engineering, Vol. 50(12), 125801(2011).
- [3] Ali Boukellal, Karima Boumrar, Rabah Mokdad, Pierre Pfeiffer, Micro-particle localization by parametric modeling analysis of digital holograms, Journal of Optics: Volume 44, issue 3 (2015), pages 298-304.

## P6 – CPCQ2017

## SPECTRES DE VIBRATION AUX VOISINAGE D'UNE INTERFACE RELIANT DEUX MÉTAUX NOBLES.

Anis Chikh<sup>a\*</sup>, B. Bourahla<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire physique et chimie quantique, Université M. Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie\* [ch\\_anis92@yahoo.fr](mailto:ch_anis92@yahoo.fr)**Résumé**

Dans les matériaux solides, la dynamique du réseau participe au transport de l'énergie. De plus, elle joue un rôle important dans la réponse du solide en présence d'une radiation (rayons X, lumière visible, neutrons). Le contrôle des phonons permettra de les utiliser pour moduler la lumière et la charge aux nano-échelles spatiales et aux ultra-hautes fréquences et éventuellement pour traiter de l'information et son stockage. Les métaux nobles sont particulièrement intéressants du fait qu'ils sont monovalents, simples, purs et disponibles. Ils sont également bien adaptés aux travaux de recherche concernant les effets des inhomogénéités (impuretés, surfaces, interfaces, lacunes, ...) sur leurs spectres de phonons et leurs propriétés thermodynamiques. En outre, le phénomène de résistance thermique aux interfaces des structures est particulièrement intéressant pour la création de super-réseaux dans lesquels il serait possible de contrôler à la fois les phénomènes de transport électrique et thermique.

**Mots clés:** Dynamique du réseau, Interfaces cristallines, Spectres de phonons

**Introduction**

Les vibrations atomiques et leurs interactions avec les électrons qui les constituent sont la base des propriétés de la physique du solide et ses variantes (optique, thermodynamique, ...) [1-2]. Dans le domaine de la physique du solide, l'or, l'argent et le cuivre sont regroupés dans une même famille appelée métaux nobles, leurs intérêts dans la technologie vient de leurs propriétés électroniques qui sont bien connues, donc idéales pour l'industrie. Notre contribution dans ce domaine porte sur l'étude de l'influence des interfaces dans les métaux nobles sur la propagation des ondes élastiques.

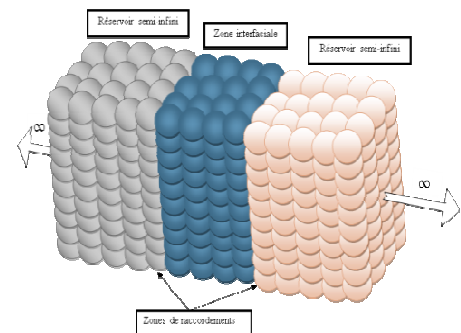
**Principe de la méthode de raccordement**

En se basant sur la deuxième loi de Newton, et en tenant compte de l'approximation harmonique, le mouvement de chaque site atomique est régi par l'équation (1)

$$m \frac{d^2 \vec{u}_\alpha(n, t)}{dt^2} = - \sum_{n' \neq n} \sum_{\beta} \left( \frac{r_{\alpha\beta}}{r_{n'n}^2} \right) k(n, n') [\vec{u}_\beta(n, t) - \vec{u}_\beta(n', t)] \quad (1)$$

Cette méthode impose la subdivision du cristal en trois régions distinctes (comme indiqué sur la figure (1)).

Elle consiste à raccorder les modes propageant de phonons des parties parfaites aux modes localisés de la zone perturbée via les zones de raccordements [3].



**Figure (3):** Subdivision d'un cristal selon le concept de la méthode de raccor-

**Conclusion**

Les résultats, des simulations, montrent, à l'échelle des petites longueurs d'ondes, que les phonons sont sensibles à la structure microscopique des surfaces et des interfaces en contact, et la détermination des courbes de dispersion correspondantes est un moyen d'accès à des informations capitales concernant les structures cristallines et les forces interatomiques mises en jeu par les différentes espèces présentes.

**Références**

- [1] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. 8<sup>th</sup> ed., John Wiley & Sons, Ltd, (2008).  
 [2] R. Heid, K. P. Bohnen., *Phys. Rep.* 387 (2003) 151-213.  
 [3] G. Belkacemi, B. Bourahla, *Superlatt. Microstru.* 85, (2015) 226-236.

## P7 – CPCQ2017

## IMPLÉMENTATION DE LA PSTD POUR DES APPLICATIONS EN PHOTONIQUE.

Lynda Dehbi<sup>1,\*</sup>, Abderrahmane Belkhir<sup>1</sup>, Abdelaziz Mezeghrane<sup>1</sup>, Omar Lamrous<sup>1</sup>, F. I. Baïda<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Faculté des Sciences, Université Mouloud MAMMER, Tizi-Ouzou, Algérie

<sup>2</sup>Département d'Optique P.M. Duffieux, Institut FEMTO-ST UMR 6174 CNRS Université de Franche-Comté, France

\* [dehbi\\_lynda@ummto.dz](mailto:dehbi_lynda@ummto.dz)

### Résumé

Nous avons développé un code de calcul PSTD (Pseudo Spectral Time Domain) pour des applications en nano-optiques. Deux variantes de cette méthode ont été mises au point : une pour le calcul de transmission et de réflexion et la seconde pour est dédiée aux calculs de structures de bandes. Les résultats ainsi obtenus sont comparés à ceux obtenus par des calculs analytiques et FDTD.

**Mots clés :** FDTD, PSTD, FFT, PML

### Introduction

Les méthodes de résolution des équations de Maxwell dans le domaine de la photoniques sont nombreuses. À cause de son caractère large bande et son opération dans l'espace direct, la FDTD [1] est la méthode la plus utilisée dans divers domaines de l'électromagnétique. Cependant sa précision est directement liée à la finesse du maillage spatial nécessitant des ressources informatiques gigantesques voir prohibitives dans certaines situations. L'objectif de cette contribution est l'implémentation d'une méthode pseudo-spectrale pour la modélisation en nano-optique tout en restant dans le domaine temporel. Les dérivées spatiales apparaissant dans les équations de Maxwell seront développées en séries de Fourier dans l'algorithme PSTD [2]. L'espace libre est décrit par des conditions absorbantes de type PML de Béranger permettant ainsi une périodisation artificielle de la structure. Cette nouvelle méthode permettra de modéliser des structures nano-optiques difficilement simulables par la méthode FDTD. L'avantage de la PSTD par rapport à la FDTD réside dans le fait que la contrainte sur le pas de discrétisation spatiale est moins sévère : il peut atteindre  $\lambda_{\min}/2$  en PSTD alors qu'il doit être inférieur à  $\lambda_{\min}/16$  en FDTD.

### Résultats

Les résultats obtenus par le code PSTD sont comparés à ceux obtenus par un code maison FDTD et confrontés aux calculs analytiques. Les calculs PSTD de transmission et de réflexion à travers des structures multicouches (cas 1D) montrent une totale concordance avec les calculs analytiques. Le code PSTD est aussi développé pour des calculs de diagrammes de bandes photoniques. Pour les mêmes paramètres de discrétisation spatiales, les courbes de dispersion obtenues par la PSTD approchent mieux les calculs analytiques comparativement à la FDTD.

### Références

- [1] INAN, Umran S. et MARSHALL, Robert A. Numerical electromagnetics: the FDTD method. Cambridge University Press, 2011.
- [2] LIU, Qing H, *Microwave and optical technology letters*, vol. 15(1997), p. 158-165.

## P8 – CPCQ2017

## MESURE DES PARAMETRES DES SURFACES OPTIQUES EN ANALYSANT LE FRONT D'ONDE PAR VOIE INTERFEROMETRIQUE.

Zidane Hebboul<sup>a\*</sup>, Aissa Manallah<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire d'Optique Appliquée, Université de sétif 1, Sétif, Algérie<sup>b</sup> Laboratoire d'Optique Appliquée, Université de sétif 1, Sétif, Algérie\* [hebizou@yahoo.fr](mailto:hebizou@yahoo.fr)**Résumé**

L'Interférométrie Optique donne énormément de renseignements sur les performances réelles de l'optique et surtout les informations quantitatives sur la surface (des plans, des sphères voire des paraboles très ouvertes). On va se focaliser dans cette manifestation sur les différentes techniques d'analyse, de reconstruction et de correction de front d'onde pratiquées actuellement. Des logiciels appropriés d'analyse des Interférogrammes nous permettent de calculer divers paramètres tels que les aberrations, la surface du front d'onde, PSF, MTF ....etc

**Mots clés :** surface optique, front d'onde, interférogramme.

**Introduction**

L'analyse/caractérisation de front d'onde au sens large du terme sous-entend la récupération de la phase d'une onde donnée dont l'intensité et les conditions de propagation sont connues [1]. Cette discipline couvre un secteur d'application très vaste tels que de la topographie 3D de composants optiques (lentilles, prismes, éléments holographiques, plaques, couches de substrats, etc) en métrologie des surfaces y compris l'inspection des surfaces dégradables (compact-disques, cellules d'écrans à cristaux liquides etc) [2].

**Mesure des paramètres Optiques par voie interférométrique**

Après l'enregistrement de l'interférogramme, l'intervention d'un software approprié est obligatoire. Cela nous permet de gérer des points sur les franges. Le rapport de test contient les informations suivantes (figure1) : carte du front d'onde sur l'axe et hors axe et reconstruction de la réponse impulsionnelle, aberrations, mesure du PTV et du RMS , MTF et courbure de champ.

**Conclusion**

Les interféromètres donnent une précision exceptionnelle de mesure et une simplicité algorithmique d'accès à la distribution de phase recherchée à travers la reconstruction du front d'onde affectée par une force extérieure.

**Références**

- [1] Magalie NICOLLE, analyse de front d'onde pour les optiques adaptatives de nouvelle génération, thèse de doctorat, Orsay 2006.  
 [2] R. Ragazzoni, Pupil plane wavefront sensing with an oscillating prism, *Journal of Modern Optics*, 43, February 1996.

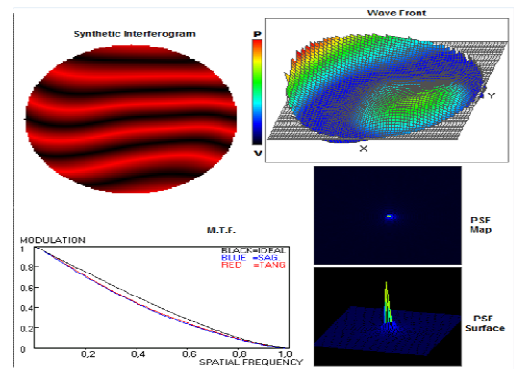


Fig 1: Rapport de test d'une lentille sphérique.

## P9 – CPCQ2017

## GAUSSIAN LASER BEAMS AND THEIR INTERFERENCES TO IMPROVE RESOLUTION IN MICROSCOPY.

Dahia Issaad<sup>a\*</sup>, Aicha Medjahed<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratory of Applied Optics, Institute of Optics and Precision Mechanics, Ferhat Abbas University, Setif-1, Algeria  
\* [dihiaissaad@yahoo.fr](mailto:dihiaissaad@yahoo.fr)

**Abstract**

Interference of Gaussian beams have recently been investigated as a means of improving resolution in microscopy compared to a conventional Gaussian beam. In this work, we have developed a method to evaluate the interference of Gaussian beams. Here, we explore numerically the idea of the focusing properties of Gaussian laser beams and the three-dimensional intensity distribution of focused interference of two Gaussian beams is investigated in the vicinity of the focal plane of NA. We demonstrate the principle of creating a shaped pattern of the light field profile in the focal plane of a microscope objective, the distribution of the light field created by interference of two intersecting Gaussian beams is analysed and look at some of the applications that they have found in microscopy.

**Keywords:** Gaussian beams, interference of Gaussian beams, confocal microscopy resolution.

**Introduction**

The fluorescence microscope is powerful tool for biology, because of its unique possibilities of acquiring data in 3-D. However, its resolution is still limited [1] Improving the axial spatial resolution in optical microscopy is a challenging task. In conventional microscopes and for large numerical aperture lenses the lateral resolution is about four times better than the resolution obtained along the longitudinal direction. Using interferences, the coherent addition of the excitation light fields at the focus[1-2] lead to a three- to fivefold axial resolution improvement. This significant improvement results from the superposition of Gaussian beams[3].

**Theory analysis**

A Gaussian beam in cylindrical coordinates at initial plane is given as.

$$E(\rho, z) = E_0 \frac{w_0}{w(z)} \exp\left[-\left(\frac{\rho}{w(z)}\right)^2\right] \exp\left[i\left(kz - \phi(z) + \frac{k\rho^2}{2R(z)}\right)\right] \quad (1)$$

Where  $w_0$  denotes the waist width,  $k = 2\pi/\lambda$  is the wavenumber,  $\phi$  the Gouy phase shift

In what follows, we analyze the interference of two Gaussian beams. In cylindrical coordinates, the resulting beam can be written as:

$$E_T(\rho) = [E_1(\rho, z_1) + E_2(\rho, z_2)] \quad (2)$$

These profiles show that the beam shaper not only converts the irradiance profile but improves also the spot shape showing in Fig. 1.

**Conclusion**

In this paper, we reshape our Gaussian beam by the using optical interferences by interfering two Gaussian beams with different ray of curvature. The central core can be small compared to a conventional Gaussian beam.

**Reference**

- [1] Hell, S Stefan, and Ernst HK Stelzer, *Optics Communications* 93,277-282. (1992).  
[2] Sheppard, C. J. R., and H. J. Matthews, *JOSA A* 4.8, 1354-1360. (1987).  
[3] Harfouche, A., B. Boubaha, M. Fromager, and K. Aït-Ameur, *Journal of Optics* 16, 12 (2014).

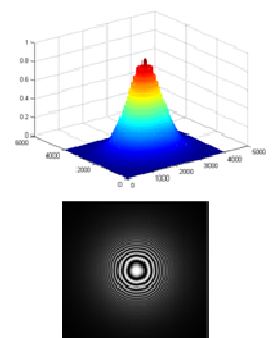


Fig. 1. Interference profile of two Gaussian beams.



## P10 – CPCQ2017

# PROPRIETES THERMODYNAMIQUES DU SYSTEME DE SURFACE ALLIAGE METALLIQUE ORDONNEE Au(110)-1x2-Pd.

S. Kheffache<sup>a,b,\*</sup>, R. Chadli<sup>a,c</sup>, A. Khater<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de physique et de chimie quantique, Université de Tizi-Ouzou, B.P. N° 17 RP, 15000, Algérie.

<sup>b</sup> Université de Bouira, DRISSI Yahia, Bouira 10000, Algérie.

<sup>c</sup> Institut des Molécules et Matériaux du Mans, Université du Maine, Av. Olivier Messiaen, 72085 le Mans Cedex 09, France.

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

## Résumé

Dans ce travail nous nous sommes intéressés aux propriétés thermodynamiques dans le système de surface alliage métallique ordonné Au(110)-1x2-Pd, formé par déposition d'atomes de palladium sur un substrat d'or (110). Les fréquences de vibration, déterminées à travers la méthode de raccordement, ont été utilisées, en se basant sur le modèle d'Einstein, dans le calcul des fonctions thermodynamiques. Les différents résultats obtenus ont été discutés et interprétés.

**Mots clés :** Surfaces alliages métalliques ordonnées, Propriétés thermodynamiques, Modèle d'Einstein.

## Introduction

Au cours des deux dernières décennies, un intérêt considérable a été stimulé à l'étude des structures de surfaces alliages métalliques ordonnées. La raison revient à leurs grandes utilisations dans de nombreuses applications, dans différents secteurs de la technologie [1].

Dans le but de porter une contribution à l'étude de ces systèmes de surfaces, nous avons pensé à un formalisme permettant le calcul de leurs propriétés vibrationnelles et thermodynamiques. Celui-ci est appliqué au système de surface alliage métallique ordonné Au(110)-1x2-Pd, représenté sur la figure (1).

## Méthode de calcul

Le formalisme développé consiste à calculer, dans un premier lieu, les fréquences vibrationnelles. Ceci peut se faire grâce à la méthode de raccordement associée au formalisme des fonctions de Green, évaluée dans l'approximation harmonique [2].

Par la suite, les fréquences calculées, seront utilisées, en se basant sur le modèle d'Einstein, dans le calcul des fonctions thermodynamiques, à savoir : l'énergie interne  $U_{vib}$ , l'énergie libre  $F_{vib}$ , l'entropie de vibration  $S_{vib}$  ainsi que la chaleur spécifique  $C_{vib}$  [3].

## Conclusion

Un calcul des propriétés thermodynamiques, relatives au système de surface alliage métallique ordonné Au(110)-1x2-Pd, a été présenté. Une comparaison par rapport au système de surface propre Au(110) a été effectuée. Les résultats ont montré la sensibilité des propriétés calculées au nombre de coordinations ainsi qu'aux valeurs des constantes de forces.

## Références

- [01] A. Damian, F. Maroun and P. Allongue, *Electrochim. Acta*, **55** (2010) 8087-8099.  
 [02] J. Szeftel and A. Khater, *J. Phys. C, Solide State Phys*, **20** (1987) 4725-4736.  
 [03] A. Kara and T.S. Rahman, *Surf. Sci. Rep*, **56** (2005) 159-187.

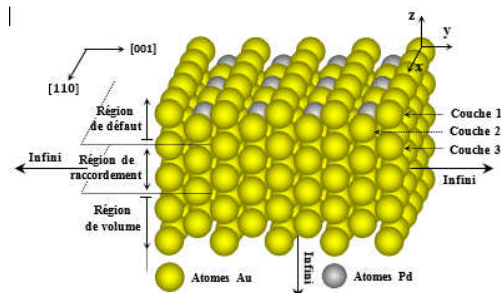


Fig.1 : Schéma représentatif de la surface alliage ordonné Au(110)-1x2- Pd.



## P11 – CPCQ2017

## INFLUENCE DE LA MASSE ATOMIQUE ET DES CONSTANTES ÉLASTIQUES SUR LE TRANSPORT DE PHONONS VIA UNE INTERFACE MÉTALLIQUE DANS DES STRUCTURES CFC[110].

Fazia Lekadir<sup>a,\*</sup>, Rachid Tigrine<sup>a,b</sup><sup>1</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou<sup>2</sup> Laboratoire des Molécules et des Matériaux Université du Maine, Av. Olivier Messiaen, 72085 Le Mans Cedex 09 France.[fazialekadir@yahoo.fr](mailto:fazialekadir@yahoo.fr)**Résumé**

La méthode de raccordement est utilisée pour l'analyse des ondes vibratoires diffusées par une interface dans une structure cristalline à maillage cubique à faces centrées suivant la direction 110. Le modèle examiné est de type A/B, obtenue par raccordement de deux systèmes semi-infinis à maillage semblable. Les états localisés induits par le défaut interagissent avec le continuum de vibration du guide d'ondes parfait et créent des résonances de Fano. Les états localisés sont étudiés en fonction de la masse de l'atome et des constantes de force.

**Mots clés :** transport de phonons, masse atomique, interfaces métalliques

**Introduction**

Les surfaces et les interfaces présentent un grand intérêt dans le domaine de la nanotechnologie. Les inhomogénéités modifient les propriétés mécaniques et thermiques de la structure. Les ondes diffusées permettent une analyse approfondie des propriétés vibrationnelles du guide d'ondes. La connaissance de ces dernières présente un intérêt important dans plusieurs domaines d'application de la technologie moderne, entre autres la catalyse, la corrosion, la métallurgie et le contrôle non destructif.

**Principe de la méthode**

La méthode étant déjà décrite en détails [1-4]. La méthode exige la division de la structure étudiée en trois zones : deux régions parfaites et une région perturbée. Les équations régissant le mouvement des atomes de la zone défaut peuvent être condensées sous la forme suivante :

$$\left[ \Omega^2 I - D(\vec{q}, Z, Q_y, Q_z, r) \right] u = 0 \quad (1)$$

**Etude en fonction de la masse atomique**

La variation de la masse de l'atome d'interface joue un rôle important dans la diffusion d'ondes vibratoires. En effet l'inhomogénéité induit des états d'énergies localisés dans son voisinage. Ces états dépendent de la valeur de cette masse. Les spectres sont calculés pour une masse  $m$  légère ( $m'=0.5m$ ), homogène ( $m'=m$ ), et lourde ( $m'=1.5m$ ).

**Etude en fonction des constantes élastiques**

Comme les défauts de masse, les défauts de ressorts agissent simultanément sur les sites voisins. Nous pouvons, donc, nous attendre à de nouvelles particularités dans les spectres des états localisés. Dans ce cas, nous nous concentrons sur les variations des constantes  $r$  en considérant toujours les cas d'adoucissement, homogénéité et durcissement.

**Références**

- [1] B. Bourahla, A. Khater, O. Rafil, R. Tigrine. *J. Phys.: Condens. Matter Conference* 18, (2006), 8683-8691
- [2] A. Felly, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet, and A. Khater, *Phys. Rev. B* 55, (1997), 1707-1717
- [3] R. Tigrine, A. Khater, M. Belhadi, O. Rafil. *Surf. Sci.* 580, (2005), 1-10
- [4] E. J. Wu, G. Ceder, and A. Van de Walle, *Phys. Rev. B* 67 (13), (2003), 134103-1-134103-7

## P12 – CPCQ2017

CALCUL DES ÉTATS LOCALISÉS AU VOISINAGE DE DEUX INTERFACES MÉTALLIQUES Au/Pd(110)  
ET Cu/Pt(110).Fazia Lekadir<sup>1\*</sup>, Rachid Tigrine<sup>1,2</sup><sup>1</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou<sup>2</sup> Laboratoire des Molécules et des Matériaux Université du Maine, Av. Olivier Messiaen, 72085 Le Mans Cedex 09 France.[fazialekadir@yahoo.fr](mailto:fazialekadir@yahoo.fr)**Résumé**

Les perturbations de l'homogénéité d'un cristal peuvent engendrer des modes localisés de vibration. Nous présentons la solution d'un problème créé par l'absence de symétrie de translation due à un défaut interfacial. Les énergies des modes localisés au voisinage du défaut sont déterminées en utilisant la méthode de raccordement. On montre l'existence de branches de phonons localisés optiques (acoustiques) au niveau des interfaces étudiées. Le nombre et les caractéristiques de ces courbes dépendent fortement des constantes de forces et de la masse des atomes de défauts. L'étude des phonons au voisinage d'une inhomogénéité est complexe et diffère de celle d'un guide d'ondes parfait. L'inhomogénéité modifie considérablement les propriétés vibrationnelles du système; elle peut donner naissance à de nouveaux états localisés au voisinage du défaut et elle peut diffuser les phonons de volume.

**Mots clés :** états localisés, Cu/Pt, Au/Pd, Nanojonctions**Introduction**

Comme le montre la littérature, l'outil mathématique pour étudier ce phénomène n'a cessé d'être approfondi et généralisé pour qu'il soit adapté aux différentes structures des matériaux. La méthode de raccordement [1-4], que nous employons dans ce papier, a été étendue avec succès aux calculs des propriétés de diffusion d'ondes élastiques dans les systèmes de basses dimensions [5,6]. L'objectif du présent travail est de contribuer à une meilleure compréhension de certains effets dus à la présence d'interfaces dans des guides d'ondes cristallographiques. A cette fin, nous proposons une étude théorique des phénomènes dynamiques liés à la localisation des ondes élastiques au voisinage d'une interface métallique.

**Etude dynamique**

Dans le cadre de l'approximation harmonique des forces centrales, et de l'interaction entre premiers et seconds voisins, l'équation du mouvement d'un atome  $l$  peut être exprimée [7] par la relation suivante :

$$m(l) \frac{d^2 \vec{u}_\alpha}{dt^2} = - \sum_{l' \neq l} \sum \left( \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) K(l, l') [\vec{u}_\beta(l, t) - \vec{u}_\alpha(l', t)] \quad (1)$$

**Calcul des états localisés**

La présence d'interface métallique implantée dans une structure régulière d'atomes, brise la symétrie de translation dans la direction normale au défaut. La résolution d'un tel problème nécessite l'emploi d'une approche adaptée telle que la méthode de raccordement afin d'aboutir à la connaissance des états vibrationnels localisés. Lesquelles interagissent avec les états de volume et induisent les résonances de Fano. Ces branches de phonons localisés sont une signature de la nature du défaut et de sa configuration cristalline.

**Références**

- [1] L. Dobrzynski, D. Mills, J. Phys. Chem. Solids, 30 (1969) 1043-1058.
- [2] R. E. Allen, G. P. Alldredge, F. W. de Wette, Phys. Rev. 4-6 (1971) 1682.
- [3] J. Szeftel, A. Khater, J. Phys. C: Solid State Phys., 20 (1987) 4725.
- [4] A. Khater, N. Auby, R. F. Wallis, Surf. Sci., 217 (1989) 363.
- [5] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet, A. Khater, Phys. Rev. B, 55 (1997) 1707.
- [6] M. Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, Eur. Phys. J. B, 15 (2000) 435
- [7] I. Lyuksyutov, A. G. Naumovets, V. Pokrovsky, Two Dimensional crystals (Academic Press, 1992).

## P13 – CPCQ2017

## MODELISATION DES STRUCTURES PERIODIQUES METALLO-DIELECTRIQUES POUR EXCITER LES RESONANCES DE FANO.

T. Zeghdoudi<sup>a</sup>, A. Mezeghrane<sup>a</sup>, A. Belkhir<sup>a</sup>, M. Hamidi<sup>a</sup>, F. I. Baïda<sup>b</sup>

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

<sup>b</sup> Département d'Optique, Institut FEMTO-ST, Besançon Cedex, France

\* [zeghdoudi.th@ummto.dz](mailto:zeghdoudi.th@ummto.dz)

### Résumé

Notre travail a porté sur l'étude et la modélisation des structures périodiques métallico-diélectriques pouvant supporter des résonances Fano correspondant au couplage d'un mode de Bloch non radiatif avec une onde plane incidente. Après avoir effectué un test de validation des codes de calcul utilisés, nous avons mené une étude FDTD (calcul de bande et de diffraction) montrant l'excitation des résonances Fano dans les cristaux photoniques.

**Mots clés :** FDTD, Résonance Fano, mode de Bloch, cristal photonique.

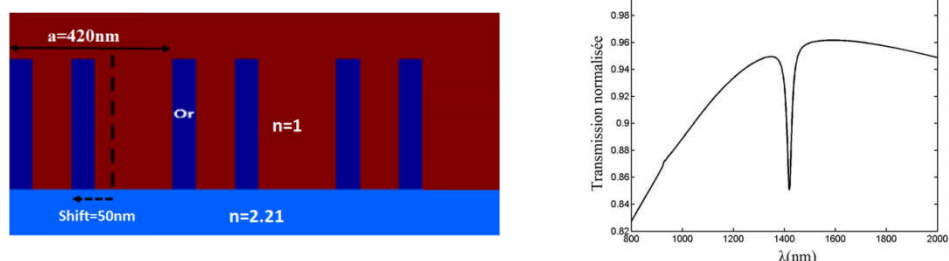
### Introduction

La caractéristique des résonances de type Fano [1] est d'avoir un profil asymétrique qui se traduit par un passage brusque d'un minimum de transmission vers un maximum de transmission. Ces résonances, généralement fines, permettent d'obtenir un confinement de la lumière plus efficace que les résonances plasmoniques conventionnelles. Elles peuvent être mises à profit dans les applications de piégeage optique, senseur biologique, communication et bien d'autres. Dans ce travail, nous montrons la possibilité d'exciter ce type de résonances dans les cristaux photoniques [2]. Pour mener à bien cette étude nous avons utilisé la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) basée sur le schéma explicite de Yee [3]. Cette méthode résout les équations de Maxwell via une double discrétisation de l'espace et du temps. Les conditions de Floquet-Bloch sont utilisées pour modéliser la périodicité du réseau de Bragg alors que l'espace libre est délimité par des couches absorbantes de type PML. La dispersion des métaux nobles dans la gamme optique est prise en compte via le modèle de Drude à deux points critiques.

### Résultats

La structure étudiée (figure 1.a) consiste en un réseau 1D métallique déposé sur un substrat de niobate de lithium. Pour exciter les modes de Bloch lents, nous avons exploité l'approche double période qui consiste à perturber un motif sur deux. Le spectre de transmission (figure 1.b) à travers ce réseau fait en or montre une discontinuité à la longueur d'onde  $\lambda=1420\text{nm}$ . Un calcul de structures de bande a montré que ce pic correspond à un mode de réseau au point  $\Gamma$  de la même structure perturbée et qui se situait au point  $X$  du la première zone de Brillouin du réseau non perturbé.

Les effets des paramètres géométriques et de la nature du métal sur le facteur de qualité de la résonance Fano sont étudiés.



**Figure 1:** a) Structure métallique 1D déposée sur un substrat de niobate de lithium et b) Résonance Fano en transmission dans un cristal photonique

### Références

- [1] Fano, Ugo. *Physical Review*, 124.6 (1961): 1866.
- [2] Yablonovitch, E. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 5.16 (1993): 2443.
- [3] Yee, Kane. *IEEE Transactions on antennas and propagation*, 14.3 (1966): 302-307.

## P14 – CPCQ2017

## PROPRIÉTÉS PHYSICOCHIMIQUES ET STRUCTURALES DU REVÊTEMENT MnZn ÉLABORÉ PAR VOIE ÉLECTROCHIMIQUE.

B. Benfedda<sup>a</sup>, L. Allam<sup>a\*</sup>, A. Kadri<sup>a</sup> et N. Benbrahim<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie des matériaux, UMMTO, Tizi-Ouzou, ALGÉRIE\* [allamlamia@yahoo.fr](mailto:allamlamia@yahoo.fr)**Résumé**

Dans le présent travail, nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés physicochimiques et structurales du revêtement MnZn électrodéposé. Dans un premier temps, nous avons effectué, au préalable, une étude électrochimique de la cinétique du dépôt de MnZn à partir d'un bain entièrement chlorure. Cette étape nous a permis de cerner une gamme de potentiel pour laquelle la codéposition simultanée des deux éléments en question est possible. Par la suite, une série d'échantillons MnZn a été effectuée en faisant varier le potentiel de dépôt et la concentration en ions  $Mn^{2+}$ . Enfin, des caractérisations morphologiques et structurales ont été appliquées sur les différents revêtements ainsi élaborés. Les résultats issus de ces différentes analyses ont révélé une forte dépendance vis-à-vis des paramètres explorés.

**Mots clés :** MnZn, Electrodeposition, voltamétrie cyclique, DRX, MEB.

**Introduction :**

Ces dernières années, l'élaboration et la caractérisation des revêtements à base de métaux de transition (Mn, Co, Fe, Ni) présente l'un des domaines de recherche les plus étudiés au niveau de la communauté scientifique [1, 2]. L'alliage MnZn s'avère un candidat très intéressant, vu qu'il possède des propriétés mécaniques intéressantes qui lui attribuent une très bonne résistance à la corrosion [3,4].

**Etude cinétique – Caractérisation morphologique**

La figure 1.A illustre les voltammogrammes relatifs à la réaction d'oxydo-réduction du système MnZn enregistrés à différentes concentrations en Mn(II). Les résultats obtenus indiquent que la cinétique du dépôt dépend fortement de la concentration en  $Mn^{2+}$ . La morphologie des différents revêtements MnZn ainsi synthétisés révèle une forte évolution vis-à-vis du potentiel d'élaboration (Fig.1.B).

**Conclusion**

L'analyse voltampérométrique de la cinétique de dépôt du système MnZn à partir d'un bain chlorure a révélé que la codéposition des deux éléments est possible dans nos conditions expérimentales. Ainsi, les caractéristiques morphologiques et les propriétés cristallines du revêtement en question évoluent considérablement en fonction de la concentration en Mn(II).

**Remerciements**

Les auteurs remercient Mr Amirouche Saifi pour les analyses MEB et Mr Yefsah pour les caractérisations DRX.

**Références**

- [1] M. Heydari Gharahcheshmeh, M. Heydarzadeh Sohi, Materials Chemistry and Physics 134 (2012) 1146-1152.
- [2] G.A.G. Pedroza, C.A.C. de Souza, M.D. de Jesus, L.R.P. de Andrade Lima, D.V. Ribeiro, Surface & Coatings Technology 258 (2014) 232
- [3] M. Bedir, D. Korkmaz, O. F Bakkalazlu, M. Oztas, I. H. Karaham and M. Y. Hacıbrahimoglu, Int. J. Electrochem. Sci, 10 (2015) pp 4513-4522.
- [4] S. Ganesan, C. Prablu, B. N. Popov, Surface and Coatings Technology, 238 (2014) 143-151.

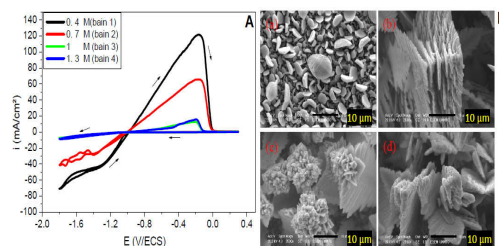


Fig. 1 : (A) Voltammogrammes relatifs à l'électrodéposition du système MnZn  
(B) Images MEB des revêtement MnZn obtenus à différents potentiels

## P15 – CPCQ2017

## NANOCATALYST Cu-Zn-La/SiO<sub>2</sub>, SYNTHESIS-CHARACTERIZATION-APPLICATION IN THE CATALYTIC HYDROGENATION OF CO<sub>2</sub>.

Djaouida Allam , Salem Cheknoun and Smain Hocine

<sup>a</sup> *Laboratoire de Chimie Appliquée et de Génie Chimique Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou*  
\* [allamdjaouida788@gmail.com](mailto:allamdjaouida788@gmail.com)

### Abstract

Cu-Zn-La/SiO<sub>2</sub> catalysts were synthesized by Co-precipitation method and characterized by X-ray powder diffractometry (XRD), infrared spectroscopy (FTIR), Scanning electron microscopy (SEM). The catalysts were tested in hydrogenation reaction of CO<sub>2</sub> to oxygenated compounds such as CO, Methane, Methanol, Dimethyl Ether and methyl formate).

**Keywords :** carbon dioxide, hydrogenation methanol, oxygenated compound.

### Introduction

It is well known that CO<sub>2</sub> is the main greenhouse gas. The global warming problem is becoming more serious in recent years because of the increase of the concentration of CO<sub>2</sub> in air .

CuO/ZnO-based catalysts are recommended to be the most effective catalysts for the hydrogenation of CO<sub>2</sub> to methanol



### Synthesis and characterization

The precursors of oxygenated compounds synthesis catalysts with the mol ratio Cu-Zn-La/SiO<sub>2</sub>= 4 : 4 : 1 : 1 were prepared by a co-precipitation method from their nitrates solution at pH=7. Buffer solution of pH=8 containing Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> were used as the precipitation agent , throughout the work .

The washed samples were dried in a vacuum oven for 24 hours at 100°C .the resulting were calcined in air at 450°C for 6 hours. Characterized by FTIR, XRD and SEM, and tested in hydrogenation of carbon dioxide.

### Results and discussions

The XRD patterns of the calcined samples are shown in Figure 1. It is observed that several diffraction peaks appear at 2θ of 43.3°,50.1°at 74.1°(JCPDS 89-2838) ;indicating the presence of the metallic copper, 2θ=36.5° and 73.7°(JCPDS 65-3288)[1] Cu<sub>2</sub>O phase, while the peaks account for crystalline ZnO at 2θ = 31.8°, 34.51°, 36.30°, 62,8° and 69,1°(JCPDS 89-1397)[2], which are partly overlapping with each other, are also detectable for all of the samples. The average particle sizes determined by using Debye Scherrer formula is in the range of 4-30 nm in diameter.

SEM analysis was used for the morphological study of CuO and ZnO, These analyses show that high homogeneity emerged in the samples surface. FTIR analysis of oxides shows bands at(819 - 1048 - 1098 - 1385 - 1508 - 1632 cm<sup>-1</sup>).

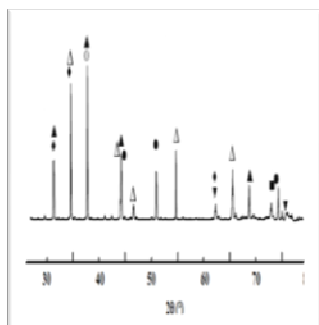


Fig. 1 DRX of Cu-Zn-La/SiO<sub>2</sub> after calcination; (●) CuO; ■: Cu<sub>2</sub>O; ◆: ZnO; ▲: CuAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>; (▲)La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (▼)SiO<sub>2</sub>

## Conclusion

Our results show high copper dispersion of Cu-Zn-La/SiO<sub>2</sub> catalyst and a great influence of the operating temperature and flow on the catalytic activity. The selectivity of methanol increases with the increase of flow and decrease in increasing reaction temperature.

## References

- [1] P. Benito, I. Guinea, F.M. Labajos, J. Rocha and V. Rives, *Micro. Meso. Mater.* (2008) 110-292.  
 [2] C.S. Polster, H. Nair and C.D. Baertsch, *J. Catal.* (2009) 266-308.

## P16 – CPCQ2017

### STUDY THE EFFECT OF THE SOLUTION MOLARITY ON THE STRUCTURAL PROPERTIES OF NiO THIN FILM.

Ahmed Bahi Azzououm<sup>a\*</sup>, Ahmed Benyahia<sup>b</sup>, Mohamed Bouhmidi<sup>c</sup>

<sup>a</sup> *Laboratory Micro and Nanophysics (LaMiN), ENP,Oran,Algerie..*

<sup>b</sup> *Laboratoire de Traitement du signal et de l'Imagerie (LATS), USDB, Blida, Algérie.*

<sup>c</sup> *Laboratory Micro and Nanophysics (LaMiN), ENP,Oran,Algerie.*

\* [bahiahmed12@gmail.com](mailto:bahiahmed12@gmail.com)

## Abstract

The aim of our work is the development and characterization of thin films of nickel oxide NiO deposited by the technique of spray pyrolyse on glass substrates. The spectra of X-ray diffraction show that the deposited of films at different concentration are polycrystalline in nature with a rocksalt structure (cubic). These thin layers have a preferential orientation along the (200) direction whatever the annealing temperature and concentration of solution except in the case of developed at 0.2M and annealed at 500 °C or preferred orientation in the thin film is axis (111). We also noted that annealing temperature affects at the crystallinity of the thin film of NiO.

**Keywords :** Thin film, NiO, spray pyrolyse, structural properties, X-ray diffraction, solar cells.

## Introduction

Research and development on thin films has led to the conclusion that different classes of materials are of particular interest for different applications [1]. The first thin film of a transparent conductive oxide (TCO) of the p type is that of nickel oxide [2]. The NiO is a semiconductor having a face centered cubic structure [3]. Nickel Oxide is an interest particular because the material has in recent a variety of applications in electronic devices, energy efficient smart windows, automobile mirrors and heterojunction solar cells [1].

## Experimental party

After preparation of the substrates, are placed over a resistor. These substrates are heated progressively until the selected temperature (350°C).

When the heating is carried, very fine droplets are sprayed on to the heated substrates which causes, by pyrolysis, the activation of the chemical reaction between the compounds, the dissolving evaporates due to the reaction of the two compounds forming the thin film. The sputtering is made according to cycles of 15s followed by pause of 30s to avoid the decrease in the substrate temperature.

Finally the deposition process, the heating was stopped and the substrates were allowed to cool until the room temperature, to avoid thermal shocks that could break the glasses, then recovering our samples.

## Conclusion

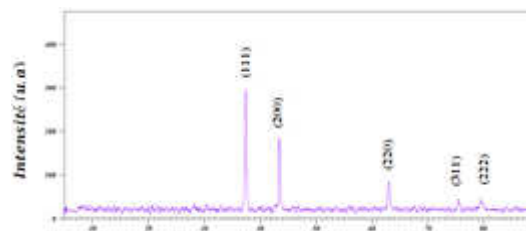


Fig. 1 : XRD diagram of NiO thin films elaborated at 0.2M at 500 °C.



The X-ray diffraction has allowed us to identify the structure rocksalt of NiO (face-centered cubic). After annealing at 500 ° C, the preferential grain orientation is along the axis (111) to the films elaborated at 0.2M while it is along the axis (200) for the films elaborated at 0.3M. ferromagnetic half-metallic character with 100% as spin polarization.

### References

- [1] A. Hakim , Renewable Energy, 34 (2009) 2625–2629.  
 [2] Ma(eva) LALANNE, doctoral thesis, University of Toulouse, 2010.  
 [3] Asmae BOUZOUBAA, doctoral thesis, University of Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2008.

---

## P17 – CPCQ2017

### COMPORTEMENT D'UNE COUCHE DE TiO<sub>2</sub> DEPOSEE SUR ACIER INOXYDABLE 316L DANS UN MILIEU PHYSIOLOGIQUE. BIOMATERIAUX.

Larbi Bait<sup>a\*</sup>, Nadia Saoula<sup>a</sup>, Hacene Boussafel<sup>b</sup>, Housseem Lakhali<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Divinon Milieux Ionisés, Centre de Développement des Technologies Avancées CDTA Cité du 20 août 1956, Baba Hassen, BP n 17, Alger, Algérie

<sup>b</sup>Ecole Nationale Supérieure Des Mines Et Métallurgie ENSMM-Département Science Et Génie Des Matériaux, Annaba

\* [lbait@cda.dz](mailto:lbait@cda.dz)

### Résumé

Les biomatériaux représentent une des grandes avancées thérapeutiques de ces quarante dernières années. Définis comme des matériaux travaillant sous contrainte biologique, voués au remplacement d'une fonction ou d'un organe, ils sont présents dans de très nombreuses stratégies médicales [1,2]. Les films minces d'oxyde de titane (TiO<sub>2</sub>) possèdent de grandes potentialités technologiques grâce à leurs propriétés spécifiques de grande stabilité chimique et de non toxicité. Récemment plusieurs études ont montré que les revêtements de TiO<sub>2</sub> sur acier inoxydable 316L nanostructurés en surface ayant une forte biocompatibilité ainsi qu'une stabilité mécanique élevée. Pour éliminer l'inconvénient, la bio-ingénierie se propose de modifier la surface des implants, puisque c'est sur sa surface que se produisent les interactions entre un solide et son environnement et les réactions qui en résultent [3].

Les facteurs influençant ce dernier ainsi que les propriétés issues constituent des lignes directrices pouvant aider à concevoir de meilleurs paramètres de revêtement et de bien prédire la biocompatibilité pour une application potentielle en orthopédie clinique. Pour ce faire, l'oxyde de titane TiO<sub>2</sub> est un bon candidat et la pulvérisation cathodique magnétron (PCM) est bien adaptée pour réaliser des dépôts d'une grande pureté et d'une épaisseur parfaitement contrôlée. Dans ce travail, nous avons étudié le comportement microstructurale et électrochimique d'une couche de TiO<sub>2</sub> déposée sur un acier inoxydable 316L utilisé comme biomatériaux. Ces dépôts sont réalisés par pulvérisation magnétron tout en variant la polarisation du porte substrat. Pour mener à bien cette étude, des techniques de caractérisation et d'identification sont employées telles que la microscopie optique et la microscopie électronique à balayage couplée aux tests EDS, XRD et d'autres techniques dont la nanoindentation et tests de corrosion (solution Ringer) sont effectuées pour assurer la biocompatibilité de nos matériaux.

**Mots clés:** TiO<sub>2</sub>, PVD, 316L, biomatériaux.

### Références

- [1] Simona Andrea Jacota Popescu, « Films minces de dioxyde de titane déposés sur titane par MOCVD : microstructure et biocompatibilité » novembre 2008. Auteurs, journal, volume (année) pp xx-xx.  
 [2] L. Kinani, R. Najih, A. Chtaini, H. Latrache, A. El Bouadili, M. Safrany, Corrosion behavior of dental alloy-sin presence of oral bacteria, ITE Letters on Medicine, 5, 2003, p. 5.  
 [3] M.-F. Guidoina,b, R.G. Guidoin, « Materials selection for the design and development of the housing for a totally implantable artificial heart: superiority of titanium and its alloys » ITBM-RBM 25 (2004) 126–138.



**P18 – CPCQ2017**  
**SYNTHÈSE ET CARACTERISATION DES CATALYSEUR A BASE DE COBALT**  
**REACTIVITE EN REFORMAGE SEC DU METHANE.**

S. Bakri<sup>a\*</sup>, R. Bakri<sup>b</sup>, S. Tezkratt<sup>a</sup>.

<sup>a</sup> Laboratoire de Chimie Appliquée et Génie Chimique Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou Algérie

<sup>b</sup> Laboratoire de physique chimie des matériaux, UMMTO, Tizi ousou, Algérie.

\* [bakrisabiha@yahoo.com](mailto:bakrisabiha@yahoo.com)

### Résumé

Depuis plusieurs années, les chercheurs ont pour objectif d'élaborer de nouveaux catalyseurs, à base des métaux peu coûteux et abondants dans la nature (comme le fer, le nickel, le cobalt ou le manganèse), afin d'utiliser l'hydrogène comme source énergétique.

**Mots clés** catalyseurs, Cobalt, gaz de synthèse, supports

### Introduction

L'intérêt porté à cette technologie est dû à la croissante consommation mondiale en énergie ce qui a impliquer l'augmentation de la production d'hydrogène en particulier a partir du reformage sec du méthane (eq 1) [1-3]. Ces dernières décennies, une grande attention est accordée à la réaction de reformage sec du méthane, vue son importance industriel et écologique, elle permet la production d'hydrogène qui est un carburant non polluant et non toxique dont la combustion ne rejette que de l'eau. Il est utilisé comme source d'énergie via la pile à combustible.  $H_4 + CO_2 = 2CO + 2 H_2$  (eq 1)

### Préparation et Caractérisation des catalyseurs

Nous avons utilisé plusieurs méthodes pour préparés nos catalyseurs que nous avons par la suite caractérisés par différentes méthodes d'analyse, et étudiés pour la réaction de reformage sec du méthane. L'analyse par spectroscopie infrarouge (IRTF) de nos solides a montré la présence des bandes de vibration caractérisant l'élongation des groupements hydroxyles de surface et l'adsorption des molécules d'eau respectivement. Une bande de vibration observée à  $690,46859 \text{ cm}^{-1}$  qui est attribuée à la fréquence de vibrations Co-O. Nous avons pu obtenir par microscopie électronique à balayage (MEB) une vision directe de nos solides catalytiques, qui représente des nano particules.

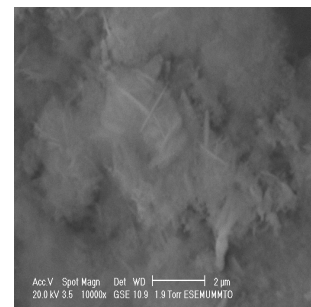


Figure 1 : Image MEB de Co/MgO

### Conclusion

Nous avons utilisé plusieurs méthodes pour préparés nos catalyseurs que nous avons par la suite caractérisés par différentes méthodes d'analyse, et étudiés pour la réaction de reformage sec du méthane. Le catalyseur **Co/CeO<sub>2</sub>** préparé par microémulsion et calciné à 700°C présente une grande stabilité à la température de réaction 700°C et de meilleures conversions.

### Références

- [1] F. Barrai, T. Jackson, N. Whitmore, M. J. Castaldi. Catalysis Today 129 ( 2007) 391-396.
- [2] S. Wang, G.Q. Li, G.J. Mllar, Energy Fuels 10 (1996) 896.
- [3] M.C.J. Bradford, M.A. Vannice, E. Ruckenstein, Catal, Rev., Sci. Eng.41 (1999) 1.

## P19 – CPCQ2017

## DEPOT DE NANOSTRUCTURE D'OXYDE DE ZINC SUR LES NANOFILS DE SILICIUM PAR VOIE HYDROTHERMALE ; APPLICATION EN PHOTODIODE.

Rezika Bakri<sup>a\*</sup>, Toufik Hadjerssi<sup>c</sup>, Nassima Benbrahim<sup>a</sup>, Sabiha Bakri<sup>b</sup>, Hakima Bozetine<sup>b</sup>, Salem Boudinar<sup>a</sup>, Ahcene Chaouchi<sup>b</sup>.

<sup>a</sup> Laboratoire de physique et chimie des matériaux, UMMTO, Tizi ousou, Algérie.

<sup>b</sup> Laboratoire de chimie appliquée et Génie Chimique, UMMTO, Tizi ousou, Algérie.

<sup>c</sup> Centre de Recherche en Technologie des Semi-conducteurs pour l'Energétique(CRTSE), 2, Bd. Frantz Fanon, B.P. 140 Alger-7 merveilles, Algerie.

\* [bakri\\_rezika@yahoo.fr](mailto:bakri_rezika@yahoo.fr)

### Résumé :

Le silicium expose des propriétés électrochimiques nouvelles dans des solutions contenant l'acide fluorhydrique et des comportements d'attaques électrochimiques complexes. Une grande surface de nanofils alignés verticalement peut être facilement élaborée sur une plaquette de silicium par son immersion dans une solution d'acide fluorhydrique. Dans notre travail nous avons élaboré des nanofils de silicium par voie chimique sur lesquels nous avons déposé une couche d'oxyde de zinc par voie hydrothermal. La morphologie des couches obtenues ont été étudiées à l'aide du microscope électronique à balayage (MEB). La DRX est également utilisée pour étudier la nature et la structure des couches. Le but de cette étude est de réaliser une photodiode.

**Mots clés :** Acide fluorhydrique, nanofils de silicium, dépôt d'oxyde de zinc, DRX,MEB,

### Introduction

Les nanostructures de semi-conducteurs sont de très bons candidats pour l'optoélectronique moderne à l'échelle nanométrique telle que les capteurs de molécule miniaturisés [1]. Une forme particulière du silicium monocristallin est représentée par le silicium en nanofils (SiNW). Ce dernier a suscité beaucoup d'intérêt dû à son extraordinaire effet de confinement quantique ainsi qu'à ses différentes applications dans le domaine de l'optoélectronique [2] et cellules photovoltaïques [3].

### Résultats expérimentaux

Nous avons élaboré les nanofils de silicium par voie chimique par immersion des plaquettes de silicium d'abord dans la solution de dépôt constituée de (HF+AgNO<sub>3</sub>) puis dans la solution d'attaque chimique constitué de (HF+H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>). Pour déposer les nanostructures de ZnO sur les nanofils de silicium, nous avons procédé par la méthode hydrothermale. Nous avons utilisé pour cela du nitrate de zinc Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, de l'ammoniaque NH<sub>4</sub>OH ainsi que l'EDI. La température du dépôt était fixée à 94°C et le temps de dépôt à 40 mn. Après le dépôt des nanostructures de ZnO/SiNW, les échantillons ont été lavés à l'EDI puis séchés à T=100°C pendant une heure. Les images MEB obtenues sur cette hétérojonction mettent en évidence une morphologie en nanofleurs d'oxyde de zinc (figure 1).

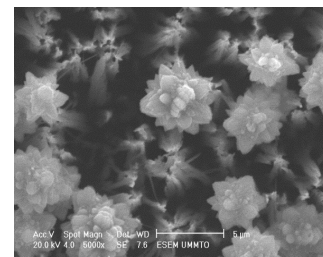


Fig1 : image MEB du dépôt de ZnO

### Conclusion :

Dans la présente étude nous avons obtenues des nanofils de silicium bien alignés de hauteur d'environ 5µm, tel qu'il a été mis en évidence par le MEB. Des nanostructures d'oxyde de zinc en forme de nano fleurs ont été déposées sur les nanofils de silicium.

### Références

- [1] X. F. Duan, Y. Huang, R. Agarwal, C.M. Lieber, Nature 421(2003)241.
- [2] X. Y. Zhao, C. M. Wei, L. Yang, M. Y. Chou, Phys. Rev. Lett. 92(2004)236805.
- [3] T. Pauporté, C. Magne, Impedance spectroscopy study of N719-sensitized ZnO-based solar cells, Thin Solid Films 560 (2014) 20–26.

## P20 – CPCQ2017

## ELABORATION ET CARACTERISATION STRUCTURALE ET OPTIQUE DE POINTS QUANTIQUES DE ZnS DOPES AU CUIVRE ET DISPENSES DANS LA SILICE SOL-GEL.

Boukhalfa Belache<sup>a\*</sup>, Youcef Khelfaoui<sup>b</sup>, Mohamed Bououdina<sup>c</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Génie de l'Environnement (LGE), Université de Béjaia, Béjaia, Algérie<sup>b</sup> Laboratoire de Mécanique, Matériaux et Energétique (L2ME), Université de Béjaia, Béjaia, Algérie<sup>c</sup> Nanotechnology centre, University of Bahrain, Kingdom of Bahrain\* [boubelache@gmail.com](mailto:boubelache@gmail.com)**Résumé**

Nous avons élaboré des poudres de points quantiques de sulfure de zinc (ZnS) dopés au cuivre et enfouis dans une matrice de silice par un procédé simple combinant le sol-gel et le traitement thermique à 350 °C. La diffraction des rayons X (DRX) nous a permis d'évaluer la taille des nanoparticules de ZnS et la micro-contrainte pour des concentrations molaires de cuivre de 0,2, 0,5, 1 et 2%. Les spectres DRX révèlent que ces points quantiques ont une structure de type sphalérite (zinc blende) et des diamètres allant de 1,9 à 2,7 nm. Les contraintes observées sont compressives (négatives) avec une valeur minimale de 4,9% pour le dopage à 0,5% de Cu. Les spectres d'absorption infrarouge (FTIR) montrent que pour les dopages de 0,2, 1 et 2 % des lacunes d'oxygènes sont présentes dans le réseau de la silice et le pic caractéristique de ZnS est élargi et dédoublé. Une partie de la micro-contrainte a été donc attribuée à ces lacunes d'oxygène dans le réseau de la silice entourant les points quantiques de ZnS pour ces niveaux de concentrations de Cu.

**Mots clés :** points quantiques de ZnS, dopage au cuivre, silice, sol-gel, propriétés structurales, propriétés optiques

**Introduction**

Les nanostructures de ZnS dopées aux ions métalliques ou terres rares suscitent un intérêt particulier en raison de leurs potentielles applications dans les dispositifs électroluminescents, les diodes émettrices de lumière (LED) et les capteurs optiques [1]. Le présent travail fait suite à notre précédent article concernant l'élaboration de nanoparticules de ZnS non dopées et dispersées dans la silice [2]. L'objectif principal est d'arriver à insérer dans la silice des points quantiques de ZnS dopés au cuivre par utilisation d'un procédé simple à faible coût.

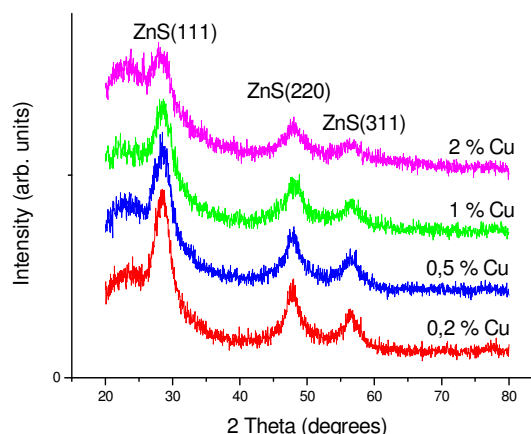


Fig. 1 : Spectres DRX des points quantiques de ZnS dopés à différentes concentrations de cuivre.

**Résultats et discussion**

La figure 1 présente les spectres DRX des points quantiques de ZnS dopés à différentes concentrations molaires de cuivre.

**Conclusion**

Nous avons utilisé un procédé simple pour élaborer de la silice co-dopée points quantiques de ZnS/cuivre. Les rayons moyens de ces points sont inférieurs au rayon de Bohr de l'exciton (2,5 nm).

**Références**

- [1] R. K. Srivastava, N. Pandey, S. K. Mishra, Mater. Sci. Semicond. Proc. 16 (2013) pp 1659–1664.  
 [2] B. Belache, Y. Khelfaoui, Ann. Chim. Sci. Mat. 38(5-6) (2013) pp 223-231.

## P21 – CPCQ2017

## ELABORATION AND CHARACTERIZATION OF THE SPINEL OXIDE $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$ NANOPARTICLES FOR $\text{O}_2$ REDUCTION ELECTOCATALYSIS.

C. Belkessam<sup>1\*</sup>, M. Mechouet<sup>2</sup>, N. Djilali<sup>1</sup>, N. Idiri<sup>2</sup>, A. Kadri<sup>2</sup>, N. Benbrahim<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Traitement et Mise en Forme des Polymères, Université M'Hamed BOUGARA, Boumerdès, Algeria

<sup>2</sup> Laboratoire de Physique et Chimie des Matériaux, Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algeria

\* celiabelkacem@gmail.com

### Abstract

A composite material was formed with polypyrrole (Ppy) and mixed valence  $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$  nanoparticles (NPs) to study its behaviour towards the oxygen reduction reaction (ORR). The oxide NPs were prepared by sol-gel route and characterized. The result showed that desired oxide was obtained with a specific surface area ranging from 39 to 73  $\text{m}^2/\text{g}$  and a diameter varying from 13 to 25 nm. The hybrid material was then fabricated by electropolymerization of pyrrole (Py) in the presence of  $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$  and characterized by SEM and LSV methods. As a result,  $\text{O}_2$  reduction mechanism changes by applying potential. Thus, at low overpotential the  $\text{O}_2$  reduction involves two electrons and provides  $\text{H}_2\text{O}_2$ , with cathodic transfer coefficients ( $\beta$ ) of 0.33 and exchange current density ( $j_0$ ) of about  $8 \times 10^{-3} \text{ mA}/\text{cm}^2$ , while, at high overpotential  $\text{H}_2\text{O}$  is produced.

**Keywords:** oxide nanoparticles, composite material, oxygen reduction reaction.

### Introduction

Several recent studies focused on the development of a composite electrode for  $\text{O}_2$  reduction atalysis and production of  $\text{H}_2\text{O}_2$  [1], The  $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$  NPs seem to be very promising electrocatalyst [2]. So, Electrocatalytic activity of the embedded  $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$  nanopowders, previously prepared, in polypyrrole film has been studied in this work.

### Results

#### Powder characterization

X-ray diffraction spectra, presented in Fig.1, confirmed the crystalline nature of the prepared  $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$  NPs. The characteristic  $hkl$  lines: 111, 220, 311, 400, 422, 511 and 440, indicated on the pure cubic spinel structure. Similar results were obtained by Chartier *et al.* [3] for the powders prepared by thermal decomposition of nitrates. The estimated crystallites cell parameter  $a$  is about  $8.11 \pm 0.015 \text{ \AA}$ . The crystallites average size was estimated by Scherrer formula and it was ranging from 13 to 25 nm.

#### $\text{O}_2$ reduction on Ppy/ ( $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$ ) electrode

Since Ppy films exhibit no significant electroanalytical activity [4], the inserted oxide particles impact toward ORR was investigated. Linear sweep voltammetry (LSV) was recorded by scanning the potential from 0.2 to  $-0.8\text{V}$  vs. Ag/AgCl with a rate of 5mV/s. The obtained LSV results for the hybrid electrode GC/Ppy ( $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$ ) at different rotational speeds were presented in Fig. 2. In oxygen saturated solution, growing reduction wave was observed which confirms powder electrocatalytic activity toward ORR [3], and as expected, the current densities are increasing with increasing the rotational speed.

#### Morphology

Scanning electron microscopy (SEM) was used to reveal the morphology of the obtained electrodes. The corresponding SEM images are showed in Fig.3. The Ppy films alone (Fig. 3.a) exhibit a typical, so called "cauliflower" structure as generally reported in literature [5]. However, the hybrid electrode GC/Ppy ( $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$ ) (Fig. 3.b) presents a porous and a sponge-like structure with uniformly NPs distribution and few areas appearing agglomeration as mentioned in our previous study [6].

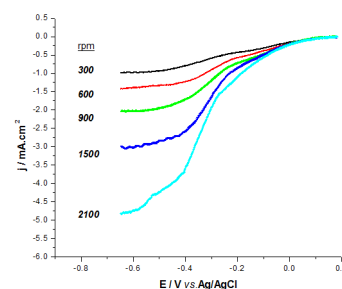


Fig. 1 : X-ray diffractogram of  $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$  powders prepared by sol-gel route

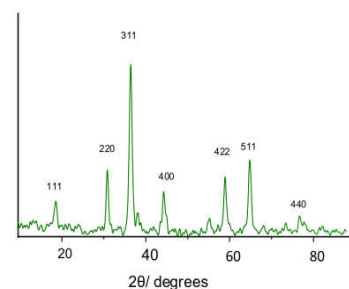


Fig. 2: LSV curves for  $\text{O}_2$  reduction on Ppy/ ( $\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{2.7}\text{O}_4$ ) electrode

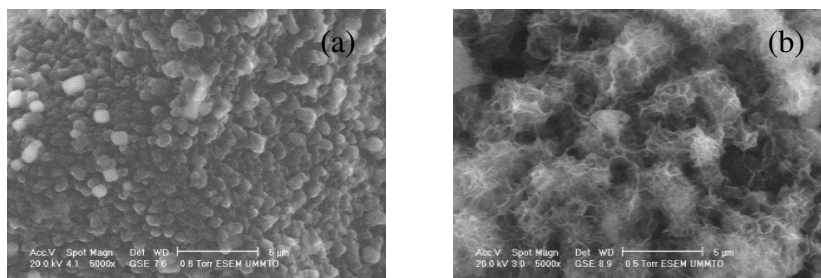


Fig. 3 : SEM micrographs of:  
(a)Ppy, (b) Ppy/ Ni<sub>0.3</sub>Co<sub>2.7</sub>O<sub>4</sub>

### Conclusion

The electrocatalytical properties of the elaborated material GC/Ppy (Ni<sub>0.3</sub>Co<sub>2.7</sub>O<sub>4</sub>) make it promising for many environmental applications, including electrochemical treatment.

### References

- [1] M.R. Miah, T. Ohsaka, *Int. J. Electrochem. Sci.*, 7(2012) 697–710.
- [2] E. Rios, H. Nguyen-Cong, J.F. Marco, J.R. Gancedo, P. Chartier, J.L. Gautier, *Electrochim. Acta*, 5 (2000) 4431–4440.
- [3] H. Nguyen-Cong, V. de la Garza Guadarrama, J.L. Gautier, P. Chartier, *Electrochim. Acta*, 48 [17] (2003) 2389–2395.
- [4] Q. Li, C. Zhang, J. Li, *Appl. Surf. Sci.*, 257 [3] (2010) 944–948.
- [5] J. Zhu, Y. Xu, J. Wang, J. Wang, Y. Bai, X. Du, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 17 [30] (2015) 19885–19894.
- [6] C. Belkessam, M. Mechouet, N. Djilali, N. Idiri, A. Kadri, *Journal of Materials, Processes and Environment*, 4 [2] (2016) 126-129.



## P22 – CPCQ2017

## INDIUM DOPED ZnO LAYERS PRODUCED BY SPRAY PYROLYSIS ROUTE.

N. Bencherif, M. Benhaliliba

Laboratoire de couches minces et plasma de l'université Mentouri Constantine UMC-ALGERIE

Laboratoire ITT-DIEE Mexico

Nebia.7883@gmail.com

**Abstract**

Pure and indium-doped ZnO thin layers are produced by ultrasonic spray pyrolysis route onto glass substrates at different substrate temperatures of 250, 300, 350 and 400°C. The structural, optical and AFM properties of such layers are investigated as a function of substrate temperature. The layers are polycrystalline with a hexagonal (wurtzite) structure and (002) is the predominant orientation. The preferential orientation of the ZnO crystallites with the c-axis perpendicular to the substrate surface and an anisotropic morphology of the nanoporous structure are observed for film growing at 350 °C and for indium-doped ZnO film at 400°C. The as-grown layers are highly transparent (80%-90%) in the Vis-NIR ranges. The optical band gap exhibits a blue shift (from 3.21eV to 3.25 eV) for pure ZnO and the 3.18 eV to 3.22eV for In-doped layers. Surface investigation by AFM microscope reveals a non-uniform mountain form which is strongly related to the substrate temperature

**Keywords:** ZnO, IZO, Thin layer, Spray pyrolysis, Substrate temperature, AFM

**Introduction**

Zinc oxide (ZnO), a representative (II-VI) semiconductor nanostructures materials; have attracted much attention for many applications, electrical[1], optical properties[1-2] and optoelectronics [2-3]. The conductivity of ZnO film can be improved by adding doping elements such as Al, Ga, In, Mo and Co-doping process [4].

**Results**

It is revealed that the as-grown films are polycrystalline with a hexagonal wurtzite-type structure and a preferred orientation along the c axis perpendicular to the substrate. Indeed, our films have grown according to the same (002) dominant orientation. ZnO and In-doped ZnO layers are highly transparent with a transmittance reaching 80-90% within the VIS-IR ranges. The atomic force microscope analysis shows the nanostructured morphology of ZnO and In-doped ZnO thin films. 3D images of non-uniform. mountain forms are obtained and the morphology of these clusters becomes pyramidal-shaped.

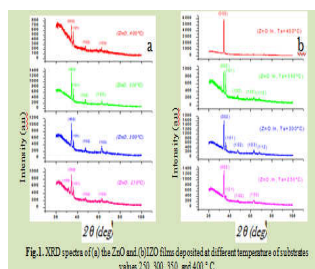


Fig.1. XRD spectra of (a) ZnO and (b) IZO films deposited at different temperature of substrate values 250, 300, 350, and 400 °C.

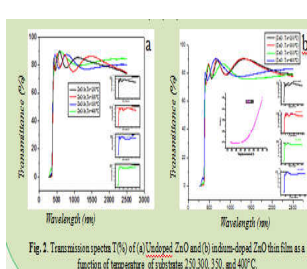


Fig. 2. Transmission spectra T(%) of (a) Undoped ZnO and (b) indium-doped ZnO thin film as a function of temperature of substrate 250, 300, 350, and 400°C.

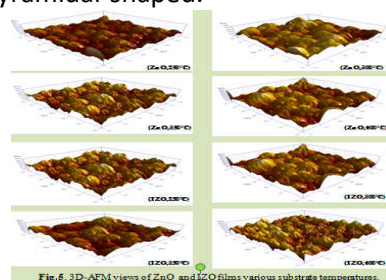


Fig.3. 3D-AFM views of ZnO and IZO films various substrate temperatures.

**Acknowledgments**

The work is included in the PNR projects under contract number 8/U311/R77 and U311/R81, supported by "Agence thematic de recherche en science et technologie" (ATRST) <http://www.atrst.dz>, and national administration of scientific research <http://www.dgrsd.dz> [www.mesrs.dz](http://www.mesrs.dz). It is included in CNEPRU project N° B00L02UN310220130011 supported by Oran University of Sciences and Technology Mohamed Boudiaf [www.univusto.dz](http://www.univusto.dz)

**Références**

- [01] Zhiyong Zhang, Yuanyuan Lv, Junfeng Yan, Dandan Hui, Jiangni Yun, Chunxue Zhai, Wu Zhao Journal of Alloys and Compounds 650 (2015) 374-380.  
 [02] Ni Huang, Jinxia Shu, Zhonghua Wang, Ming Chen, Chunguang Ren, Wei Zhang, Journal of Alloys and Compounds 648 (2015) 919-929.  
 [03] H.W. Wu, C.H. Chu, Structural and Optoelectronic Properties of AZO/Mo/AZO Thin Films Prepared by RF Magnetron Sputtering, Mater. Lett. 105 (2013) 65-67.  
 [04] M. Benhaliliba, C.E. Benouis, F. Yakuphanoglu, A. Tiburcio-Silver, C. Aydin, Journal of Alloys and Compounds 527 (2012) 40-47.

## P23 – CPCQ2017

## ELABORATION AND CHARACTERISATION OF ZINC TITANIUM Oxide (TZO) THIN FILMS GROWN BY DC MAGNETRON SPUTTERING.

Fazia Bouaraba <sup>a\*</sup>, Salim Lamri <sup>b</sup>, Mohammed Said Belkaid <sup>a</sup>, Ouiza Boussoum <sup>a</sup>, Nora Ziani <sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire des Technologies Avancées du Génie Electrique LATAGE, Université Mouloud Mammeri Tizi-Ouzou, Algérie<sup>b</sup> ICD-LASMIS, Université de Technologie de Troyes, France\* [fazia.bouaraba24@hotmail.com](mailto:fazia.bouaraba24@hotmail.com)**Abstract**

Doped-ZnO transparent conductive thin films are widely applied in optoelectronic devices such as flat panel displays and photovoltaic cells, because of their excellent optoelectronic properties, non-toxicity, low material cost and stability in hydrogen plasma processes. In present work Titanium-doped zinc oxide (TZO) films were prepared on glass substrates by DC magnetron co-sputtering using two individual Zn and Al metallic targets in a mixture of oxygen and argon gases. Evolutions of the structural, morphological, electrical and optical properties of the TZO thin films under different substrate temperature were investigated by X-ray diffraction, UV-visible spectrophotometer, scanning electron microscopy (SEM) and four-point probe. The results show that all the films demonstrated strong preferential orientation and good electrical and optical proprieties.

**Keywords :** thin film, ZnO, DC magnetron sputtering.

**Introduction**

Zinc oxide (ZnO) has been actively investigated as an alternate material to replace ITO due to its wide direct band gap ( 3.3 eV), an exciton binding energy of 60 meV [1], and other desirable properties such as low cost, abundance and nontoxicity [2]. Since undoped ZnO films have an unstable electrical conductivity, group IIIA element (Al, Ga, or In) doped ZnO thin films have been widely studied to enhance the film conductivity. A few reports suggest that Titanium (Ti) is a possible dopant for ZnO films because Ti is a quadrivalent cation and has a radius of 68 pm which is closing to that of Zn (74 pm) . The quadrivalent cation may provide one more valence than the trivalent cation as it substitutes Zn in ZnO films. The effects of substrate temperature on the structural, morphological, electrical and optical properties of the TZO thin films were investigated.

**Results And Discussion**

Fig.1 shows the XRD patterns of the TZO thin films. From these spectra, it was seen that all the thin films showed a pronounced diffraction peak ( $2\theta$ ) around  $34.5^\circ$ , indicating the typical hexagonal wurtzite structure with (002) preferred orientation. In addition, there was no TiO<sub>2</sub> phase found from the XRD spectra, implying that titanium may replace zinc in the hexagonal lattice or segregate to the non-crystalline region in grain boundaries.

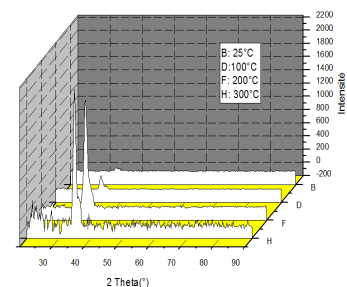


Fig. 1 : The XRD Spectra of the TZO

**Conclusion**

The XRD patterns reveal that the films have wurtzite structure of hexagonal phase with preferred orientation (002). An average transmittance of 90 % is obtained for all the thin films exhibited alllowest resistivity of  $1.6 \cdot 10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$ . The SEM studies show that the TZO films are uniform and homogeneous. This work revealed a possibility of producing high-quality TZO thin films by a simple low-cost process .

**References**

- [1] V. Ghafouri , M. Shariati and A. Ebrahimzad , *Scientia Iranica*,19, 934–942,2012.  
 [2]Z.Y.Zhong,T.Zhang, *Materials Letters*, vol. 96, pp. 237– 239 ,January.2013.



## P24 – CPCQ2017

## MECANISME DE NUCLEATION ET DE CROISSANCE ELECTROCHIMIQUE DU MANGANESE SUR UN SUBSTRAT DE CUIVRE.

Salem Boudinar\*, Nassima Benbrahim, Aziz Kadri

Laboratoire de Physique et Chimie des Matériaux (LPCM), Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie

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

## Résumé

Ce présent travail porte sur l'étude des mécanismes de nucléation et de croissance électrochimique du Manganèse sur un substrat de cuivre à partir d'un bain sulfate. Dans une première étape nous avons commencé par la caractérisation du bain électrolytique par voltammétrie cyclique et chronoampérométrie. L'analyse des transitoires enregistrés selon le modèle de Scharifker et Hills (S-H) à différents potentiels a montré que le mode de germination du manganèse est instantané suivi d'une croissance tridimensionnelle (3D). En effet, les films du manganèse obtenus montrent des germes sous forme de bâtonnets presque de mêmes tailles ce qui est caractéristique d'une nucléation 3D instantanée. D'autre part, la modélisation des courbes expérimentales courant-temps selon le modèle de Palomar-Pardavé a montré que la réaction réduction de l'hydrogène constitue une part non négligable au cours du processus de germination et de croissance électrochimique du manganèse. Les observations au microscope électronique à balayage (MEB) présentent un bon accord avec l'étude électrochimique.

**Mots clés :** Electrocrystalization, Modèles théoriques, Manganèse, MEB.

## Introduction

Le Manganèse est métal de transition qui rentre dans la composition de plusieurs alliages donc la compréhension des mécanismes de nucléation et de croissance de ces alliages et du manganèse et d'une importance capitale. L'objectif de ce travail est l'étude des mécanismes de nucléation et de croissance électrochimique du manganèse sur un substrat de cuivre.

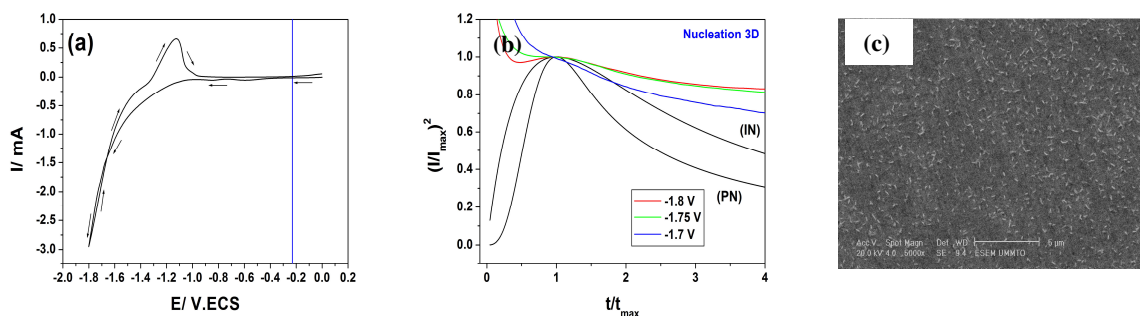


Fig.1 (a) voltammétrie cyclique d'oxydoréduction du manganèse (b) courants de transition du manganèse normalisés comparés au modèle de (S-H) (c) image MEB des premiers temps de dépôt du manganèse.

## Conclusion

L'étude électrochimique a montré que l'électrodéposition du manganèse se fait à des potentiels très cathodiques où la réaction de réduction de l'hydrogène est prédominante, il est donc nécessaire d'utiliser un modèle qui tient compte de la contribution de cette réaction pour mettre en évidence son effet sur le mode de nucléation et de croissance du manganèse. Dans notre cas nous avons utilisé le modèle de Palomar-Pardavé, ce qui nous a permis de séparer la contribution de l'hydrogène de celle des ions métalliques et de déterminer également les paramètres cinétiques de dépôt. Le résultat constaté par la modélisation des courants de transition est également confirmé par les observations directes au microscope électronique à balayage (MEB). En effet, les films du manganèse obtenus présentent une morphologie sous forme de bâtonnets tridimensionnels et de tailles très poches ce qui est caractéristique d'une nucléation 3D instantanée.

## P25 – CPCQ2017

**SYNTHESIS OF ZINC OXIDE NANOSTRUCTURES ON GaAs BY CHEMICAL BATH DEPOSITION (CBD).**Hakima Bozetine<sup>a\*</sup>, Rezika Bakri<sup>b</sup>, Toufik Hadjerssi<sup>c</sup>, Ahcene Chaouchi<sup>a</sup>.<sup>a</sup> Laboratoire de chimie appliquée et Génie Chimique, UMMTO, Tizi ousou, Algérie.<sup>b</sup> Laboratoire de physique et chimie des matériaux, UMMTO, Tizi ousou, Algérie.<sup>c</sup> Centre de Recherche en Technologie des Semi-conducteurs pour l'Energétique (CRTSE), 2, Bd. Frantz Fanon, B.P. 140 Alger-7 merveilles, Algerie.\* [hakima\\_bozetine@yahoo.fr](mailto:hakima_bozetine@yahoo.fr).**Abstract**

ZnO Urchins-like and cluster nanostructures were synthesized on GaAs substrate by a solution growth method. It is found that oxidizing of the substrate by HNO<sub>3</sub> (70%) plays a key role on controlling the morphology of the ZnO nanostructures. Indeed, dense ZnO clusters uniformly distributed were formed on unoxidized GaAs substrate surfaces. However, urchin-like with hexagonal wurtzite structure was deposited on oxidized GaAs substrate by HNO<sub>3</sub> (70%). The ZnO urchin-like structures have a diameter about 5 μm. Photoluminescence measurements of ZnO urchin-like and ZnO clusters revealed similar emission features..

**Keywords :** ZnO, GaAs, urchin-like, Growth mechanism.

**Introduction**

Several methods have been used to obtain ZnO thin films such as metal organic chemical vapor deposition (MOCVD) [1], sol-gel synthesis methods, electrochemistry depositions [2], chemical bath deposition (CBD) [3] it's one of the easier method.

**Experimental :**

Cluster and urchin-like ZnO nanostructures were synthesized by two-step process; substrate pretreatment and CBD growth. Substrates of GaAs (100) p-type Zn-doped of resistivity 10-2Ω.cm were first cleaned by ultrasonication in tetrachloroethylene and acetone. For the surface activation (or pretreatment), the substrates were placed in glass vials filled with HNO<sub>3</sub> (70%) solution at room temperature for 5min. For the CBD growth process, the pretreated GaAs substrates were immersed into the aqueous solution of the Zinc nitrate hexahydrate Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·6H<sub>2</sub>O 98% (20mmol) and hexamethyltetramine (C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>N<sub>4</sub>) 99% (20mmol) at 94°C for 3 h.

**Conclusion**

Urchin-like ZnO and clusters ZnO nanostructures were grown on GaAs substrates by solution growth. XRD measurements reveal that the ZnO nanostructures are hexagonal wurtzite. PL spectrum at room temperature shows that both the ZnO clusters and ZnO urchin-like have similar emission features, including a violet emission band, a strong blue emission band and a weak green emission band.

**References**

- [1] K. Black, A. C. Jones, P. R. Chalker, J. M. Gaskell, R. T. Murray, T. B. Joyce, MOCVD of ZnO thin films for potential use as compliant layers for GaN on Si, *Crystal growth*, vol. 310, 2008, pp. 1010-1014.
- [2] J. Elias, C. Levy-Clement, M. Bechelany, J. Michler, G.-Y. Wang, Z. Wang, L. Philippe, Hollow urchin-like ZnO thin films by electrochemical deposition *Advanced Materials*, vol. 22, 2010, pp. 1607-1612.
- [3] Q. Li, J. Bian, J. Sun, J. Wang, Y. Luo, K. Sun, D. Yu, Controllable growth of well-aligned ZnO nanorod arrays by low-temperature wet chemical bath deposition method, *Applied surface science*, Vol. 256, 2010, pp. 1698-1702.

**P26 – CPCQ2017****EFFECT OF POTENTIAL ON THE PROPERTIES OF ELECTRODEPOSITED  $\text{SnO}_2$  THIN FILM**K. Daideche<sup>1,2\*</sup>, A. Azizi<sup>1</sup><sup>1</sup> Laboratoire de chimie, Ingénierie Moléculaire et Nanostructures, Université Ferhat Abbas-Sétif 1, 19000 Sétif, Algérie.<sup>2</sup> Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyse Physico-Chimique (CRAPC/ PTAPC-Sétif), Université Ferhat Abbas-Sétif 1, 19000 Sétif, Algérie.[daideche2007@yahoo.fr](mailto:daideche2007@yahoo.fr)**Abstract**

In the present work the  $\text{SnO}_2$  thin film have been synthesized by electrochemical deposition at different potential values on ITO glass substrate from nitric acid solution at 70 °C. The influence of applied potential on the electrochemical, structural and optical properties of  $\text{SnO}_2$  thin films was investigated. Cyclic voltammetry (CV) studies were performed to determine the suitable deposition potential range of deposition of  $\text{SnO}_2$ . The Mott–Schottky (M-S) plot demonstrates that all the films showed a n-type semiconductor and the flat-band potential and donor concentrations were estimated from the space charge capacitance at a definite frequency. The X-rays diffraction (XRD) analysis confirmed that the potential of deposition effect the structure and the phase of  $\text{SnO}_2$  thin films; it was found that the tetragonal structure and (110) preferred direction was obtained at -0.9 V vs. ECS. In addition, the metallic phase was observed for other potential values. An optical transmittance spectrum was taken to examine the optical properties like transmittance and band gap energy. The morphologic study of the  $\text{SnO}_2$  thin films obtained at - 0.9V vs. ECS was performed through Atomic Force Microscopy (AFM) and Scanning Electron Microscopy (SEM), it shows homogenous and uniform films coated ITO substrate with fine nanoparticles morphology. Photoelectrochemical measurements of  $\text{SnO}_2$  thin films obtained at -0.9V vs. ECS were carried out under visible light and UV irradiation exhibits a high photocurrent response of 36  $\mu\text{A}/\text{cm}^2$  so the samples were a good candidate in photo electrochemical devices.

**Keywords :**  $\text{SnO}_2$ , Thin film, potential, electrodeposition**P27 – CPCQ2017****INFLUENCE DU BROUAGE A HAUTE ENERGIE SOUS ATMOSPHERE D'AZOTE SUR LA STRUCTURE D'UN MATERIAU A BASE DE Ni-Al.**Salem Dehlouz<sup>a\*</sup>, Mustapha Nechiche<sup>a</sup>, Amirouche Saifi<sup>a</sup>, Saïd Azem<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire Elaboration, Caractérisation des Matériaux et modélisation (LEC2M), Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, Tizi-Ouzou, Algérie\* [dehlouzsalem@gmail.com](mailto:dehlouzsalem@gmail.com)**Résumé**

Ce travail porte sur l'influence du broyage à haute énergie sous atmosphère d'azote sur la nature et la structure du matériau synthétisé à partir d'un mélange de poudres Ni-50%Al (% at.). Ce mélange est broyé sous azote (P=1 atm) dans un broyeur planétaire de type MiniMill II avec un ratio masse poudre/masse des billes fixé à 1 :10. L'objectif recherché est essentiellement la diminution de la taille des particules et l'activation mécanique du mélange. Au cours du broyage, le mélange de poudres emmagasine l'énergie et une réaction a lieu in-situ donnant naissance à l'aluminure  $\text{Ni}_{1,1}\text{Al}_{0,9}$  et au nitrure AlN à coté du Ni, identifiés par diffraction des rayons X (DRX). Après traitement thermique à 700°C, réalisé également sous atmosphère d'azote, le composé intermétallique  $\text{Ni}_3\text{Al}$  se forme et coexiste avec le  $\text{Ni}_{1,1}\text{Al}_{0,9}$  et le nitrure AlN.

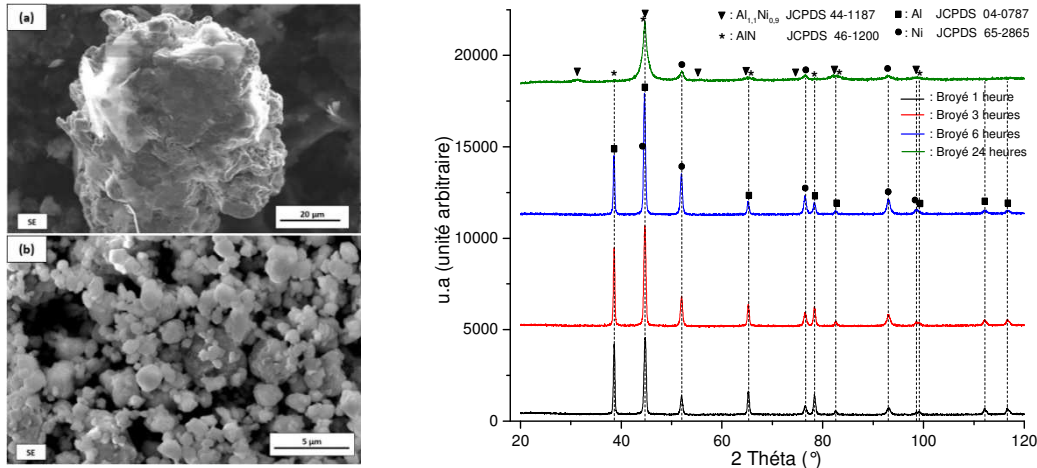
**Mots clés :** Ni-Al, Ni-Al-N, Mécanosynthèse, Combustion auto-propagée (SHS), Nitrure d'aluminium (AlN).

## Introduction

Les composés intermétalliques Ni-Al se caractérisent par des propriétés mécaniques et physico-chimiques intéressantes, notamment à haute température [1, 2]. La métallurgie des poudres est l'un des procédés d'élaboration les plus attrayants pour ces alliages vu la possibilité d'obtenir une nanostructure après broyage à haute énergie d'un mélange Ni-Al et la probable manifestation d'une réaction de synthèse auto-propagée à haute température (SHS) [3]. Le résultat de cette réaction peut être optimisé en effectuant ces deux opérations sous atmosphère d'azote à l'effet d'obtenir un matériau contenant un mitrure.

## Résultats

Les figures 1 et 2 montrent, respectivement, les images MEB et les diffractogrammes des échantillons broyés.



## Conclusion

Le broyage à haute énergie pendant 24 h a permis la synthèse du  $Ni_{1,1}Al_{0,9}$ , du AlN et le maintien d'une quantité de Ni. Les observations MEB ont permis de mettre en évidence un partiel recouvrement du Ni par l'Al et agglutinement pour des durées plus élevées. Le traitement thermique de ces poudres a permis de synthétiser, outre ces deux composés restés stables, le composé intermétallique  $Ni_3Al$ .

## Références

- [1] Frommeyer G., Rablbauer R., Schafer H. J., *Intermetallics* 18 (2010) 299-305.
- [2] G. K. Dey, *Sadhana* Vol. 28 (2003) 247–262.
- [3] Morsi K., *Materials Science and Engineering A299* (2001) 1–15.

## P28 – CPCQ2017

### INFLUENCE DE LA DUREE DU TRAITEMENT HYDROTHERMALE SUR LA FORMATION DES NANOBATONNETS D'OXYDE DE VANADIUM.

F. Ferhati <sup>a\*</sup>, A. Simo <sup>b-c</sup>, O. Boussoum <sup>a</sup>, C.L. Kotsedi <sup>b-c</sup>, M.S. Belkaid <sup>a</sup>, M. Maaza <sup>b-c</sup>.

<sup>a</sup>Faculty of Electrical and Computer Engineering, LATAGE Laboratory of Advanced Technologies of Genie Electrics, Mouloud MAMMERRI University BP17.RP 15000 Tizi-Ouzou, Algeria.

<sup>b</sup>UNESCO-UNISA Africa Chair in Nanosciences/Nanotechnology, College of Graduate Studies, University of South Africa, Muckleneuk ridge, POBox 392 Pretoria-South Africa.

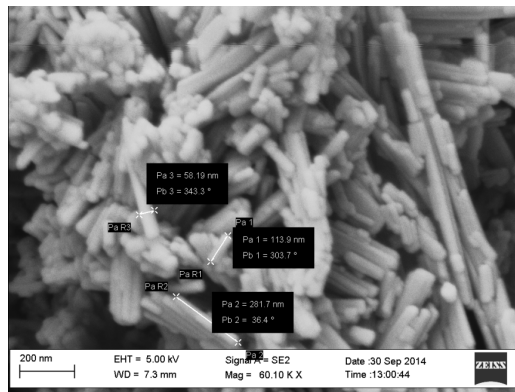
<sup>c</sup>Nanosciences African Network (NANOAFNET), iThemba LABS-National Research Foundation, 1 Old Faure Road, Somerset West 7129, POBox 722, Somerset West, Western Cape Province, South Africa

\*ferhati.ou@hotmail.fr

## Résumé

Au cours des dernières années, de nombreuses études ont été consacrées à la synthèse et à l'utilisation de matériaux unidimensionnels (1D) à l'échelle nanométrique [1-3]. Ces nanostructures possèdent des propriétés exceptionnelles résultantes de leur taille et de leur morphologie. En fait, les oxydes métalliques nanométriques peuvent améliorer les propriétés fondamentales des matériaux et la performance des dispositifs en raison de leurs propriétés nouvelles. Les matériaux semi-conducteurs à transition de phase, en particulier les composés d'oxydes de vanadium, sont la quintessence de la recherche d'aujourd'hui en raison de leurs propriétés particulières, ce qui les rend technologiquement utiles pour de potentielles applications [4-6]. Des nano-bâtonnets de pentoxyde de vanadium ( $V_2O_5$ ) ont été synthétisés par une simple hydrothermale technique en utilisant le sol ( $V_2O_5 \cdot 1,6H_2O$ ) comme précurseur. L'influence de différents paramètres de croissance, telles que la durée du traitement thermique sur la formation, la morphologie et la taille des nanostructures résultantes ont été étudiés expérimentalement. Les expériences ont montrées que durant le processus hydrothermale les gels ( $V_2O_5 \cdot 1,6H_2O$ ) ont été déshydratées progressivement et transformées en orthorhombique  $V_2O_5$  nano-bâtonnets. Le temps du traitement joue un rôle important dans la formation des nanoparticules désirées et induit des modifications sur la morphologie et la taille des cristallites de  $V_2O_5$  ainsi formées.

**Mots clés:** 1-D  $V_2O_5$ , Nanostructures, Oxyde de vanadium, Hydrothermale,  $V_2O_5 \cdot nH_2O$ .



**Fig.1.** Image MEB de  $V_2O_5$  nano-bâtonnets élaborées à 180°C pour 3h.

## Références

- [1] Wei Jin <sup>a</sup>, ShilinYan <sup>a</sup>, LiAn <sup>b</sup>, WenChen <sup>b,\*</sup>, ShuangYang <sup>b</sup>, Chunxia Zhao <sup>b</sup>, Ying Dai <sup>b</sup>, *Sensors and Actuators B* 206 (2015) 284–290.
- [2] Shah Abdul Hakim, Yueli Liu, Yu Lu, Wen Chen\*, *Materials Science in Semiconductor Processing* 31 (2015) 630-638.
- [3] Jie Ding, Hongrui Peng, Guicun Li\*, Kezheng Chen\*, *Materials Letters* 64 (2010), 1562-1565.
- [4] Jing Pan <sup>a</sup>, Ming Li <sup>a</sup>, Yuanyuan Luo <sup>a</sup>, Hao Wu <sup>a</sup>, Li Zhong <sup>a</sup>, Qiang Wang <sup>a</sup>, Guanghai Li <sup>a, b,\*</sup>, *Materials Research Bulletin* 74 (2016) 90–95.
- [5] Liang Shen\*, Shengping Ruan, Wenbin Guo, Fanxu Meng, Weiyu Chen, *Solar Energy Materials & solar cells* 97 (2012) 59-63.
- [6] Wei Jin <sup>a</sup>, ShilinYan <sup>a</sup>, LiAn <sup>b</sup>, WenChen <sup>b,\*</sup>, ShuangYang <sup>b</sup>, Chunxia Zhao <sup>b</sup>, Ying Dai <sup>b</sup>, *Sensors and Actuators B* 206 (2015) 284–290.

**P29 – CPCQ2017****PHOTO-DEGRADATION DE RHODAMINE B EN PRESENCE DE 5 % PdO/ZnO PREPARE PAR LA METHODE CO-PRECIPITATION.**

Meriem Haddad<sup>a</sup>, Akila Belhadi<sup>a</sup>, Mohamed Trari<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de chimie du Gaz Naturel, Faculté de Chimie, U. S.T.H.B, BP 32, 1611, Alger, Algérie

<sup>b</sup> Laboratoire de Stockage et Valorisation des Energies Renouvelables, USTHB, BP 32, 1611, Alger, Algérie

\* [haddadmeriem16@gmail.com](mailto:haddadmeriem16@gmail.com)

**Résumé**

La rhodamine B (Rh B) est un colorant toxique largement utilisé dans l'industrie textile, qui doit être traité avant son drainage vers l'environnement. Dans la présente étude, on a préparé des nanoparticules d'oxyde de palladium supportées sur l'oxyde de zinc préparé par la méthode co-précipitation, et on a ensuite évalué leur activité sur la photo-dégradation de RB sous irradiation UV visible. Les photo-catalyseurs synthétisés ont été caractérisés par DRX, ATR, UV vis et image SEM.

**Mots clés :** rhodamine B, co-précipitation, photo-catalyseur

**Introduction**

L'industrie du textile est reconnue polluante puisque ses rejets sont constitués de molécules organiques récalcitrantes ne pouvant pas être traitées par les méthodes traditionnelles de dépollution. Parmi les méthodes avancées on trouve la photo-dégradation des colorants en présence des catalyseurs. Dans le présent travail, nous nous sommes intéressés à la photo-dégradation de la rhodamine B en présence de 5% PdO/ZnO préparé par la méthode de co-précipitation

**Partie Expérimentale**

L'oxyde de palladium supporté sur l'oxyde de zinc (5%PdO/ZnO) a été préparé par la méthode de co-précipitation, en utilisant les nitrates de palladium et de zinc comme précurseurs de départ en milieu basique. Le solide obtenu a été calciné à 500 °C pendant 4 h. Ce matériau a été caractérisé par différentes techniques d'analyse physico chimiques tels que la diffraction des Rayons X (DRX), spectroscopie ATR, UV-vis du solide et micro-scopie électronique à balayage (SEM). Le solide a été utilisé comme photo-catalyseur dans la réaction de dégradation de la rhodamine b sous irradiation UV visible et atteint un pourcentage de 95 % pendant 4 heures.

**Conclusion**

L'oxyde de palladium supporté sur l'oxyde de zinc a été synthétisé avec succès, ce résultat a été confirmé par la DRX. La photo-dégradation de la rhodamine b atteint les 95 % pendant 4h.



## P30 – CPCQ2017

## MODELISATION ET SIMULATION DE LA CONDUCTION ELECTRIQUE DANS LE PDMS NANOCOMPOSITES.

A. Hassein-Bey<sup>a\*</sup>, N. Belgroune<sup>a</sup>, A. Benhaffaf<sup>a</sup>, R. Serhane<sup>b</sup>, B. Y. Majlis<sup>c</sup>.

<sup>a</sup> Groupe Nanophysique, Départ. de physique, USDB1 Blida Algérie. <sup>b</sup> CDTA, Baba Hassen, Algerie, <sup>c</sup> IMEN UKM Malaisie  
\* [ahassei@hotmail.fr](mailto:ahassei@hotmail.fr)

### Résumé

La conductivité électrique est transmise dans les polymères nanocomposites en incorporant des nanoparticules conductrices dans la matrice de polymère isolante. Le PolyDiMethylSiloxane ou PDMS est un cas typique chargé par des nanoparticules du noir de carbone ou de nickel. On s'intéresse à la simulation par élément finis du comportement de conduction électrique dans le C-PDMS. Ces matériaux possèdent la propriété de piézorésistivité qui en plus de leurs biocompatibilité vont leurs permettent de jouer un rôle important dans les capteurs intégrés en microfluidique.

**Mots clés :** polymère nanocomposite, nanoparticule, PDMS, simulation, FEM, piézorésistivité.

### Introduction

L'introduction de particules conductrices de taille nanométrique dans un polymère, dans notre cas le PDMS nous donne de nouveaux matériaux aux propriétés améliorées dits matériaux nanocomposites ou C-PDMS qui sont conducteurs. Ils peuvent aussi être piézorésistive à travers la création ou la destruction de chemins conducteurs sous l'effet d'une contrainte mécanique Fig. 1[1].

### Modélisation et simulation du mécanisme de conduction

Nous avons utilisé la méthode des éléments finis implémentée sous Comsol Multiphysics 4.3a pour simuler le comportement piézorésistif du C-PDMS avec l'incorporation de nanoparticules de Nickel et de carbone. Nous avons introduits les modèles régissant la conduction dans les polymères conducteurs : (i) Conduction par percolation, et (ii) Conduction par effet tunnel quantique [2,3]. En plus, les paramètres du C-PDMS issues directement de mesures expérimentales sont introduits dans le modèle dans les tenseurs régissant le comportement piézorésistifs.

### Résultat de simulation

Nous avons appliqué nos simulations pour calculer la résistance électrique  $R$  de géométries similaires aux cas expérimentaux [2,3]. Nos résultats montrent une bonne similitude Fig. 2 aussi bien avec les résultats expérimentaux qu'avec les résultats de calcul basés sur des modèles théoriques [3]. La morphologie de la surface des nanoparticules affecte fortement les mécanismes de conduction dans les nanocomposites. En plus de ceci cette conduction est fortement liée à la valeur de la distance moyenne entre nanoparticule ou de la concentration de ces nanoparticules.

### Conclusion

La piézorésistivité est une propriété très intéressante dans un polymère nanocomposite comme le C-PDMS qui peut lui permettre d'être un candidat exceptionnelle dans les capteurs intégrés à la microfluidique.

### Références

- [1] N. Belgroune et al, "Design and FEM simulation study of microflow sensor ...", Microsys. Technol. Springer 2016, pp. 1-10.
- [2] T. Ding et al, "Changes in electrical resistance of carbon-black filled ...", Jour. of Polymer Sc. Part B, Vol. 45, 2007 pp. 2700-2706.
- [3] S. Stassi et al, "Flexible tactile sensing based on piezoresistive composites : a review", Sensors, Vol. 14, 2014, pp. 5296-5332.

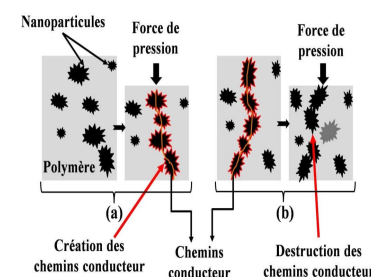


Fig. 1 : Mécanisme de conduction du C-PDMS sous pression.

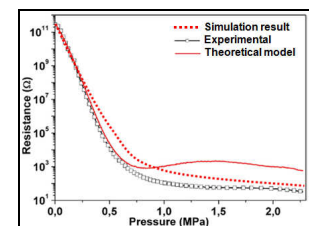


Fig 2 : Comparaison entre les valeurs de  $R$  simulée, expérimentale et théorique.



## P31 – CPCQ2017

PENTE DE TRANSITION DE PHASE DES COUCHES NANOMETRIQUES D'OXYDE DE VANADIUM (VO<sub>2</sub>).

A. L. Hassein-Bey<sup>a,b\*</sup>, H. Tahi<sup>a</sup>, A. Hassein-Bey<sup>c</sup>, S. Lafane<sup>a</sup>, S. Abdelli-Messaci<sup>a</sup>, A. Ait Djafar<sup>a</sup>, M.E.A Benamar<sup>b</sup>.

<sup>a</sup> CDTA, Baba Hassen, Algerie, <sup>b</sup> FUNDAPL, USDB1, Blida, Algerie, <sup>c</sup> Groupe Nanophysique, Départ. de physique, USDB1.  
\* [asmaahasseinbey@univ-blida.dz](mailto:asmaahasseinbey@univ-blida.dz)

## Résumé

Ce travail consiste en l'étude comparative de la pente de transition de phase de couches minces d'oxyde de vanadium (VO<sub>2</sub>) déposées sur Or (Au) et sur oxyde de silicium (SiO<sub>2</sub>), en fonction de la tension de polarisation. Des résultats intéressants ont été obtenus pour les couche VO<sub>2</sub> déposées sur l'Or à savoir la modulation de la température de transition, et de la pente de transition par la polarisation électriques. Avec l'augmentation de la tension de polarisation, la pente devient de plus en plus raide et la température de transition se rapproche de l'ambiante. Cela permet à ces couches d'être de bonnes candidates pour la réalisation de biocapteur.

**Mots clés:** VO<sub>2</sub>, transition métal-isolant, pente de transition.

## Introduction

Les couches nanométriques de dioxyde de vanadium ou VO<sub>2</sub> ont été largement étudiées pour leurs transitions de phase métal-isolant (MIT) se produisant à une température (T<sub>t</sub>) avoisinant 68 °C [1]. Deux types de dépôts de couches de VO<sub>2</sub> ont été effectués par PLD, l'un sur de l'oxyde de silicium (VO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>) et l'autre sur une couche tampon d'or Au(111) de 200 nm (VO<sub>2</sub>/Au.). L'épaisseur de ces couches est estimée à 650 nm [2].

## Mesure de la résistance en fonction de la température et des polarisations

Une série de caractérisation (I-V) est effectuée à différentes température. La figure 1 montre l'évolution de la résistance (R) des couches VO<sub>2</sub> en fonction de la température (T) pour différentes tension de polarisation (V) entre 0.35-1.5V. Ainsi plus V augmente, plus (T<sub>t</sub>) devient plus faible pour le VO<sub>2</sub>/Au. Ce qui n'est pas le cas pour le VO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> (Fig. 1).

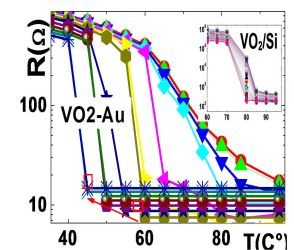


Fig. 1 Résistance en fonction de la température

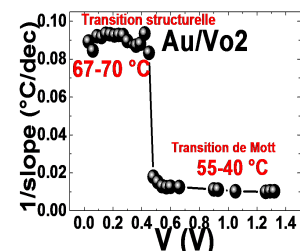


Fig. 2 Pente de la zone de transition en fonction de V

## Evolution de la pente de transition en fonction de V

La figure 2 montre l'inverse de la pente R-T donnant la variation de température nécessaire pour une décade de variation de R. Elle présente deux plateaux distincts (0.090 °C/dec @68 °C et 0.01 °C/dec @40 °C) avec un saut à V égal à 0.43V. La première zone s'explique par une transition structurale classique vers 68 °C [1] causée par le passage d'une structure de VO<sub>2</sub> monoclinique à un rutile. La deuxième zone (uniquement dans VO<sub>2</sub>/Au) est causée par une transition électronique de Mott [3] jusqu'à 40 °C favorisée par une corrélation électronique à la base de cette transition [3].

## Conclusion

Les résultats obtenus par ce travail montrent, un taux de variation de 0.01 °C/dec à des température proche de celle de l'ambiante (40 °C) basé sur une transition électronique de Mott. Ceci pourrait encourager la mise au point de capteurs de température d'une sensibilité exceptionnelle pour les applications de détection des réactions enzymatiques, pour les applications biologique.

## Références

- [1] Robert B Darling, *Sadhana* Vol. 34, Part 4, August 2009, pp. 531–542.
- [2] A. L. S Hassein-Bey et al, "Substrate Effect on Electrical Properties of Vanadium Oxide ..." ,IEEE-ICSE2016.
- [3] Hyun-Tak Kim, Mechanism and observation of Mott transition in VO<sub>2</sub>-based two- and three-terminal devices, *Journal of Physics* (2004).

## P32 – CPCQ2017

## SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF COBALT FERRITE NANOPARTICLES BY HYDROTHERMAL METHOD.

Hiba Kennaz<sup>a\*</sup>, Aicha Harat<sup>a</sup>, Ouanassa Guellati<sup>a,b</sup>, Nchulou Manyala<sup>c</sup>, Mohammed Guerioune<sup>a</sup>

<sup>a</sup> LEREC Laboratory, Physics Department, Badji Mokhtar-Annaba University, BP.12, Annaba 23000, Algeria

<sup>b</sup> Mohamed Chérif Messaadia University, BP. 1553, Souk-Ahras 41000, Algeria

<sup>c</sup> Department of Physics, Institute of Applied Materials, SARChI Chair in Carbon Technology and Materials, University of Pretoria, Pretoria 0028, South Africa

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

### Abstract

Cobalt ferrite magnetic nanoparticles (MNPs) have been produced via a simple hydrothermal method from  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  precursors, at two different temperatures. The structural and morphological characterizations were investigated using X-ray diffraction (XRD), high resolution transmission electron microscopy (HRTEM), Raman and Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. The obtained  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  MNPs are of single phase cubic spinel structure and have nearly square shape with an average particle size in the range of 18-20 nm.

**Keywords:** Cobalt ferrite, magnetic nanoparticles, hydrothermal.

### Introduction

Magnetic nanoparticles (MNPs) have been a major research area during recent times. Due to their unusual size, shape, and consequently, extraordinary physical properties, they have been suggested to technological applications in various fields: energy storage, cancer therapy, sensing devices, and so on. Cobalt ferrite  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  is a well-known hard magnetic material with its high coercivity and permeability, moderate saturation magnetization, strong anisotropy and chemical stability [1]. To date, many methods have been developed to obtain cobalt ferrite NPs such as reverse micelles [2], hydrothermal [3], sol-gel [4] and co-precipitation [5]. Among them, hydrothermal synthesis is an attractive method due to its simplicity and higher degree of compositional control.

In this work, we present a simple hydrothermal route for the elaboration of  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  MNPs. The resulting products have been characterised by various techniques: DRX, HRTEM, RAMAN and FTIR.

### Results and discussion

Cobalt ferrite magnetic nanoparticles (MNPs) have been synthesised by hydrothermal method by mixing xM  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  and xM  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (with atomic ratio Fe:Co = 2:1) precursors, in an xM NaOH solution, two batches of the obtained mixture were transferred to a Teflon-lined stainless steel autoclave which was placed in a preheated oven at two different growth temperatures 120 and 200 °C during 18h. The solution was filtered and washed several times with deionised water and the collected powder was dried at 80°C overnight. Figure 1 shows the XRD patterns of the as-synthesized Co ferrite samples. The XRD spectra reveal that all the peaks correspond to the single-phase cubic spinel type lattice of  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  (space group Fd3m), no additional peaks were detected. The figures reveal also the high crystallinity of samples with a more strong intensity of sample obtained at 120 °C as compared to the one obtained at 200°C. The lattice parameter (*a*) and the crystallite size (*D*) are calculated from the Rietveld refinement of the XRD pattern by the MAUD program (version 2.33), the obtained parameters are: 8.3848 Å, 18.4965 nm and 8.3598, 19.8382 for the samples growth at 120°C and 200°C respectively. On figure 2 the HRTEM micrographs of the synthesized cobalt ferrite MNPs, one can see that the samples are composed of nearly square shaped nanoparticles, with nearly homogeneous particle size distribution coupled with a large agglomeration.

### Conclusion

$\text{CoFe}_2\text{O}_4$  spinel ferrites NPs have been successively synthesized by a one step simple hydrothermal method at two different temperatures of 120°C and 200°C. Microstructural analysis (DRX) confirms the formation of the single-phase cubic spinel structure with a high crystallinity. Raman and FTIR techniques confirm also the formation of  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  MNPs. The morphological studies (HRTEM) micrographs confirm the formation of nearly square nanoparticles with an average particle size of 18-20 nm.

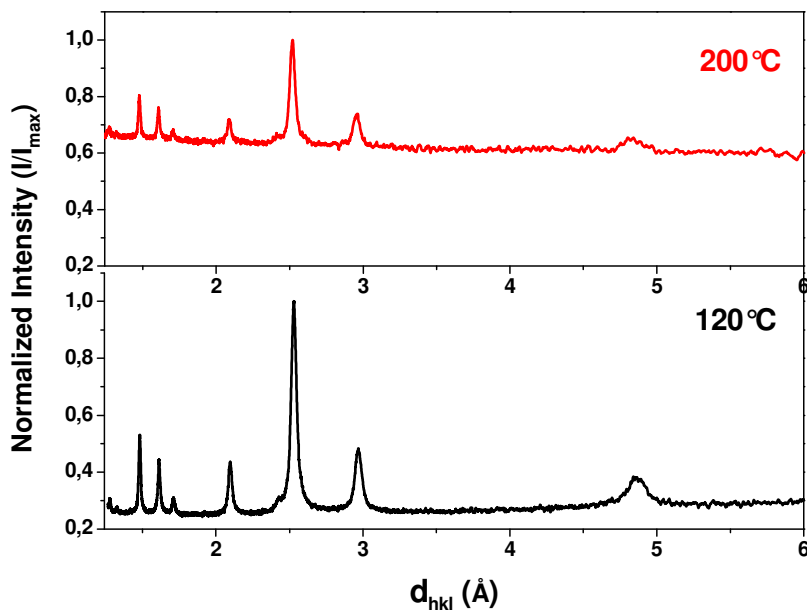


Figure 1: XRD patterns of  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  MNPs prepared by 120 °C and 200°C.

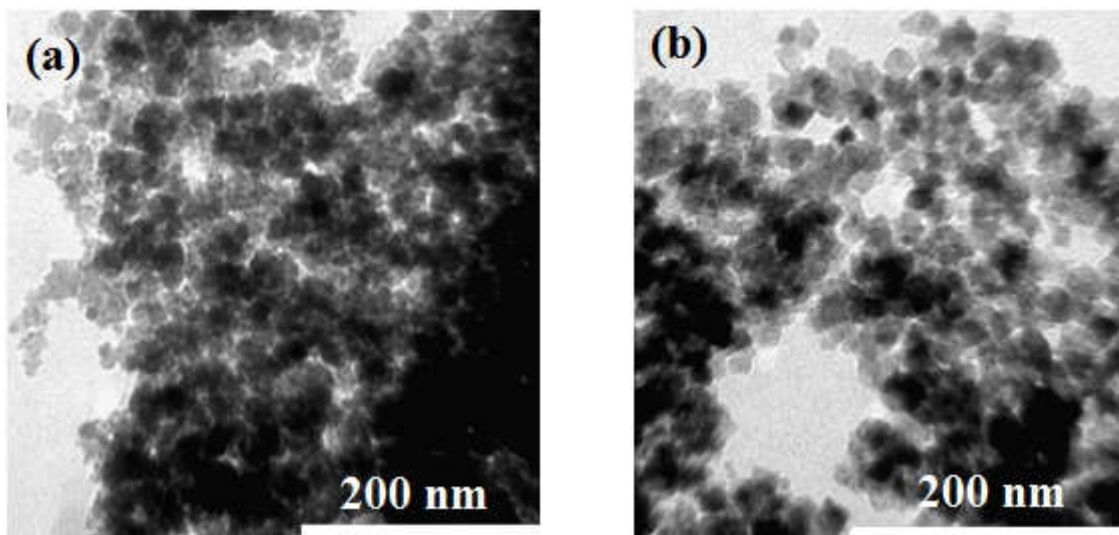


Figure 2: HRTEM micrographs of  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  MNPs prepared at (a) 120°C and (b) 200°C.

### References

- [1] B.E. Kashevsky, V.E. Agabekov, S.B. Kashevsky, K.A. Kekalo, E.Y. Manina, I.V. Prokhorov, V.S. Ulashchik, *Particuology* 6 (2008) pp 322.
- [2] C.T. Seip, E.E. Carpenter, C.J. O'Connor, J. Vijay, S. Li, *IEEE Trans, Magn*, 34 (1998) pp 1111.
- [3] H. Wu, G. Liu, X. Wang, J. Zhang, Y. Chen, J. Shi, H. Yang, H. Hu, S. Yang, *Acta Biomaterialia*, 7 (2011) pp 3496.
- [4] A. Hutlova, D. Niznansky, J.L. Rehspringer, C. Estournes, M. Kurmoo, *Adv Mater*, 15 (2003) pp 1622.
- [5] Y.I. Kim, D. Kim, C.S. Lee, *Physica*, 337 (2003) pp 42.

## P33 – CPCQ2017

ELECTROCHEMICAL DEPOSITION AND CHARACTERIZATION OF Cu<sub>2</sub>O NANOSTRUCTURES ON FTO SUBSTRATE.Samiha Laidoudi<sup>a\*</sup>, Amor Azizi<sup>b</sup><sup>a</sup> Research Center in Industrial Technologies/CRTI, ex-CSC, B.P.64, Cheraga, Algiers, Algeria.<sup>b</sup> Laboratoire de Chimie, Ingénierie, Moléculaire et Nanostructures, Université Ferhat abbas-Sétif-1, Sétif, Algérie.\* [samiha.laidoudi@yahoo.com](mailto:samiha.laidoudi@yahoo.com)**Abstract**

In this work, the effect of the cathodic potential on the structural, morphological and optical properties of Cu<sub>2</sub>O nanostructures was studied. The as-prepared products were characterized Mott-Schottky measurements (M-S), X-ray diffraction (XRD), atomic force microscopy (AFM), UV-visible spectroscopy, and photoluminescence techniques. The (M-S) plot demonstrates that all the films showed a p-type semiconductor with a carrier density increasing from 2.85 to 5.38×10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup>. The typical XRD patterns show that all films were pure Cu<sub>2</sub>O phase and it has a cubic structure with (111) oriented. AFM images reveal that the applied potential has a great effect on the surface morphology of Cu<sub>2</sub>O nanostructures. UV-visible absorption spectra shows optical band-gap energy varies between 2.11 and 2.24 eV. The emission at 560 nm (2.21 eV) of photoluminescence spectra can be caused by near band-edge emission from free exciton recombination.

**Keywords:** Cu<sub>2</sub>O, electrodeposition, nanostructure, optical properties.

**Introduction**

As a non-stoichiometric semiconductor, with a direct band gap around 2.1 eV [1], cuprous oxide (Cu<sub>2</sub>O) has the advantages of good gas sensitivity, low costs, and non-toxicity. Therefore, it is widely used in photovoltaic, gas sensors, microdevices [2]. So far, many deposited techniques have been investigated to the synthesis of Cu<sub>2</sub>O nanostructures. Electrodeposition is one of the most attractive ways to fabricate semiconductor oxide films over conductive substrates. It offers advantages such as low synthesis temperature, the ability to use a low cost, and large area deposition [3].

**Experimental**

Cu<sub>2</sub>O thin films were electrodeposited in an aqueous solution of 0.05 M CuSO<sub>4</sub> and 0.05 M C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>O<sub>7</sub>; its pH was fixed to 11 and T= 60°C. Electrochemical experiments were carried out in a conventional three-electrode cell using a VoltLab 40 potentiostat/galvanostat. The reference and counter electrodes were a saturated calomel electrode (SCE) and a platinum wire, respectively. The working electrode was a fluorine doped tin oxide (FTO)-coated conducting glass substrates.

**Conclusion**

The (M-S) plot demonstrates that all the films showed a p-type semiconductor with a carrier density increasing from 2.85 to 5.38×10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup>. XRD measurements shows a simple cubic crystal structure with a preferential orientation along the (111) direction and reveals that the crystallite size decreased by increasing the applied potential. AFM images reveal that the applied potential has a great effect on the surface morphology of Cu<sub>2</sub>O nanostructures. Optical band gap of the nanostructures varies from 2.11 and 2.24 eV as the applied potential varied from -0.50 V to -0.60 V.

**References**

- [1] G. Li, Y. Huang, Q. Fan, M. Zhang, Q. Lan, X. Fan, Z. Zhou, Ch. Zhang, Ionics, 22 (2016) 2213-2223.
- [2] A. Oshero, CQ. Zhu, MJ. Panzer, Chem Mater, 25 (2013) 692-698.
- [3] S. Laidoudi, A.Y. Bioud, A. Azizi, G. Schmerber, J. Bartringer, S. Barre, A. Dinia, Semicond. Sci. Technol., 28 (2013) 115005 (7pp).

## P34 – CPCQ2017

## MORPHOLOGICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF ZnO/CdS CORE-SHELL USED AS LIGHT HARVESTER.

S. Lakehal<sup>a\*</sup>, S. Achour<sup>b</sup>, C. Ferrari<sup>c</sup>, E. Buffani<sup>c</sup>, L. Larazani<sup>c</sup>.<sup>a</sup> Ecole Nationale Supérieure de Biotechnologie, Université Ali Mendjeli, BP E66 25100, Constantine, Algeria.<sup>c</sup> IMEM-CNR Institute, Parco Area delle Scienze 37/A, 43124 Parma (Italy).<sup>b</sup> Ecole Nationale Supérieure polytechnique, Université Ali Mendjeli, BP E66 25100, Constantine, Algeria.[lakehal.lakehal@gmail.com](mailto:lakehal.lakehal@gmail.com)**Abstract**

Nanocomposite thin films with high porosity have a very extensive surface area, such as rods or quantum dots which would make them ideal for band-gap engineering, doubling the surface area typically doubles the reaction rate. The manipulation of ZnO nanorods properties by the exchange ions method provides a simple strategy for controlling the cadmium sulfide (CdS) QD size distribution and photoluminescence emission. This paper discusses the preparation and characterization of ZnO and ZnO/CdS nanostructures confirming the well aligned ZnO nanorods and observing the ZnO/CdS core-shell morphology, structure, chemical composition, orientation, or crystalline quality using X-ray diffraction (XRD), Atomic Force Microscopy (AFM), Scanning Electron Microscopy (SEM) and Energy Dispersive X-ray (EDX). Enhancement in optical property as a result investigated by UV-vis absorption spectroscopy and Cathodoluminescence (CL) techniques.

**Key words:** nanoparticles, nanorods, ZnO, CdS, core-shell.**Introduction**

Recently, researchs efforts have been focused on sensitizing ZnO nanorods with semiconductor nanocrystals [1], owing to their specific advantages as light harvesters, such as tunable band gaps [2], CdS is a promising candidate due to its exceptional chemical and physical properties. It is a semiconductor with a direct band gap,  $E_g=2.40$  eV, and their size dependent optical absorption properties [5]. In this paper, we designed a ZnO-CdS composite, in which a ZnO nanorods with a diameter of 70 to 100 nm prepared through hydrothermal method served as the n-type semiconductor and CdS shell synthesized by the exchange ions method, was introduced as the shell sensitizer and p-type layer.

**Conclusion**

In summary, The CdS shells were grown along ZnO nanorod arrays by exchange ion method. The visible sensitization by a low band gap semiconductor such as CdS gives rise to an enhanced absorption which promises an efficient photoelectronchemical application of the composite.

**References**

- [1] Improve photo-electron conversion efficiency of ZnO/CdS coaxial nanorods by p-type CdTe coating Ming-Jun Jin, Xue-Yan Chen, Zhi-Ming Gao, Tao Ling and Xi-Wen Du, *Nanotechnology* 23 (2012) 485401 (8pp).
- [3] Structural and optical characterization of CdS nanoparticles synthesized using a simple chemical reaction route r. elilarassi\*, s. maheshwari, g. chandrasekaran. *optoelectronics and advanced materials – rapid communications* Vol. 4, No. 3, March 2010, p. 309 – 312.

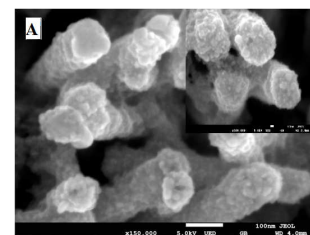


Fig. 1: (A) SEM images of CdS sensitized ZnO nanorods



## P35 – CPCQ2017

## ELABORATION AND CHARACTERISATION OF Si /PBT AND ITO /PBT COMPOSITE FILMS.

Leila Lamiri<sup>a,b\*</sup>, Belkacem Nessark<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire d'Electrochimie et Matériaux, Département de Génie des Procédés, Faculté de Technologie, Université Ferhat Abbas, Sétif 19000, Algeria<sup>b</sup> Research Center in Industrial Technologies CRTI, P.O. Box 64, Cheraga 16014, Algiers,\* [lamiri.lila@yahoo.fr](mailto:lamiri.lila@yahoo.fr)**Abstract**

This work reports on the photoelectrochemical and optical properties of polybithiophene (PBT) films electrochemically synthesized onto indium-tin oxide (ITO) and silicon substrates of different concentrations. The properties of the composite layers were studied by electrochemical method (cyclic voltammetry), scanning electron microscopy (SEM) energy dispersive X-ray spectroscopy, UV-visible and photoelectrochemical measurements. The photocurrent measurement showed good photoelectrochemical properties of this composite making it an ideal candidate for photovoltaic cell application.

**Keywords:** Composite material. Photocurrent, Polybithiophene, silicon

**Introduction**

Conjugated conducting polymers, such as polythiophene, can be synthesized electrochemically and deposited onto metal electrodes [1]. These polymers can be used in a wide range of applications such as electric conductors, batteries [2], solar cells [3], light emitting diodes [4], field effect transistors [5]. In the following we describe the electrochemical polymerization method which has been used to synthesize PBT. The principal advantage of this method is related to the better conducting properties of PBT, its improved electrochemical and morphological stability [6]. As polythiophenes are of particular interest for incorporation into photoelectrochemical cells [7] PTh present a good adherence to the electrode substrate (ITO).

**Scanning electron microscope (SEM)**

SEM morphology of PBT is shown in Fig. 1, the SEM image of PBT film in Fig. 1, it can clearly be observed that the film is formed small grains and is electrodeposited in a uniform way on all surfaces.

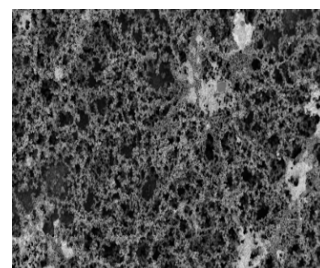


Fig. 1 : image SEM of PBT

**Conclusion**

Composite films of a conducting polymer and semi-conductor nanocomposite were obtained by deposited of coating on ITO and Si substrates. It was found that the composite material has stable electrochemical and good photocurrent response, which gives information on the possibility of application in photovoltaic cells.

**References**

- [1] J.-I. Honga, I.-H. Yeo, W.-K. Paik, J. Electrochem. Soc. 148 (2001) A156–A163.
- [2] K.-S. Park, S.B. Schougaard, J.B. Goodenough, Adv. Mater. 19 (2007) 848–851.
- [3] C.J. Brabec, N.S. Sariciftci, J.C. Hummelen, Adv. Funct. Mater. 11 (2001) 15–26.
- [4] L. Akcelrud, Prog. Polym. Sci. 28 (2003) 875–962.
- [5] B.S. Ong, Y. Wu, P. Liu, S. Gardner, J. Am. Chem. Soc. 126 (2004) 3378–3379.
- [6] F. Zhang, A. Petr, U. Kirbach, L. Dunsch, Highlights (2001) 33.
- [7] C.A. Cutler, A.K. Burrell, D.L. Officer, C.O. Too, G.G. Wallace, Synth. Met. 128(2002) 35

## P36 – CPCQ2017

STRUCTURAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF CRYSTALLINE Ni<sub>70</sub>Co<sub>30</sub> ALLOY PREPARED BY MECHANICAL MILLING.Nadia Loudjani<sup>\*</sup>, Mostepha Benchiheb<sup>b</sup>, Mohamed Bououdina<sup>c</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Microstructures et Défauts, University of Frères Mentouri, Constantine, Algeria.<sup>b</sup> Laboratoire d'Elaboration et d'Analyse des Matériaux LEAM, University Badji Mokhtar of Annaba, Annaba, Algeria<sup>c</sup> Nanotechnology Centre, University of Bahrain, PO Box 32038, Kingdom of Bahrain\* [loudjani\\_nadia@yahoo.fr](mailto:loudjani_nadia@yahoo.fr)**Abstract**

Ni<sub>70</sub>Co<sub>30</sub> mixture powder was mechanically alloyed by high energy planetary ball milling, starting from elemental Co and Ni metal powders. The microstructural and magnetic properties of the milled powders were characterized respectively by X-ray diffraction and vibratory sample magnetometer. Two FCC solid solutions, Co(Ni) and Ni(Co), were observed after 5 h of milling. Magnetic measurements of the milled Ni<sub>70</sub>Co<sub>30</sub> alloy powder exhibit a soft ferromagnetic character where the magnetic parameters are sensitive to the milling time mainly due to the particles size refinement as well as the formation of Co(Ni) and Ni(Co) solid solutions. Both the saturation magnetization (Ms) and coercivity (Hc) were found to decrease with milling time.

**Keywords** : Nanocrystalline materials; X-ray diffraction; Magnetization; Microstructure.

**Introduction**

A considerable change in the magnetic behaviour have been observed for the nanocrystalline ferromagnetic materials compared to the conventional materials, which are strongly dependent on many parameters such as composition [1,2] crystallographic texture, internal stress, particles shape anisotropy and particles size distribution.

**Results and Discussion**

The evolution of the XRD patterns of the mechanically alloyed Ni<sub>70</sub>Co<sub>30</sub> powders is shown in Fig. 1. From the XRD patterns, the unmilled powder mixture (0 h) exhibits the presence of two allotropic structures of cobalt (hcp) and (fcc) and Nickel (fcc) powders peaks. As milling progress, the broadening of the peaks and consequently the decrease of their intensities are the result of three contributions which are the continuous decrease of the crystallite size, the increase of the atomic level strain as well as the stacking faults induced by plastic deformations and fracturing processes. The slight shift of the main Ni and/or Co diffraction peaks towards smaller 2 θ angles can be correlated to the lattice distortion of Ni and/or Co arising from their interdiffusion. Fig. 2 illustrates the milling time dependence of the hysteresis loops, at 300 K, of the milled Ni<sub>70</sub>Co<sub>30</sub> powder. These sigmoidal hysteresis cycles are usually observed in nanostructured samples with small magnetic domains. This is due to the presence of structural distortions inside particles. The small hysteresis losses are properties generally desired in soft magnetic materials.

**Conclusion**

Structural and magnetic evolutions of Co<sub>30</sub>Ni<sub>70</sub> powder mixture obtained by mechanical milling were investigated. XRD patterns also show the allotropic transformation of cobalt HCP ↔ FCC and the formation of two FCC solid solutions. Milling has induced some changes in the magnetic properties, the variation of the values of both the saturation magnetisation and coercivity were associated mainly to the particles size refinement, accumulation of microstrains and the formation of solid solutions Co(Ni) and Ni(Co) during milling.

**References**

- [1] C. Suryanarayana, Prog. Mater. Sci. (2001)46, 1.
- [2] N. Loudjani, M. Benchiheb, M. Bououdina, Structural, J Supercond Nov Magn (2016).

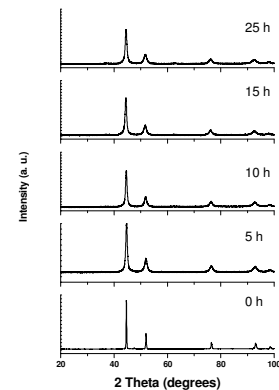


Fig. 1: of the XRD patterns of the Ni<sub>70</sub>Co<sub>30</sub> powder

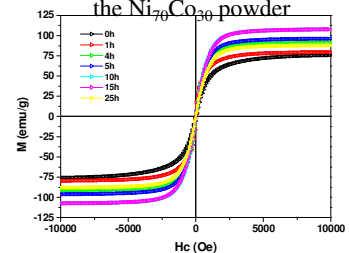


Fig. 2 : Evolution of hysteresis curves for different milling time



## P37 – CPCQ2017

## DETERMINATION OF THE DOPING DENSITY OF ZINC OXIDE NANOPARTICLES BY THE ELECTROCHEMICAL TECHNIQUE.

Mahdi Mansour<sup>a\*</sup>, Mohamed Saidi<sup>a</sup>, Nadia Saidi-Amroun<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique des Matériaux, Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, Alger, Algérie  
\* [mansourmahdi@usthb.dz](mailto:mansourmahdi@usthb.dz)

**Abstract**

In the present communication, we report on the determination of free carriers density of undoped and 0.8% Al-doped zinc oxide nanoparticles (ZnONs) by the electrochemical technique. The doped sample shows a clear increase in free charge carriers concentration by almost one order of magnitude indicating a strong improvement in the electrical properties via the incorporation of 0.8% Al into the ZnONs structure.

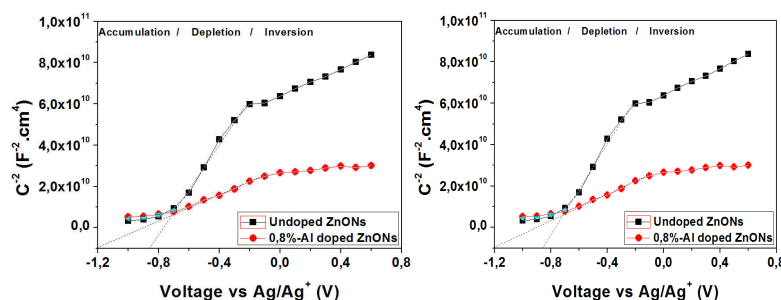
**Keywords :** Doping density, electrochemical impedance spectroscopy, Mott-Schottky, ZnONs

**Introduction**

The improvement of the electrical conductivity of metal oxide semiconductor nanoparticles (MOSNs) by the doping process has been the subject of numerous studies over the last few decades [1]. However, the specific nano-sized morphology of MOSNs makes their electrical characterization a difficult process. For that reason, several non-destructive experimental approaches have been developed to determine the doping concentration of MOSNs [2]. In this communication, the doping density of undoped and 0.8%-Al doped zinc oxide nanoparticles (ZnONs) is determined by the electrochemical impedance spectroscopy method using a three electrodes cell assembly; Pt electrode as counter electrode, Ag/AgCl (3 M KCl) as reference electrode and the ZnONs as working electrode which was prepared by the drop casting the solution processed ZnONs (dispersed in isopropanol) over glass/ITO commercial substrat. In addition, a propylene carbonate (0.1 M LiClO<sub>4</sub>) is used as electrolyte. Then, the sample was subjected to a voltage stress of 20 mV at frequencies from 10 kHz to 1 Hz. The doping concentration of the undoped and the 0.8% Al-doped ZnONs were determined from the corresponding Mott-Scottky characteristics which were extracted from Niquist plots

**Results and discussion**

Figure 1 depicts typical MS characteristics of the undoped and 0.8% Al-doped ZnONs. These curves show the establishment of the three common bias regimes of the ZnONs/LiClO<sub>4</sub> junction; accumulation, depletion and inversion. Interestingly, the positive slope of both depletion zones reveals the n-type of samples. Also, the slope of both depletion zones provide access to the doping density determination; the calculated values are  $1.7 \times 10^{19}$  and  $1.6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  for the undoped and doped ZnONs respectively, indicating an increase in the free electrons concentration by almost one order of magnitude through the incorporation of 0.8% Al in the ZnONs structure. Thus, this makes the 0.8%-Al doped ZnONs potentially applicable for optoelectronic devices such as the photovoltaic domain.



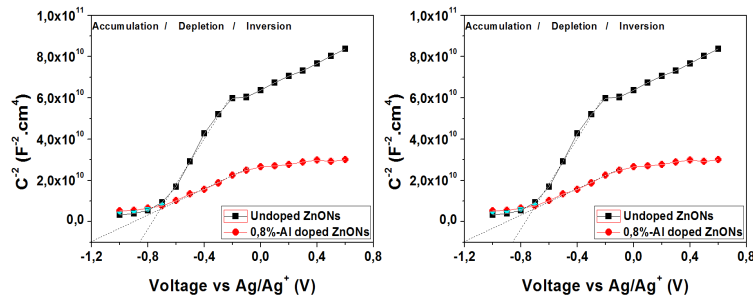


Fig.4: Mott-Schottky curves of undoped and Al doped ZnONs

## Conclusion

From the obtained results, we can conclude that the electrochemical impedance spectroscopy is a non-destructive characterization method that gives useful information regarding the determination of the doping density of semiconductors.

## References

- [1] C.Ye, Y.Bando, X.Fang, D.Goldberg, *Journal of Physical Chemistry*, 111 (2007) 12673-12676.  
 [2] J.-J. Wu, D. K.-P. Wong, *Advanced Materials*, 19 (2007) 2015-2019.

## P38 – CPCQ2017

### ELECTRODEPOSITION DE L'ALLIAGE $\text{Co}_{50}\text{Fe}_{50}$ : COUCHES MINCES ET NANOFILS.

N. Mansouri<sup>a</sup>, S. Boudinar<sup>a</sup>, N. Benbrahim<sup>a</sup>, E. Chainet<sup>b,c</sup>, F. Charlot<sup>b</sup>, B. Benfedda<sup>a</sup> et A. Kadri<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de Physique et Chimie des Matériaux (LPCM), Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie*

<sup>b</sup> *Université Grenoble-Alpes, LEPMI, F-38000 Grenoble, France*

<sup>c</sup> *CNRS, LEPMI, F-38000 Grenoble, FRANCE*

\* [mansouri.naima08@yahoo.fr](mailto:mansouri.naima08@yahoo.fr)

## Résumé

Nous rapportons dans ce travail, l'étude de la cinétique de dépôt de l'alliage CoFe, l'électrodéposition en couches minces ainsi que son élaboration sous forme de nanofils. Nous avons fait dans un premier temps une étude cinétique par voltamétrie cyclique et chronoampérométrie. Nous avons en premier lieu effectué une étude cinétique (voltamétrie cyclique) dans le but de déterminer la gamme des potentiels possibles pour le dépôt de notre alliage, par la suite, des dépôts de couches minces  $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}$  ont été élaborés sur des substrats cuivre à différents potentiels et pour différents rapports de concentrations en ions Co(II) et Fe(II). Les résultats d'analyse par microscopie électronique à balayage (MEB) couplé à la microanalyse (EDS) ont montré une forte dépendance de la composition des dépôts avec le potentiel appliqué ainsi qu'avec le rapport de concentration. L'obtention de l'alliage équiatomique  $\text{Co}_{50}\text{Fe}_{50}$  est possible dans des conditions bien précises. Nous avons par la suite appliqué ces conditions pour le dépôt de nanofils  $\text{Co}_{50}\text{Fe}_{50}$  dans des membranes nanoporeuses d'alumine.

**Mots clés :** Al/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ , Alliage  $\text{Co}_{50}\text{Fe}_{50}$ ; Cinétique électrochimique; Couches minces; nanofils.

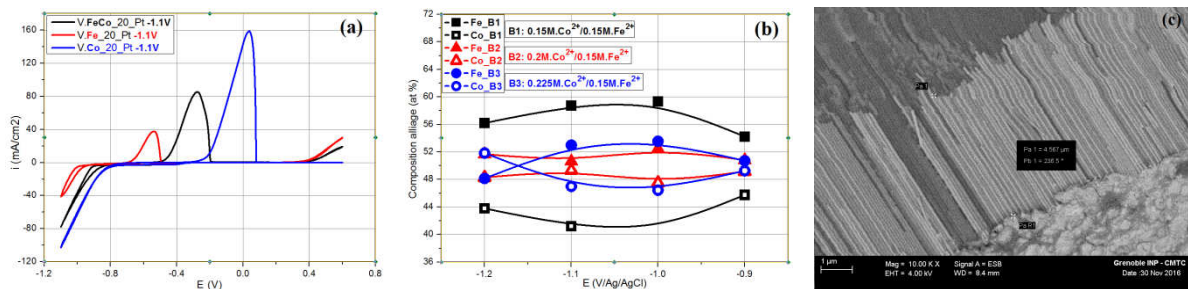
## Introduction

Le système ferromagnétique CoFe avec une composition 50/50 présente une aimantation à saturation la plus élevée des alliages magnétiques doux les plus connus, une caractéristique grâce à laquelle il se fait une place importante dans le domaine de l'enregistrement magnétique. Nous présentons dans ce travail l'étude de la cinétique de dépôt du système CoFe suivi de son électrodéposition en couches minces et nanofils. L'élaboration de ces derniers nécessite une préparation de supports permettant la mise en forme longiligne de cet alliage. Ces matrices ont été élaborées par deux méthodes différentes.

### Conditions et résultats expérimentaux

L'étude électrochimique de l'alliage FeCo menée dans un bain contenant les ions métalliques des deux éléments a montré un pic de dissolution compris entre les deux pics correspondants au Fe et Co, ce qui implique un dépôt d'alliage dans ces conditions (Fig.1-a). L'analyse des dépôts à différents potentiels dans différents bains a confirmé nos suggestions. La composition de l'alliage varie avec le potentiel et le rapport des concentrations des ions métalliques Fe(II) et Co(II) (Fig.1-b).

Pour déposer des nanofils de CoFe, deux types de membranes nanoporeuses ont été préparées : des membranes d'alumine pour lesquelles la couche barrière isolante séparant l'alumine poreux et l'aluminium a été amincie lors du processus d'anodisation, et des membranes pour lesquelles cette couche isolante a été éliminée chimiquement et remplacée par une couche métallique de cuivre déposée par voie physique. Les résultats d'analyse MEB ont révélé un meilleur remplissage pour le second type de membranes, où des nanofils de 4.5  $\mu\text{m}$  de longueur ont été observés (Fig.1-c).



**Fig.1** (a) voltammétrie cyclique d'oxydoréduction du CoFe - Fe - Co (b) courbes de composition de l'alliage FeCo en fonction du potentiel et de la concentration du bain en Co(II). (c) image MEB transversale des nanofils de CoFe à l'intérieur de la membrane d'alumine métallisée.

## P39 – CPCQ2017

### ELABORATION ET CARACTERISATION DES NANOCOMPOSITES.

Nesrinne Seddiki<sup>a\*</sup>, Djamel Aliouche<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de traitement et mise en forme des polymères, Université M'hamed Bougaraa, Boumerdes, Algérie  
\* [n\\_seddiki1@yahoo.fr](mailto:n_seddiki1@yahoo.fr)

#### Résumé

Dans ce travail nous avons procédé à la synthèse d'une série des nanocomposites à base de polymère avec l'argile la montmorillonite sodique (MMT-Na), la polymérisation se fait par voie in situ, nous avons fait varier le taux d'argile de (0-4)% en poids et la concentration de polymère a été fixé à 8% en poids. L'ensemble de ces nanocomposites (Polymère/MMT-Na) a été caractérisé en spectroscopie infrarouge (FTIR), en Diffraction des rayons X (DRX) et par microscopie électronique en transmission (MET), le nanocomposite obtenu est un nanocomposite intercalé.

**Mots clés :** nanocomposite, poly (N-isopropylacrylamide), montmorillonite sodique, gonflement

#### Introduction

Les matériaux nanocomposites constituent une nouvelle classe de polymères chargés ou les dimensions des particules dispersées sont dans le domaine du nanomètre [1]. Ces matériaux sont habituellement obtenus en introduisant dans la matrice polymère une charge minérale, souvent constituée d'un silicate feuilleté tel que l'argile. Haraguchi et al ont préparé des nanocomposites à base de poly (N-isopropylacrylamide) et d'argile laponite, l'argile inorganique remplace l'agent de réticulation organique, le nanocomposite synthétisé possède des propriétés mécanique importante, une grande transparence, un allongement à la rupture arrive jusqu'à 1300% [2-4].

#### Partie Expérimentale

##### Matériels

Les réactifs utilisés sont : N-isopropylacrylamide (NIPAAm) (Acros organics), montmorillonite sodique (MMT-Na), persulfate de potassium (KPS) (Panreac), N, N, N', N'-tetraméthylethylènediamine (TEMED) (Panreac), Tous ces produits sont de grade réactif et utilisés tels que reçus, par contre le NIPAAm est purifié par recristallisation, la montmorillonite sodique est obtenu par la sodification de la montmorillonite naturelle (la magnite) issue des gisements de Maghnia (Algérie)[5]

#### Méthodes de synthèses

Les nanocomposites (MMT-Na/NIPAAm) sont synthétisés par voie radicalaire, par polymérisation in situ, la réaction est initiée par un système redox basé sur une solution de persulfate de potassium (KPS) avec le TEMED, respectivement initiateur et accélérateur. Nous avons fait dissoudre l'argile dans l'eau bidistillée, le mélange est maintenu sous agitation pendant 4 heures. On parallèle le monomère N-isopropylacrylamide (NIPAAm) a été dissout dans l'eau bidistillée, l'agitation est maintenu pendant 3 heures sous atmosphère d'azote, la quantité de monomère NIPAAm est de 8 % en poids wt%. Par la suite nous ajoutons la solution de monomère à la dispersion d'argile, l'agitation est maintenu pendant 3 heures, la réaction est initiée par un système redox basé sur une solution de persulfate de potassium (KPS) avec le TEMED, respectivement initiateur et accélérateur. La polymérisation est effectuée à 20 °c pendant 24 heures [6].

#### Résultats et discussion

##### Spectroscopie Infrarouge à transformé de fourrier (FTIR)

La Figure 1 montre les spectres infrarouges de la MMT-Na et ces nanocomposites (MMT-Na/PNIPAAm) à différentes concentrations d'argiles, la Figure 1 montre la présence des bandes d'absorption situées aux environs de  $3630\text{cm}^{-1}$ ,  $3444\text{cm}^{-1}$  et de  $1640\text{cm}^{-1}$  correspond au -OH de silicate, la bande  $1030\text{cm}^{-1}$  caractérise le groupement Si-O d'argile. Permettant d'identifier les nanocomposites (MMT-Na/PNIPAAm)[7].

##### Diffraction des rayons X aux grands angles

La Figure 2 (e) montre le diffractogramme de la montmorillonite sodique qui présente une distance interfoliaire  $d_{001}=12,47\text{\AA}$ . La Figure 2 (a),(b),(c) et (d) présente les diffractogrammes des nanocomposites (MMT-Na/PNIPAAm), à différentes concentrations d'argiles de (1 à 4)%, nous remarquons la disparition de pic basal de MMT-Na, et dans certains diffractogrammes déplacement de pic, ce qui permet de dire que nous avons obtenu un nanocomposite intercalé[8]

##### Microscopie à Transmission Electronique (TEM)

La Figure 3 montre Les images TEM des nanocomposites PNIPAAm/MMT-Na, nous remarquons des zones sombres qui présente les paquets d'argile dispersés. La présence des paquets d'argile dispersés dans le polymère forme un nanocomposite intercalés.

#### Conclusion

Nous avons obtenu des nanocomposites intercalés et nous confirmons nos résultats par la diffraction des rayons X (DRX) et la microscopie électronique à transmission (MET). Nous avons polymérisé l'argile avec le polymère sans modifier les propriétés de polymères.

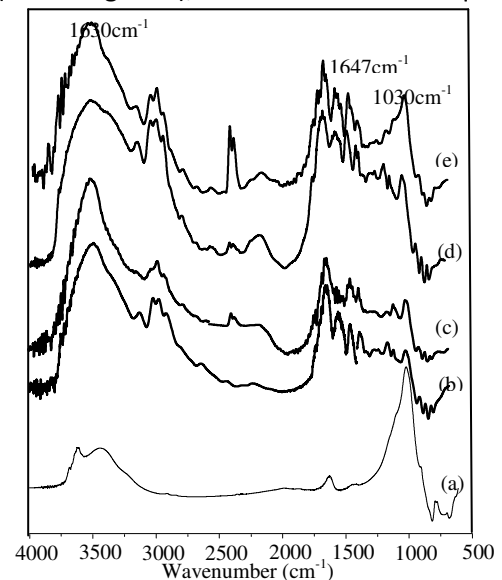


Fig.1 : spectre FTIR des nanocomposites (Na-MMT/NIPAAm), (a) MMT-Na, (b) 0.5%, (c) 1%, (d) 2%, (e) (4%).

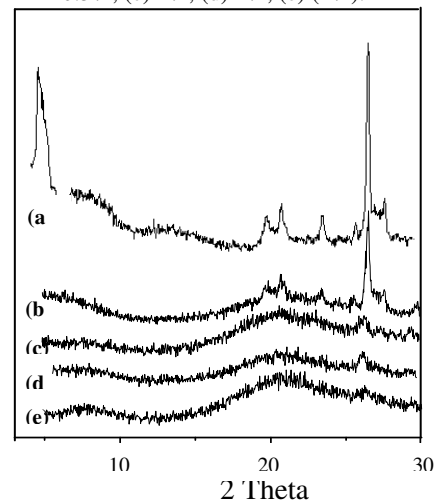


Fig.2 : Spectres DRX de la MMT-Na (a) et des nanocomposites PNIPAAm/MMT-Na à 0,5% de charge (b) ; 1% (c) ; 2% (d) et 4%

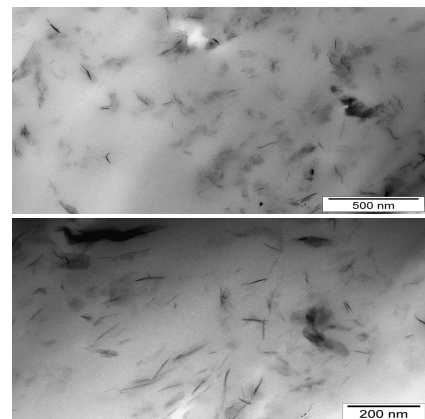


Fig.3 : Image TEM du nanocomposite (PNIPAAm-Na-MMT) à 4% de charge

## Références

- [1] M. Alexandre ; P. Dubois, *Mater.Sci.En*,28, 2000,1.  
 [2] K. Haraguchi; T. Takehisa; *Adv. Mater*, 14,2002, 1120.  
 [3] K. Haraguchi; R. Farnworth; A. Ohbayashi; T. Takehisa, *Macromol*, 36, 2003, 5732.  
 [4]K. Haraguchi ; HJ. Li ; K. Matsuda ; T. Takehisa ; E. Elliott, *Macromol*, 38, 2005, 3482.  
 [5]Moulahcene.F. *Elaboration et caractérisation de nanocomposites cellulose / montmorillonite*, Université de Boumerdes- Algérie, 2008.  
 [6]K. Haraguchi; T. Takehisa; M. Shibayama; J. Suda; K. Takeshi; S. Okabe, *Macromol*, 2004, 37, 9606.  
 [7]QS. Zhang; LS. Zha; JH. Ma; BR. Liang, *Macromol Rapid Commun*, 28, 2007, 116.  
 [8]T. Pojanavaraphan; D A. Schiraldi; R. Magaraphan, *Appl. Clay. Sci*, 50, 2010, 271.

## P40 – CPCQ2017

### PROPRIETES OPTIQUES ET STRUCTURALES DES NANOPARTICULES D'Ag<sub>2</sub>S.

Abdelhafid Souici<sup>a\*</sup>, Nihad Douas<sup>b</sup>, Wissam Mouhaou<sup>a</sup>, Salim Ouhenia<sup>a</sup>, Zahia Chafi<sup>a</sup>, Nassira Keghouche<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse (LPCMC), Faculté des Sciences Exactes, Université A Mira, Bejaia, Algérie*

<sup>b</sup> *Laboratoire Microstructures et Défauts dans les Matériaux (LMDM), Université Montouri 1, Constantine, Algérie*

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

## Résumé

Dans cette étude, des nanoparticules de semi-conducteur d'Ag<sub>2</sub>S ont été synthétisées par voie chimique en présence de l'éthylène-diamine-tétra acétique (EDTA). L'analyse effectuée par spectrophotométrie UV-visible a permis d'observer, au cours de la croissance, l'effet quantique de taille sur leurs propriétés optiques. En effet, grâce au contrôle de la croissance par EDTA, la bande d'absorption observée initialement dans la gamme ultraviolette se déplace graduellement vers le rouge, 700 nm, traduisant la formation des nanoparticules d'Ag<sub>2</sub>S de taille de plus en plus grande. La caractérisation par microscopie électronique à balayage (MEB) ainsi que la diffraction des rayons X (DRX) suivie d'une étude d'affinement Rietveld, ont permis l'identification de la phase monoclinique de groupe d'espace P21/c (n°14) et d'estimer la taille moyenne des nanoparticules à 100 nm.

**Mots clés :** Nanoparticules d'Ag<sub>2</sub>S, Semi-conducteurs I-VI, EDTA, Propriétés optiques, Propriétés structurales.

## Introduction

Les nanoparticules de semi-conducteurs possèdent des propriétés physiques différentes de celles de matériau à l'état massif. En raison de ces nouvelles propriétés, les nanoparticules semi-conductrices sont utilisées dans divers domaines [1]. Dans ce travail, nous étudions l'influence de l'EDTA sur les propriétés optiques et structurales des nanoparticules d'Ag<sub>2</sub>S.

## Propriétés des nanoparticules d'Ag<sub>2</sub>S

Les précurseurs utilisés dans la synthèse des nanoparticules d'Ag<sub>2</sub>S sont le théoacetamide (CH<sub>3</sub>C(S)NH<sub>2</sub>) et le sulfate d'argent (Ag<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) ainsi que l'EDTA comme agent stabilisant. L'étude des propriétés optiques par spectrophotométrie UV-visible montre un déplacement vers le rouge de la bande d'absorption caractéristique aux nanoparticules d'Ag<sub>2</sub>S. La figure 1, illustre l'évolution de la bande d'absorption entre 5 et 120s. Le point isobestique observé autour de 520 nm indique un changement de stœchiométrie dû à la formation de ces nanoparticules. Les observations par MEB ainsi que la caractérisation structurale par DRX suivie d'une étude d'affinement des digrammes de diffraction, confirment la formation des nanoparticules d'Ag<sub>2</sub>S de

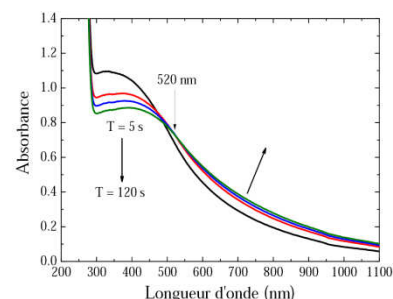


Fig 1 : Spectres d'absorption des nanoparticules d'Ag<sub>2</sub>S



phase monoclinique de groupe d'espace P21/c (n°14) et de taille moyenne d'environ 100 nm. L'étude montre également que, la taille finale des nanoparticules dépend de la concentration de l'EDTA.

### Conclusion

Les propriétés physico-chimiques de la molécule EDTA permettent non seulement la formation des nanoparticules d'Ag<sub>2</sub>S mais aussi de contrôler leur taille et d'observer, au cours de la croissance, le déplacement de la bande d'absorption. L'optimisation des conditions de synthèse peut améliorer le contrôle de leurs propriétés optiques et structurales.

### Références

[1] X Peng, J Wickman, A P Alvisatos, J. Am. Chem. Soc, 120 (1998) pp 5343-5344.

## P41 – CPCQ2017

### SUPERCAPACITANCE PERFORMANCE OF HEMATITE Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> NANOPARTICLES USING POLYOL PROCESS.

Abderaouf Zine<sup>a\*</sup>, Djamel Hamana<sup>b</sup>, Loubna Chetibi, Nadjeh Sobti, Slimane Achour

<sup>a</sup> Sciences des matériaux et applications, Frère Mentouri, Constantine1, Algérie

<sup>b</sup> Ecole National Polytechnique, Constantine 3, Constantine, Algérie

\* [zine.abderaouf@umc.edu.dz](mailto:zine.abderaouf@umc.edu.dz)

### Abstract

In this work, hematite nanoparticles are prepared by a simple green method at low temperature (Polyol) using Fe(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·6H<sub>2</sub>O as a reagent (0.6M), OLE extraction as a surfactant and distilled water as a solvent. In order to understand the influence of the extract solution of olive leaves, α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> powders has been characterized by XRD Pattern, Raman spectroscopy, FTIR measurements, BET for the specific surface area and Field emission scanning electron microscopy, This material can eliminate the problem of high cost of transition metal oxide and also narrow band gap. This material α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> could be used as active material for the energy storage application where we have check this material for one of the supercapacitors application as active material.

### Introduction

As an n-type semiconductor, hematite (α -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) has attracted a great deal of attention from researchers in different fields because of its nontoxicity, low cost, high stability under ambient conditions, and multiple functions. It has been intensively investigated for different applications such as lithium batteries [1-2], sensors [3], catalysts, [4] pigments [5] and so on. In particular, α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is chosen as supercapacitor electrode due to its large theoretical specific capacitance (3625 F.g<sup>-1</sup>), low cost, thermal stability, corrosion resistant, abundant in nature and environmental friendliness [6].

### Characterization

The phase composition and purity of the samples were characterized by X-ray diffraction (XRD) on a Spinner PW3064/60 (Model X'Pert PRO make Panalytical) diffractometer with CuKα radiation (λ=1.54060). Infrared spectra were recorded on a FTIR spectrometer using a KBr Matrix. The absorption spectrum of hematite iron oxide nanopowders were obtained by a UV-visible electronic absorption spectroscopy, Surface area were characterized by BET and images with field emission scanning electron microscopy.

### Conclusion

We check with hematite nanoparticles in supercapacitors devices and we have obtain that this material can be very useful as active material for supercapacitors application.

### Acknowledgments

First, i thank God (Allah) for this succes andI would like to thank my professors N. Sobti, L. Chetibi, S. Achour for their help either the DISAT department, Politecnico di Torino, Italie for their collaboration.

## References

- [1] Jain, G.; Balasubramanian, M.; Xu, J. J. Chem. Mater. (2006) 18-423.  
 [2] Wu, C. Z.; Yin, P.; Zhu, X.; OuYang, C. Z.; Xie, Y. J. Phys. Chem. B (2006) 110-17806.  
 [3] Gou, X. L.; Wang, G. X.; Kong, X. Y.; Wexler, D.; Horvat, J.; Yang, J.; Park, J. Chem.sEur. J. (2008) 14-5996.  
 [4] Hermanek, M.; Zboril, R.; Medrik, N.; Pechousek, J.; Gregor, C. J. Am. Chem. Soc. (2007) 129-10929.  
 [5] Feldmann, C. Adv. Mater. (2001) 13-1301.  
 [6] V. D. Nithya et al. Journal of Power Sources, 327 (2016) 297-318.

## P42 – CPCQ2017

### ETUDE EXPERIMENTALE ET THEORIQUE D'UNE LAMPE A KRYPTON PURE EXCITEE PAR DECHARGE A BARRIERES DIELECTRIQUES.

I. Z. Ait Menguellat<sup>(1)</sup>, N. Larbi Daho Bachir<sup>(1)</sup>, R. Kemit<sup>(1)</sup>, A. Belasri<sup>(1)</sup>, B. Caillier<sup>(2)</sup> and P. Guillot<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> LPPMCA Laboratoire physique des plasmas matériaux conducteur et leurs applications, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran – Mohamed Boudiaf, Algeria

<sup>(2)</sup> DPHE Plasma Lab. INU Champollion, Albi, Toulouse Université, France

\* [ikramait93@gmail.com](mailto:ikramait93@gmail.com)

## Résumé

Ce travail est une investigation théorique et expérimentale des propriétés électriques et cinétiques d'une décharge à barrières diélectriques dans le krypton et pour une géométrie de type plan-plan. L'étude théorique est basée sur un modèle d'homogénéité spatiale comprenant la cinétique chimique du plasma, le circuit électrique et l'équation de Boltzmann. La caractérisation expérimentale de la lampe est faite à la base des mesures des spectres optiques d'émission et des intensités du courant de la décharge électrique. Dans la partie résultat, on analyse les variations temporelles de la tension de la décharge, de la tension aux bornes des diélectriques, du courant de décharge, et des concentrations des différentes espèces présentes dans le milieu plasma.

**Mots clés** : caractérisation, décharge à barrières diélectrique, krypton, excimer, modélisation

## Introduction

Les décharges à barrières diélectriques sont utilisées sur une large gamme d'applications industrielles et scientifiques. Durant ces dernières années, les gaz rares sous excitation par décharge à barrières diélectriques (DBD), par leurs émissions très intenses dans UV, ont fait l'objet de nombreux travaux pour des applications médicales et environnementales. Les lampes à excimères (et exciplexes) excitées par DBD sont une source très attrayante pour le rayonnement UV et VUV notamment les UVC dont l'absorption par l'ADN est très importante.

## Partie expérimentale

La caractérisation de la lampe a été réalisée au laboratoire Diagnostics des Plasmas Hors équilibre (Albi-France) DPHE. A la base des mesures des spectres optiques d'émission et des mesures des intensités de courant pour différentes conditions de fonctionnement (pression, tension et fréquence). Le spectre d'émission est acquis avec un spectromètre d'optique océanique USB4000 (177nm-890nm). Les résultats ont été illustrés à la base d'une étude paramétrique.

## Conclusion

Le travail nous a permis d'analyser des caractéristiques électrique et cinétique d'un plasma haute pression dans une décharge à barrières diélectrique pour lampe à excimères de krypton. Dans le cas des conditions de fonctionnement normal. Les résultats montrent l'influence de certains paramètres, à savoir la tension appliquée, la pression du gaz et la fréquence.

## Références



- [1] N. Larbi Daho Bachir, A. Belasri, "A Simplified Numerical Study of the Kr/Cl<sub>2</sub> Plasma Chemistry in Dielectric Barrier Discharge", Plasma Science and Technology, Vol.15, No.4, Apr. 2013
- [2] B. Caillier, P. Guillot, I. Z. Ait Menguellat, N. Larbi Daho Bachir and A. Belasri "characteristics of krypton dielectric barrier discharge lamp", Conference Paper June 2016 Conference: 2016 IEEE International Conference on Plasma Science (ICOPS)

---

### P43 – CPCQ2017

## EFFECT OF APPLIED VOLTAGE IN DIELECTRIC BARRIER DISCHARGE FOR THE CONTROL OF THE RADIATED ULTRAVIOLET EFFICIENCY.

Salim Baadj<sup>a\*</sup>, Larbi Saaidia<sup>a</sup>, Nadjia Benhmed<sup>b</sup>, Mostafa Aouaichia<sup>c</sup>, Ahmed Belasri<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratory of Plasma Physics, Conductive Materials and Their Applications, Faculty of Physics, USTO\_MB, Algeria

<sup>b</sup>Laboratory of Applied Microbiology, Department of Biology, Faculty of Science, Oran University

<sup>c</sup>Laboratory for the Physical Studies of Material, Faculty of Physics, USTO\_MB, Algeria

\*[salimbaadj@hotmail.fr](mailto:salimbaadj@hotmail.fr)

### Abstract

This work reports the investigation of the excimer UV radiation efficiency in Xe/Cl<sub>2</sub> mixture in terms of the homogenous model of a dielectric barrier discharge. The computer model developed is based on the gas mixture chemistry, the circuit and the Boltzmann equations. The effects of operating voltage, on the discharge efficiency and the 308 nm photon generation, under typical experimental operating conditions, have been investigated and discussed. . The calculations indicate that the overall conversion efficiency of electrical energy to the radiation of ultraviolet in greater than 20% lamp, and it will be very affected at high voltage amplitude.

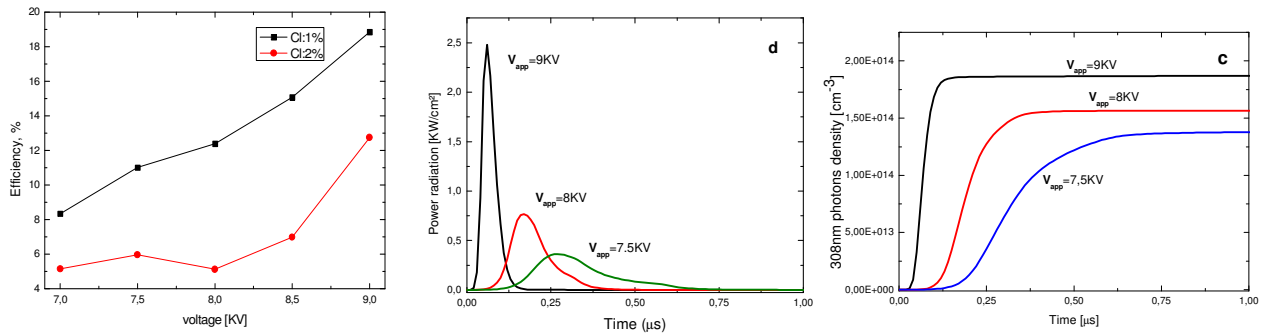
**Keywords** : dielectric barrier discharge, excimer lamp, kinetic, efficiency lamp.

### Introduction

Recently, dielectric barrier discharges (DBDs) in a rare gas or a mixture of rare gashalogen at near atmospheric pressures is one of the widely used as ultraviolet and vacuum ultraviolet (UV/VUV) sources in excimer lamps. These lamps are used especially in biological sterilization, lithography, material deposition in microelectronics, plasma display panels, destruction of pollutants and lighting . Recent theoretical and experimental investigations showed that pulse excited DBD is much efficient as UV sources, This work is focused on Xe/Cl<sub>2</sub> DBD's lamp, which produces short pulses of UV radiation at 308 nm. This light source would be attractive for photochemical applications and could replace laser systems. For this goal, the effect of applied voltage in dielectric barrier discharge for the control of the radiated ultraviolet efficiency are reported and analysed.

### Effect of the applied voltage

In order to see how the electrical and chemical characteristics of the plasma discharge can be affected by the amplitude of the applied voltage  $V_{app}$ , we have presented the temporal variations of the discharge current density, the electron and photon densities, and the deposited power density. The used applied voltages are 7.5, 8, and 9 kV. The dependence of the photon emission at 308 nm on the value of the applied voltage is also represented in Fig. 1. We see that the increase of the applied voltage increases the emission of UV radiation. This is mainly due to more power deposited in the discharge, and most of the energy dissipated in the excitation and ionization of xenon is used for the formation of  $XeCl^*$  and, consequently, for the production of UV. The temporal variation of the radiation power for 308 nm emission and corresponding to the  $XeCl^*$  (B-X) transition is shown in Fig. 2. The radiation power increases with the increase of the applied voltage, it reaches a maximum value of about 2.48 kW/cm<sup>3</sup> for an applied voltage of 9 kV.



### Conclusion

This work presents investigation of the excimer UV radiation efficiency for homogeneous DBD in xenon chloride mixture for operating conditions typical to excimer lamp, with the aim of controlling its UV radiation. The study based on a spatially homogeneous model including the plasma chemistry module, the circuit module, and the Boltzmann equation module investigates the effect of applied voltage of the radiated ultraviolet efficiency of high-pressure dielectric-barrier discharges. The result predicts that under these typical operating conditions of the DBD, the UV radiation efficiency is high  $\sim 19\%$  and it will be very affected at the applied voltage.

### References

- [1] Piquet, H.; Bhosle, S.; Diez, R.; Cousineau, M.; Djibrillah, M.; Le Thanh, D.; Dagang, A.N.; Zisis, G. *Quantum Electronics* **2012**, *42*, 157
- [2] S. Baadj, Z. Harrache, and A. Belasri, *Plasma Physics Reports*, **2013**, Vol. 39, No. 12, pp. 1043–1054.
- [3] Thorsteinsson, E.G.; Gudmundsson, J.T. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **2010**, *43*, 115201.
- [4] Pipa, A.V.; Bussiahn, R. *Contrib. Plasma Phys.* **2011**, *51*, 850.
- [5] Erofeev, M.V.; Tarasenko, V.F. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **2006**, *39*, 3609.

## P44 – CPCQ2017

## DIFFUSION IN QUASI-ONE-DIMENSIONAL STRONGLY COUPLED SYSTEM ON A QUASI-PERIODIC SUBSTRATE.

Ahmed Bekda<sup>a,b</sup>, Mourad Djebli<sup>a</sup><sup>a</sup> USTHB, Faculty of Physics, Theoretical Physics Laboratory, B.P. 32 Bab-Ezzouar, 16079 Algiers, Algeria<sup>b</sup> Department of Physics, University of Tizi-Ouzou, BP17 RP, 15000 Tizi-Ouzou, Algeria\* [bekdahmed@yahoo.fr](mailto:bekdahmed@yahoo.fr)**Abstract**

The transport of strongly coupled particles in a quasi-one-dimensional channel while being subjected to a quasi-periodic substrate potential (Harper Model) is investigated using molecular dynamics. Numerically solving, the Langevin equation allows us to investigate the effects of particle density, temperature, particle charge, amplitude of the quasi-periodic substrate, and the range of the inter-particle interaction potential on the diffusive behavior of the potential system. In general, we conclude that increasing the amplitude of the quasi-periodic substrate reduces the mobility of the particles, which for a critical value of the substrate amplitude leads to the pinning of particles at the minima of the substrate. Increasing the temperature of the system increases the mobility of the particles. Therefore, in order to obtain a fast diffusion process, an increase of the temperature of the system and a decrease of the intensity of the substrate is required.

**Keywords** : Strongly coupled systems, Diffusion**Introduction**

One component strongly coupled systems have been studied extensively in the past few years. These systems are present in the interiors of compact stellar remnants, in liquid metals, charged colloidal suspensions as well as complex plasmas. The analysis of diffusion equations in a strongly coupled Coulomb systems that leads to a Coulomb separation of ions is of importance in the understanding of white dwarfs and neutron stars evolution. Diffusion can also be discussed in terms of the movement of one particle. In a dusty plasma, the grain diffusion has a normal character where the collective and self-diffusion always exist simultaneously.

**Model and Numerical approach**

The system is composed of identical point-like charged particles interacting through screened Coulomb potential (Yukawa potential). The particles are restricted to move in a 2D plane and are subjected to an external parabolic confinement in the y direction and a quasi-periodic substrate along the x direction.

**Conclusion**

We used a Brownian dynamic simulations to study the diffusive motion of charged particles in a Q1D colloidal system subjected to a quasi-periodic substrate. In particular, we calculated the MSD for different substrate strengths. The simulations were performed for different values of particles charge, temperature and the density of particles. In general, we can conclude that increasing the amplitude of the quasi-periodic substrate will reduce the mobility of the particles, which for a critical value of the substrate strength leads to the pinning of particles at the minima of the substrate. Increasing the temperature of the system will liberate the mobility of particles. Therefore, at constant particles charge, to obtain a fast diffusion process, we need to increase the temperature of the system

and decreases the intensity of substrate. Increasing the charge of particles has a major effect on the rate of diffusion.

**References**

- [1] J.C.N. Carvalho and K. Nelissen and W.P. Ferreira and G.A. Farias and F.M. Peeters, Phys. Rev. E (2012) 021136.
- [2] S. A. Khrapak and A. G. Khrapak, Physics of Plasma 21, (2014) 104505.
- [3] M.D. Jones and D.M. Ceperley, Phys. Rev. Lett. 76 (1996) 4572.
- [4] R. Redmer, Phys. Rep. 35 (1997) 282.

## P45 – CPCQ2017

## EFFETS DE LA CONCENTRATION Bi SUR L'OPTIMISATION D'UN LASER À DOUBLE CAVITÉS PASSIVEMENT Q-DÉCLENCHÉ DOPÉ Yb: Bi.

Djillali Djellout<sup>a\*</sup>, Hocine Djellout<sup>b</sup>

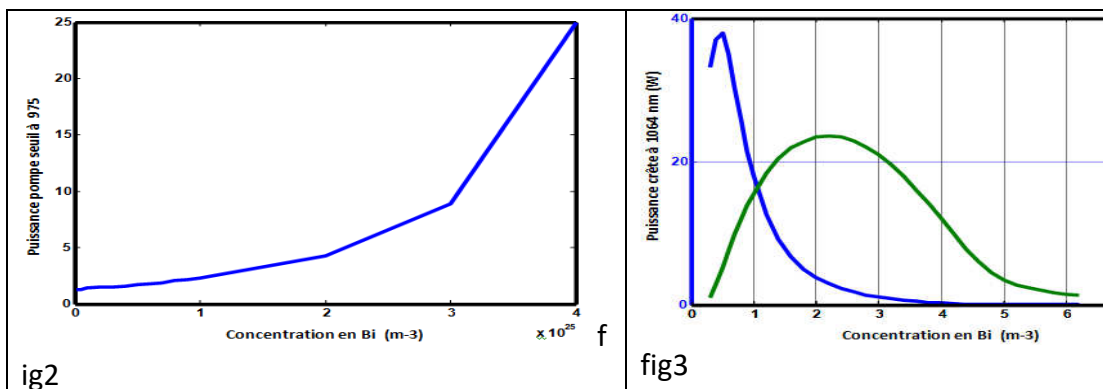
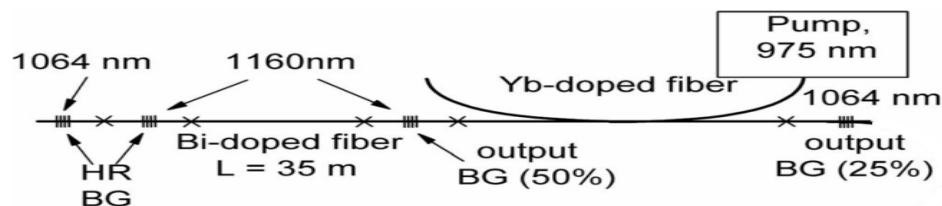
Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, UMMTO, Tizi-Ouzou, Algérie  
[djellout85@yahoo.fr](mailto:djellout85@yahoo.fr)

## Résumé

Dans ce travail nous avons modélisé et simulé le fonctionnement d'un laser à double cavités entièrement fibré passivement Q-déclenché dopé Yb:Bi. Deux trains d'impulsions sont produits par ce laser, le premier est à la longueur d'onde de 1064 nm, et le deuxième est à 1160 nm. Ces résultats sont en accord qualitatif avec ceux publiés dans la littérature. Dans ce travail on montre que la concentration en ions absorbant saturable a une grande influence sur l'optimisation de la puissance de sortie sur les deux longueurs d'onde. Cependant, la concentration en Bi qui optimise le train d'impulsion à 1064 nm est différente de celle qui optimise le train d'impulsion à 1160 nm. Ce résultat montre que l'optimisation des lasers passivement Q-déclenchés à double cavités est différente des lasers à une cavité.

**Mots clés :** laser à fibre, Q-déclenchement passif, double cavité.

L'architecture laser modélisée dans ce travail est celle publiée dans la référence [1] et illustrée sur la figure ci-dessous.



## Références

[1] V. V. Dvoyrin, V. M. Mashinsky, and E. M. Dianov, Optics Letters, vol 32(2007) pp 451-453.

## P46 – CPCQ2017

## SOME CHARACTERISTICS OF THE DECONFINEMENT PHASE TRANSITION IN A FINITE VOLUME FROM THE ORDER PARAMETER AND ITS DERIVATIVES.

R. Djida<sup>a\*</sup>, A. Ait El Djoudi<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique des Particules et Physique Statistique, ENS-Kouba, Alger, Algérie\* [rokayadjida@gmail.com](mailto:rokayadjida@gmail.com)**Abstract**

We study the thermal Deconfinement Phase Transition (DPT) from a Hadronic Gas (HG) phase to a color-singlet Quark Gluon Plasma (QGP) phase, at vanishing chemical potential, in a finite volume. For this purpose, we calculate the partition function of the QGP with the color-singletness requirement, using the projection method. The obtained partition function is then used for the calculation of mean values of some response functions, namely the order parameter and its three first thermal derivatives, whose behavior with temperature and volume is studied. Several characteristics of the DPT are obtained from this study.

**Keywords** : Confinement, QCD phase transition, partition function, color-singletness.

**Introduction**

To account for the color-singletness requirement in the QGP phase, we use the projection method [1] to calculate the QGP color-singlet partition function, including the volume term only in the density of states [2], in a first step. We use the partition function at vanishing chemical potential ( $\mu = 0$ ) within the model of coexisting phases [3, 4] to calculate mean values of characteristic quantities describing the system at the phase transition. The analytic derivation of the order parameter and its three first derivatives with respect to temperature is carried out, and the integral expressions are then calculated numerically. The such obtained results are translated into graphs, with varying temperature and for different volumes.

**Order parameter and its three first derivatives**

The following graph illustrates the order parameter  $\langle h \rangle$ , its first derivative representing the susceptibility  $\chi$  and the second and third derivatives with respect to temperature, at the volume  $V = 150 \text{ fm}^3$ . The effective transition temperature in small volumes, shifted from the true one in the thermodynamic limit, can be defined at the value  $\langle h \rangle = 0.5$ , meaning that both hadronic and QGP states contribute with equal probability to the total system. Similarly, it can be defined at the minimum of the susceptibility, at vanishing  $\langle h \rangle$  and at the maximum of  $\langle h \rangle''$ . Also, the width of the transition region over which the transition is rounded off can be defined as the gap in temperature between the extrema of the second derivative.

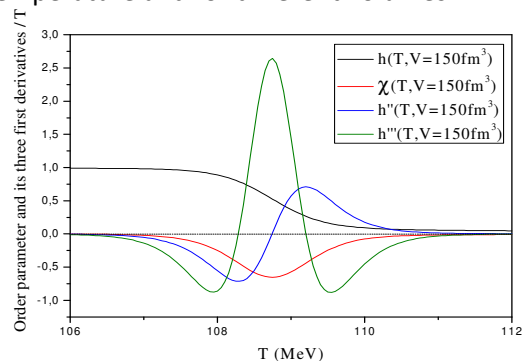


Fig. 1: Plot of  $\langle h \rangle$  and its three first derivatives versus temperature  $T$  for  $V=150 \text{ fm}^3$

ing  $\langle h \rangle$  and at the maximum of  $\langle h \rangle''$ . Also, the width of the transition region over which the transition is rounded off can be defined as the gap in temperature between the extrema of the second derivative.

**Conclusion**

The present study gives some characteristics of the DPT in a finite volume, namely the effective transition temperature and the width of the rounded transition region. Also, a similarity between the behavior of the three derivatives of the order parameter studied here and that of the three first cumulants of the probability distribution previously studied [4] is noted, and will be deeply analyzed to obtain further results concerning the occurring DPT.

**References**

- [1] K. Redlich and L. Turko, Z. Phys. C **5** (1980) 201; L. Turko, Phys. Lett. B **104** (1981) 153.
- [2] H.-Th. Elze and W. Greiner, Phys. Lett. B **179** (1986) 385.
- [3] C. Spieles, H. Stöcker and C. Greiner, Phys. Rev. C **57** (1998) 908. 153.
- [4] M. Ladrem and A. Ait El Djoudi, Eur. Phys. J. C **44** (2005) 257; A. Ait El Djoudi, Canad. J. Phys. Vol 91 N°10 (2013) 793.

## P47 – CPCQ2017

MOBILITÉ DES IONS  $N^+$  DANS UN GAZ D'HÉLIUM PAR TRAITEMENT QUANTIQUE DES SECTIONS EFFICACES.Syhem Lias<sup>a\*</sup>, Moncef Bouledroua<sup>b</sup>, Kamel Alioua<sup>c</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique de la Matière et du Rayonnement, Université Mohamed-Chérif Messaadia, Souk Ahras, Algerie<sup>b</sup> Laboratoire de Physique des Rayonnements, Université, Annaba, Algerie<sup>c</sup> Laboratoire de Physique de la Matière et du Rayonnement, Université Mohamed-Chérif Messaadia, Souk Ahras, Algerie\* [lias\\_syhem@hotmail.com](mailto:lias_syhem@hotmail.com)**Résumé**

Ce projet de recherche fait suite aux récentes mesures aux basses températures de la mobilité des ions d'azote  $N^+$  dans l'hélium par le groupe du Pr Tanuma de l'Université métropolitaine de Tokyo. Plus précisément, nous avons déterminé la mobilité dans He ( $1s^2$ ) des ions  $N^+$ , dans leurs états fondamentaux, aux deux température froide  $T = 4,3$  et  $77$  K. Nous avons d'abord calculé cette mobilité, avec des sections quantiques et sans effets spin-orbite, ensuite par introduction de ces effets lors de la détermination des courbes d'énergie potentielle des systèmes qui se dissocient asymptotiquement comme  $N^+(^3P) + He(^1S)$  et  $N^+(^1D) + He(^1S)$ . Et enfin, nous avons l'intention de déterminer la mobilité des ions  $N^+$  dans leurs états excités avec la même méthode. Ce projet de thèse se concentrera principalement sur le processus et la technologie des systèmes et surtout le comportement de la mobilité avec  $E/N$  du champ électrique sur la densité du gaz et tenter d'expliquer la diminution observée de la mobilité à la valeur  $E/N \sim 6$  Td.

**Mots clés :** Courbes d'énergie potentielle, Sections efficaces de transport, Théorie à trois températures, Coefficients de mobilité et de diffusion, Modèle de Chapman-Enskog.

**Introduction**

Ce travail présente plus précisément un calcul purement quantique des sections efficaces de transport à l'aide des potentiels ab initio, élaboré avec le package MOLPRO, de l'état fondamental  $N^+(^3P)+He(^1S)$  et de l'état excité métastable  $N^+(^1D) + He(^1S)$  et d'examiner théoriquement la mobilité des ions  $N^+$  dans He aux deux températures froides  $4.3$  et  $77$  K.

**Etude théorique**

Nous avons déterminé la mobilité des ions  $N^+$  dans He( $1s^2$ ) dans leurs états fondamentaux, aux deux températures froides  $T = 4.3$  et  $77$  K. On a calculé cette mobilité, dans un premier temps, avec des sections efficaces quantiques et sans effets spin-orbite, ensuite par introduction de ces effets lors de la détermination des courbes d'énergie potentielle des systèmes qui se dissocient asymptotiquement comme  $N^+(^3P) + He(^1S)$  et  $N^+(^1D) + He(^1S)$ . Notre projet s'intéressera essentiellement aux comportements de la mobilité avec le rapport  $E/N$  du champ électrique sur la densité du gaz et essaiera d'expliquer la diminution observée de la mobilité vers la valeur de  $E/N \sim 6$  Td.

**Conclusion**

Nous avons utilisé les sections efficaces quantiques de transport réalisées avec le codeortran GC.F90 pour déterminer, à des températures de  $4,3$  et  $77$  K, la mobilité des ions  $N^+$  dans He et pour examiner leur variation avec le rapport  $E/N$ . Ces paramètres de transport ont été comparés à des mesures publiées des ions  $N^+$  dans un gaz de He.

**Références**

- [1] McDaniel and Mason, The Mobility and Diffusion of Ions in Gases, (Wiley, New York, 1973).
- [2] Mason and McDaniel, Transport Properties of ions in Gases, (Wiley, New York, 1988).
- [4] Tanuma and Matoba, Mobility of ions in Gases, Tokyo Metropolitan University ( Unpublished).

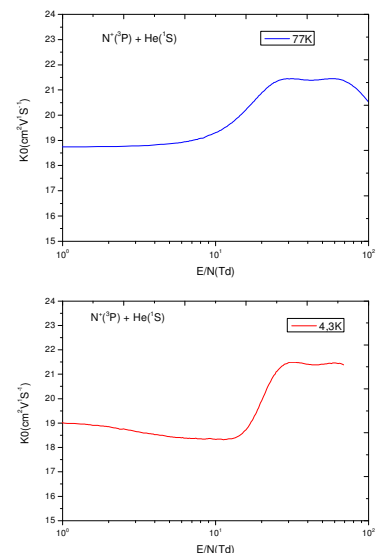


Fig. 1 : Mobilité des états fondamentaux  $N^+(^3P) + He(^1S)$  aux températures  $T=77$  K et  $T=4.3$  K

## P48 – CPCQ2017

## ÉTUDE DE L'ÉVOLUTION SPATIALE ET TEMPORELLE D'UNE LAMPE PLASMA DE DÉCHARGE À BARRIÈRE DIÉLECTRIQUE (Xe-Ne).

Imène Medjahed<sup>1\*</sup>, Sid Ahmed Beldjilali<sup>1</sup>, Ahmed Belasri<sup>1</sup>, Bruno Caillier<sup>2</sup> et Philippe Guillot<sup>2</sup>

<sup>1</sup>LPPMCA - Laboratoire de Physique des Plasmas, Matériaux Conducteurs et leurs Applications, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf USTO-MB, Oran, Algeria

<sup>2</sup> Université de Toulouse, Institut National Universitaire Champollion, DPHE, Place de Verdun 81012 Albi cedex 9, France

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

### Résumé

Durant ces dernières années, les gaz rares ou des mélanges gaz rare/halogène ont fait l'objet de nombreux travaux sous l'excitation par une décharge à barrières diélectriques (DBD). Dans ce travail, le développement spatial et temporel d'une lampe plasma à décharge à barrière diélectrique a été étudié pour quantifier l'influence des paramètres clés, tels que : la tension appliquée, la fréquence, le rapport cyclique et l'effet de la forme d'électrode sur le comportement du plasma.

**Mots clés :** Caractérisation, lampe plasma à décharge à barrières diélectrique DBD, Xénon, Néon, émission UV

### Introduction

Les lampes à excimères sont des sources intenses de rayonnement incohérent U.V. et U.V.L., et sont dotées d'une bonne efficacité énergétique (> 10%). La décharge électrique est produite grâce à un champ électrique suffisamment intense dans un gaz rare. Les émissions lumineuses proviennent de la désexcitation des molécules ou atomes. Le développement et l'optimisation de ces sources de photon à barrière diélectrique sont motivés par l'intérêt que suscitent ces lampes dans de nombreuses applications comme la photochimie, dépôt de matériaux, traitement de surface et la dépollution ou la décontamination [1].

### Partie expérimentale

Le dispositif expérimental est composé par une lampe de verre scellée, rempli d'un mélange néon-xénon à basse pression (5 torr). L'épaisseur de la paroi diélectrique est de 2 mm, le gap est de 1 cm. Les électrodes sont faites d'un matériau conducteur transparent et sont collées sur les deux faces externes de la lampe. Les électrodes peuvent être ainsi facilement façonnées ou modifiées pour tester différentes configurations conduisant à des comportements différents du développement du plasma. La lampe a été alimentée par une source de tension sinusoïdale dans une gamme de fréquences de 0,1-50 kHz. Des mesures de distribution optiques spatiales ont été réalisées avec un spectromètre USB4000 Ocean Optics (177nm-890nm) et d'autres résolue en temps à l'aide d'une caméra ICCD (Princeton PIMAX-1K-RB, 1024x1024) pour étudier le développement de la décharge [2].

### Conclusion

L'étude paramétrique effectuée en fonction de la tension appliquée, la fréquence et le rapport cyclique nous a permis déterminer les conditions optimales de fonctionnement de notre lampe. Cette étude permet ainsi d'optimiser les paramètres de fonctionnement des lampes excimères en réduisant la consommation d'énergie, en augmentant le rendement et la durée de vie.

### Référence

- [1] J. Ouyang, T. Callegari, B. Caillier, et J. P. Boeuf, *Plasma Science, IEEE Transactions on*, vol. 31, n° 3, p. 422-428 (2003).
- [2] B. Caillier, P. Guillot, I. Medjahed, S. A. Beldjilali, A. Belasri, *IEEE International Conference on Plasma Science (ICOPS 2016), Alberta, Canada, DOI : 10.1109/PLASMA.2016.7534274 (2016)*.



## P49 – CPCQ2017

## EFFET D'UNE CIBLE ERODEE SUR LES PROPRIETES DES COUCHES MINCES DEPOSEES PAR PULVERISATION MAGNETRON.

R. Tadjine<sup>a,b,\*</sup>, B. Daraf<sup>b</sup>, M.M. Alim<sup>a</sup>, M. Kechouane<sup>b</sup>.<sup>a</sup> CDTA, Cité du 20 Août 1956, BP N°17 Baba-Hassen -16303 Alger - Algérie<sup>b</sup> Université USTHB, BP32 El Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger - Algérie\* [rtadjine@cdta.dz](mailto:rtadjine@cdta.dz)**Résumé**

L'objectif de ce travail expérimental est l'étude de l'effet d'une cible érodée (usée) équipant un magnétron, sur les propriétés des couches minces telles que: la vitesse de dépôt, l'épaisseur, la résistivité et la morphologie. Les couches sont déposées par pulvérisation magnétron à basses pressions (0,1Pa-5Pa) et à une puissance de 200Watt. Les résultats obtenus seront comparés aux couches réalisées avec une cible neuve.

**Mots clés :** PVD, Pulvérisation Cathodique, Magnétron, Cible, Erosion.

**Introduction**

Ces dernières décennies, la pulvérisation magnétron est devenue le procédé de choix pour le dépôt physique en phase vapeur des couches minces. C'est une technique qui est très utilisée, dans des applications optiques et dans l'élaboration de nanoparticules. Il est bien connu que la cible d'un magnétron, est pulvérisée (érodée) de façon non uniforme [1]. Le développement du magnétron est un domaine d'actualité. Il reste néanmoins beaucoup à faire, pour la compréhension de l'effet de l'utilisation d'une cible érodée, sur le plasma [2] et sur les propriétés des films ainsi déposés [3].

**Dispositif expérimental**

Les dépôts ont été réalisés dans un réacteur plasma, équipé d'un magnétron 3 pouces et distant du substrat de 7cm. Pour cette étude comparative deux cibles de cuivre, neuve et usée, ont été utilisées.

**Résultats et discussion**

On constate que la vitesse de dépôt des couches obtenues avec les deux cibles, diminue avec la pression. Car la pression fait augmenter les collisions et élargit ainsi le flux des particules pulvérisées. Pour des conditions expérimentales identiques, la vitesse de dépôt (fig.1) est plus importante avec une cible neuve. Cela est dû à la forte énergie des ions bombardant la cible neuve. La vitesse de dépôt, paramètre important, diminue donc avec l'usure de la cible. La couche élaborée, avec une cible érodée (fig.2b), possède des cristallites de tailles comparables à celles élaborées avec la cible neuve (fig.2a); cependant, elle présente une surface rugueuse. Et cela est dû à l'utilisation de la cible érodée.

**Conclusion**

Afin de garantir une reproductibilité des couches déposées par magnétron, il est essentiel de suivre l'évolution de la cible par des mesures électriques in situ, et ainsi fixer une limite de son utilisation.

**Références**

- [1] D. Severin et al., *Thin Solid Films*, 515 (2007) 3554-3558.
- [2] R. Tadjine, M. M. Alim, M. Kechouane, *Surface & Coatings Technology* 309 (2017) 573-578
- [3] Q. Wei et al., *J. Phys. D. Appl. Phys.*, 42, (2009) 165304.

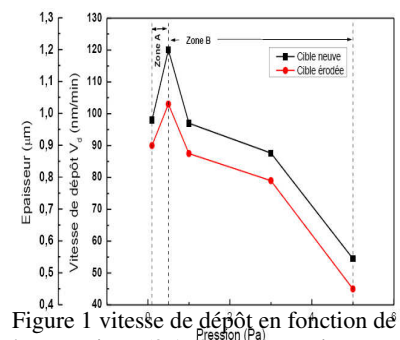


Figure 1 vitesse de dépôt en fonction de la pression (0.1 à 5Pa), puissance: 200W, pour cibles neuve et érodée.

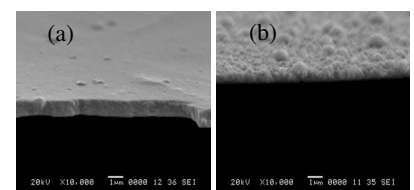


Figure 2. Photographies MEB des couches; pression 3 Pa; pour deux cibles : neuve (a), érodée (b)

## P50 – CPCQ2017

## ETUDE DE L'ÉMISSION DE LA MOLÉCULE C<sub>2</sub> DANS UN PLASMA DE CARBONE INDUIT PAR LASER SOUS AMBIANCE DE MÉTHANE.

Houssyen Yousfi<sup>a\*</sup>, Samira Abdelli-Messaci<sup>b</sup>, Ourida Ouamerli<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire Chimie Théorique Computationnel Photonique, USTHB, Alger, Algérie

<sup>b</sup> Laboratoire Interaction Laser Matière, CDTA, Alger, Algérie

\* [houssyenyousfi@mail.com](mailto:houssyenyousfi@mail.com)

### Résumé

L'étude par spectroscopie optique d'émission (OES), d'un plasma de carbone induit par laser excimère KrF (248 nm) a été réalisée sous vide et sous ambiance de méthane à des pressions de 0.3, 1 et 5 mbar. Plusieurs espèces ont été identifiées dans le plasma à savoir C, C<sup>+</sup>, C<sup>++</sup>, CH et C<sub>2</sub>. Nous avons, grâce aux signaux de temps de vol (TOF), suivi l'évolution de la molécule C<sub>2</sub> (système Swan) dans l'espace et dans le temps ainsi que les autres espèces. L'évolution spatiotemporelle de la molécule C<sub>2</sub> présente deux composantes. La première composante a une évolution linéaire et ne subit pas l'effet de la pression du gaz tandis que la deuxième composante suit l'évolution de l'espèce rapide le C<sup>+</sup> et sa vitesse diminue avec l'augmentation de la pression du CH<sub>4</sub>. Les deux composantes de C<sub>2</sub> proviennent de deux origines différentes.

**Mots clés:** Spectroscopie d'émission optique, plasma induit par laser, plasma de carbone.

### Introduction

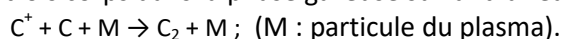
La spectroscopie d'émission optique (OES) est utilisée pour identifier les différentes espèces excitées (atomes, ions, molécules) dans les plasmas d'ablation laser. Elle constitue une technique performante pour l'analyse des plasmas sous vide et sous ambiance contrôlée. La complexité des processus qui se déroulent lors de l'ablation laser d'une cible solide, dépend de la fluence laser, de sa durée d'impulsion, de la nature et la pression du gaz ambiant ainsi que les propriétés physicochimiques de la cible irradiée. Nous discutons dans cette étude le rôle de la pression du méthane sur la cinétique de la molécule C<sub>2</sub>, en étudiant à partir des signaux de temps de vol, le comportement de cette molécule par rapport aux autres espèces du plasma sous vide et sous ambiance de méthane.

### Emission de la molécule C<sub>2</sub>

Nous représentons dans la figure.1 le profil temporel de la tête de bande (0,0) de la molécule C<sub>2</sub> à 516.51 nm à différentes distances. L'intensité d'émission diminue quand la distance d'observation augmente. La figure.2 montre les courbes distance-temps des espèces C, C<sup>+</sup>, C<sub>2</sub> et CH à 0.3 mbar du CH<sub>4</sub>. Nous observons une évolution linéaire de toutes les espèces avec la même vitesse durant les premiers instants d'expansion (t<0.5μs). A partir de la distance de 4 mm, leur vitesse diminue à cause des collisions avec les molécules de CH<sub>4</sub>. De plus la molécule C<sub>2</sub> suit l'évolution de l'espèce rapide C<sup>+</sup> à partir de 5 mm.

### Conclusion

Les espèces moléculaires du C<sub>2</sub> ont deux origines : les espèces lentes proviennent de la surface de la cible par la dissociation des clusters et celles qui sont rapides se forment par les processus de recombinaison à trois corps dans la phase gazeuse suivant la réaction [2]:



### Références

[1] Kunze, H. J. Introduction to Plasma Spectroscopy; Springer-Verlag: Heidelberg, 2009

[2] C. Park, J. T. Howe, R. L. Jaffe, and G. V. Candler, J. Thermophys. Heat Transfer **8**, 9 (1994).

### P51 – CPCQ2017

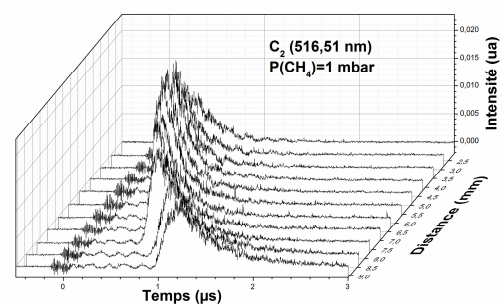


Figure 5: TOF de la molécule C<sub>2</sub>

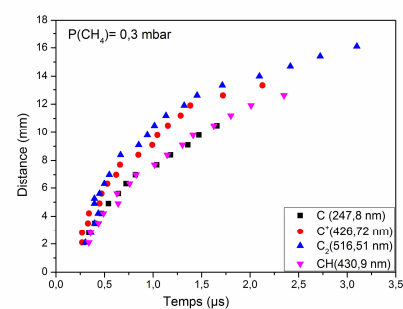


Figure 2: Courbes distance-temps des espèces C, C<sup>+</sup>, C<sub>2</sub> et CH

# THEORETICAL STUDY ON THE CHEMICAL REACTIVITY IN THE ARMCHAIR SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBE.

Bilal Achouri<sup>a,b\*</sup>, Meziane Brahimi<sup>a</sup>, and Yamina Belmiloud<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Physico Chimie Théorique et Chimie Informatique. Faculté de Chimie. Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene (USTHB). BP N° 32 El Alia. Alger. Algérie

<sup>b</sup> Centre de Recherches en Analyses Physico Chimiques. (CRAPC). Alger, Algérie.

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

## Abstract

We use the density functional theory (DFT) and ONIOM methods for study the mechanism of Proton Transfer (PT) and Methyl Group Transfer (MGT), both in gas phase and under the influence of encapsulation armchair single-walled carbon nanotube CNT. It is shown that PT reaction is disfavoured in single-walled CNT because it increases the energy barrier, while confinement in CNT decreases the energy barrier of MGT.

**Keywords:** Carbon nanotube, ONIOM and DFT.

## Introduction

Understanding the mechanism of simple reaction processes such as proton transfer (PT) and methyl groupe transfer (MGT) is a fundamental problem in bioenzymatic catalysis [1,2]. Derivation of any such mechanism usually requires as input detailed informations such as high resolution structures of the active site, protonation and methylation states of the reacting groups and results of structural and kinetic studies on mutation at one or more points at or near the active site. Often energetics of analogous proton transfer reactions in a simpler medium provide useful insight into the mechanism. In this work, we shall investigate the free energies of reaction and activation of PT and MGT reactions between groups suspended inside carbon nanotube (CNT. Remarkable structural, mechanical and electromechanical properties indicate potential use of CNTs in a wide range of applications [3]. However, we focus the possibility that (PT) and (MGT) reactions inside the CNTs.

## Energetic of PT and MGT:

We estimate the encapsulation energy by the following formula (1):

$$E_{\text{encaps}} = E_{\text{isome@CNT}} - (E_{\text{isomer}} + E_{\text{CNT}}) \quad (1)$$

## Conclusion

The MGT reaction is notably affected by the confinement CNT (6,6) in view of geometries and energy. The confinement CNT (6,6) has an influence on the structures and energy barriers, and the activation energies obviously decrease slightly. The most interesting result in this work is the important change for the internal energy variation of MGT reaction inside the CNT (6,6), which could mean that the regeneration of the DNA would be better in CNT.

## Acknowledgment:

The author gratefully acknowledges the financial support from the "Agence Thématique de Recherche en Sciences et Technologie" (ATRST-Algérie) through project FNR N° 376/15/11/2014.

## References

- [1] R.P. Feazell, N. Nakayama-Ratchford, H. Dai, S.J. Lippard, J. Am. Chem. 129 (2007) 8438–8439.
- [2] Bilal Achouri, Yamina Belmiloud and Meziane Brahimi, Phys., Chem., Res., (2017) 2, 239-251.
- [3] S. Iijima, Nature. 354 (1991) 56–58.

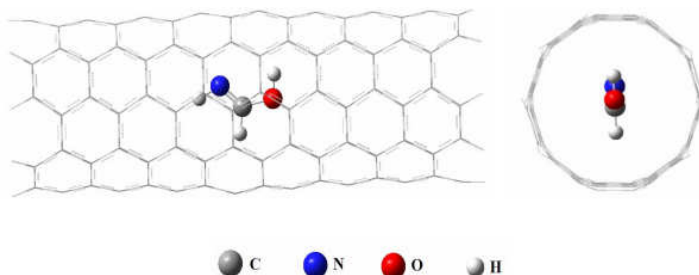


Fig. 1: Structure of (carbon nanotube/molecule) system studied

## P52 – CPCQ2017

## AB-INITIO STUDY OF THE SiF MOLECULE ADSORPTION ON Si(001) SURFACE.

L. Bouamama<sup>1\*</sup>, A. Lounis<sup>1</sup>, A. Mokrani<sup>2</sup>, A. Ziane<sup>1</sup><sup>1</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, Algérie<sup>2</sup> Institut des Matériaux Jean Rouxel, BP 32229, 2 rue de la Houssinière, F-44322 Nantes Cedex, France\* [lemya.bouamama@ummo.dz](mailto:lemya.bouamama@ummo.dz)**Abstract**

We have investigated the adsorption mechanism of SiF molecule incident on perfect Si(100) surface by means of first-principles calculations using pseudo-potential method implemented in SIESTA code. Stable adsorption geometries of SiF on Si(100) surface, as well as their corresponding adsorption energies are identified. We found that the SiF molecule interacts with the Si surface by two mechanisms of adsorption: dissociative and non dissociative adsorption. In the first case, the SiF molecule is found to be chemisorbed with the non dissociative mechanism on various sites of the Si surface. The most energetically favorable state is when the SiF molecule forms a bridge between two surface atoms. In the second case, the SiF molecule dissociates only in a few initial orientations with respect to the Si surface. Si atom of SiF molecule forms a double coordination with two Si surface atoms and the F atom forms a bond with another atom of Si surface.

**Keywords:** DFT, Etching, Silicon, Fluorine, Dissociative adsorption, Non dissociative adsorption

**Introduction**

The interaction of F with Si surfaces is of a great importance from both scientific and technological viewpoints. Since F is the most reactive atom it is of interest to study how it reacts with the Si surfaces [1]. The SiF molecule has been identified as gas phase products of the reaction between atomic fluorine and silicon surfaces. So, it's important to study the reaction mechanism of this molecule with the Si surface, find the geometries preferred by the system SiF / Si (001) and their corresponding adsorption energies.

**Results**

**Si-F molecule:** The calculated bond length of the free SiF molecule in the gas phase is determined to be 1.69 Å. This result is in good agreement with the experimental results (1.60 Å) [2].

**F/Si(100) system:** F atom prefers the bridge adsorption site with a high adsorption energy of 6.47 eV

**Si/Si(100) :** Si adsorbate forms a double coordination with two Si surface atoms with an adsorption energy of 5.6 eV.

**Binding sites of SiF on the Si(001) surface**

The SiF molecule adsorption on perfect Si(001) surface leads to two adsorption mechanisms, dissociative and non dissociative adsorption. In the dissociative case (figure 1.A), the calculated adsorption energy is 4.92 eV. The silicon atom of the SiF molecule is chemisorbed by the formation of a double coordination with two Si surface atoms. The fluorine atom is chemisorbed on a dangling bond of another Si surface atom, with a bond of 1.67 Å which is similar to that calculated in F/Si(001) system. In the non dissociative adsorption, four distinct adsorbed geometries were found. In all these cases, the molecule is fixed at the surface by its silicon atom. In the most stable configuration (figure 2.B), the adsorption energy is 4.82 eV. As in the adsorption of Si atom on Si(100) surface, the Si atom of SiF molecule forms a bridge between two surface atoms.

**Conclusion**

We have investigated the adsorption mechanism for SiF molecule on unreconstructed Si(100) surface. We have identified the various stable binding sites. We have found that, the SiF molecule can dissociate only in a few specific positions relative to the substrate with adsorption

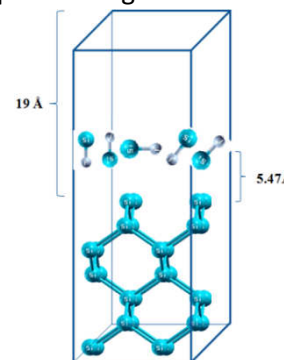


Figure 6: Schematic of the system studied

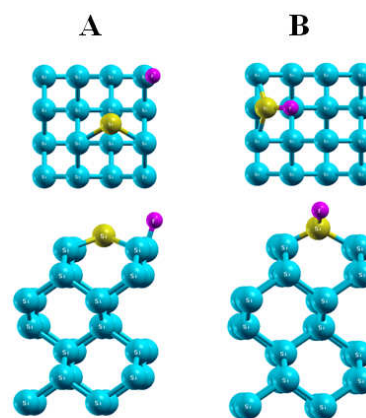


Figure 7: (A) Dissociative configuration of the SiF adsorption on Si(100) surface, (B) Most stable non dissociative configuration of SiF adsorption on the Si surface. Blue atoms design the Si slab atoms, pink atom is the fluorine and yellow atom is the Si atom of the molecule SiF.

energy of 4.11 eV. Otherwise, a comprehensive number of initial configurations of SiF on the Si(100) reduce to four energetically favorable adsorption geometries non dissociative for SiF on the Si(100) surface. In the most stable configuration, the SiF molecule forms a bridge between two adjacent atoms of the surface with adsorption energy of 4.82 eV.

### References

- [1] T. Ezaki, T. Ohno ; Surf. Sci. **444** (2000) 79–86  
 [2] W. Chase, C.A. Davies, J.R. Downey, D.J. Frurip, R.A.McDonald and A.N. Szverud, *JANAF Thermochemical Tables*, 3rd Ed., J. Phys. Chem. Ref. Data ( 1985).

## P53 – CPCQ2017

### STRUCTURAL, ELECTRONIC AND ELASTIC PROPERTIES OF FULL-HEUSLER ALLOYS Cs<sub>2</sub>VGe.

S. Cherid, S. Bentata, Z.F.Meghofel, F. Bendahma, Y. Sefir, S. Terkhi et Radouan Djelti

Laboratory of Technology and Solid's Properties, Faculty of Sciences and Technology, BP227, Abdelhamid Ibn Badis University, Mostaganem 27000, Algeria  
[samiracherid@yahoo.fr](mailto:samiracherid@yahoo.fr)

### Abstract

The electronic, structural, and elastic properties of full-Heusler alloys Cs<sub>2</sub>VGe are examined in this study using FPLAPW method based on density functional theory. Results of our calculations predict that the Hg<sub>2</sub>CuTi-type structure is more stable than the Cu<sub>2</sub>MnAl-type structure and the ground state of these alloy is ferromagnetic. Band structure of Cs<sub>2</sub>VGe shows half metallic in spin-down for GGA+U, and MBJ-GGA.

**Mots clés :** Full-Heusler; Ferromagnetic; Half metallic.

### Introduction

Half metallic materials are a subject of interest for applications, these materials possess half metallicity, where they are metals in one spin channel and narrow band gap semiconductors in other spin channel. The Heusler compounds have general chemical formula X<sub>2</sub>YZ, where X and Y are transition metal elements and Z is a sp valent element, they were firstly described and named in 1903 by Fritz Heusler [1]. In our calculations, we use the WIEN2K code [2] based on the full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW)[3]. In the present paper, the properties of full-Heusler Cs<sub>2</sub>VGe alloy were investigated by first principle calculations and stable structure was determined, these materials possess half metallicity, where they are metals in one spin channel and narrow band gap semiconductors in other spin channel. In this study, the structural, magnetic and elastic properties have been examined using the following approximations: GGA, GGA+U and MBJ-GGA.

### Conclusion

In our work, we have studied the optoelectronic, magnetic and elastic properties of the cubic full-Heusler Cs<sub>2</sub>VGe used the FPLAPW method based on density functional theory within the GGA, GGA+U and MBJ-GGA. The spin-polarized calculations confirm that this structure is best described in the stable ferromagnetic Hg<sub>2</sub>CuTi-type structure and exhibit indirect band-gap (Γ-X) this half-metallic character probably makes these compounds promising candidates for applications in spintronic.

### References

- [1] F. Heusler, Verh. Dtsch. Phys. Ges. 12 (1903) 219.  
 [2] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Hvasnicka, J. Luitz, WIEN2K, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Austria, 2001.  
 [3] J.C. Slater, Adv. Quantum chem.. 1 (1937) 35.



## P54 – CPCQ2017

ETUDE AB-INITIO DE LA DOUBLE PEROVSKITE  $Ba_2MnReO_6$ .

Djelti Benbella\*, Samir Bentata, Tayeb Lantri

Laboratoire de Technologie et Propriétés du Solide, Université Abdelhamid Ibn Badis, Mostaganem, Algérie

\* [b\\_djelti@yahoo.fr](mailto:b_djelti@yahoo.fr)**Résumé**

En se basant sur les calculs de la théorie de la fonctionnelle de densité, les propriétés structurelle, électronique, magnétique et élastique de la double pérovskite  $Ba_2MnReO_6$  ont été étudiées en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisés sous un potentiel total (FP-LAPW) avec les deux approches : approximation du gradient généralisé (GGA) et GGA+U implémentées dans le code Wien2K. Les résultats des calculs ont montré que le facteur de Hubbard (U) joue un rôle déterminant dans la caractérisation de la structure électronique du composé. L'état fondamental de ce matériau s'avère ferrimagnétique avec un moment total de spin de  $4\mu_B$ . Il possède un caractère spintronique ; métallique pour une orientation de spin et semi-conducteur pour l'autre. Les états de valences de Mn et Re sont suggérés d'être bivalent et hexavalent respectivement. Selon le critère de PUGH, ce matériau est ductile et stable.

**Mots clés :** Propriétés spintroniques, Double pérovskite, DFT, GGA.

**Introduction**

Les oxydes doubles perovskite ( $A_2BB'O_6$ ) continuent à attirer l'intérêt de la recherche, en raison de leurs propriétés électriques et magnétiques uniques qui incluent les effets de magnétorésistance, le caractère ferri-/ferromagnétique et le comportement métallique/demi-métallique. Ils sont employés dans des applications technologiques, telles que la mémoire de l'ordinateur, l'enregistrement magnétique, les sources d'électrons de mêmes spins, et les sondes magnétiques à haute efficacité [1].

**Méthode de calcul**

Nos calculs théoriques ab-initio sont basés sur la théorie de la fonctionnelle de densité DFT implémenté dans le code Wien2K. La méthode GGA est utilisée pour approximer le potentiel d'échange-correlation. Un facteur de correction de Hubbard (U) est ajouté au GGA pour prendre en considération les effets d'interactions fortes au niveau des orbitales (d). Les valeurs des paramètres d'interaction et d'échange de coulomb ( $U=4$  eV et  $J=0.9$  eV) sont pris pour l'orbital fortement corrélé Mn (3d) et ( $U=1$  eV et  $J=0.9$  eV) pour l'orbital moins corrélé Re (5d) [2]. Nous avons traité la  $Ba_2MnReO_6$  dans sa phase cubique (groupe d'espace Fm-3m, no. 225). Le facteur de tolérance de Goldschmit  $t=0.993$  approuve une cristallisation dans une structure cubique type-NaCl.

**Résultats et discussion**

L'optimisation totale de la structure pour différents états NM, FM et FiM, montre que la  $Ba_2MnReO_6$  est de type FiM avec un paramètre de maille  $a=15.3636$  Bohr, un bulk modulus  $B=179.08$ . Le moment magnétique total de spin est entier  $MT=4\mu_B$ . La structure de bande montre un gap direct de 1.8 eV pour les spins up, alors que pour les spins dn, ce matériau est métallique. La densité d'état est complètement polarisée au niveau de Fermi. Elle montre une forte hybridation entre Mn (3d) et O (2p) ainsi qu'entre Re (d- $t_{2g}$ ) et O (p $x$ +p $y$ ). Les coefficients d'élasticité  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  ont des valeurs de 289 Gpa, 114 Gpa et 80 Gpa respectivement. Le matériau est isotropique  $A=0.91 < 1$ . Il est stable selon les critères :  $C_{11}-C_{12} > 0$ ,  $C_{11} > 0$ ,  $C_{44} > 0$  et  $(C_{11}+C_{12}) > 0$  [3].

**Conclusion**

La  $Ba_2MnReO_6$  est un matériau spintronique stable dans la catégorie des semi-demi-métalliques.

**Références**

- [1] Y.P.Liu, H.R.Fuh, Y.K.Wang, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 341 (2013) 25–29
- [2] M. Musa Saad H.-E., Journal of Computational and Theoretical Chemistry, 1074 (2015) 107–111
- [3] D.C. Wallace, Thermodynamics of Crystals, John Wiley, New York, 1972.

## P55 – CPCQ2017

SIMULATION AB INITIO DES PROPRIETES PHYSIQUE DES CLUSTERS DE  $\text{FeTi}_n$  ( $n=1-10$ ).Rachida 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, \* [pgtizza@hotmail.com](mailto:pgtizza@hotmail.com)

**Résumé**

Les clusters des métaux de transition constituent aujourd'hui le vase d'une multitude de recherches dû à leurs excellentes propriétés et leurs éventuelles applications dans le domaine de la nanotechnologie. Les clusters de Titane sont particulièrement étudiés ces derniers temps, du point de vue théorique [1] qu'expérimentale [2] ; celui-ci offre des propriétés électroniques et magnétiques très intéressantes. Dans cette perspective, en se basant sur le calcul ab initio, la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et les pseudo potentiels implémentés dans le programme SIESTA pour étudier les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des systèmes Titane purs et de Titane dopés au Fer. Nous nous sommes intéressés aux systèmes de très faibles tailles avec un nombre d'atomes allant de 2 à 10. Les énergies de cohésion obtenues par atome ( $E_c$  /atome), le groupe ponctuelle de chaque structure et Gap ( $\Delta E$ ) HOMO – LUMO, le niveau de Fermi et le moment magnétique pour chaque clusters sont bien exposés et interprétés.

**Mots clés :** Nanomatériaux, cluster, simulation ab initio, DFT, propriétés électroniques.

**Introduction**

Les nanomatériaux et les matériaux nanostructurés ont été largement étudiés au cours de cette dernière décennie en raison de ces applications potentielles extrêmement variées. Les clusters de Ti ont eu leur part d'intérêt et ont été le sujet de différentes études.

**Energie de cohésion**

Afin de vérifier la stabilité des clusters du titane , l'énergie de cohésion des structures les plus stables en fonction de la taille est représentée dans la figure ci-contre.

**Conclusion**

Les résultats montrent que les énergies de cohésion par atomes des clusters augmentent avec l'augmentation de la taille, cependant que les valeurs des aps HOMO-LUMO diminuent avec l'augmentation de la taille ce qui nous informe sur le caractère métallique dominant lors du processus de croissance. Dans le cas des clusters de titane dopés au fer, les résultats affirment que la stabilité de ces clusters augmente après l'introduction de l'atome de fer.

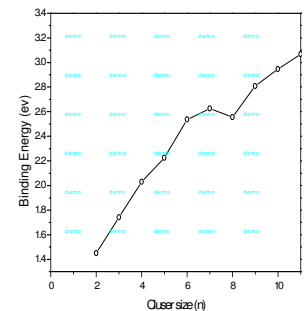


Figure 8: Énergie de cohésion par atome des structures les plus stables des clusters de Titane  $\text{Ti}_n$

**Références**

- [1] J.J. Zhao, Q. Qiu, B.L. Wang, J.L. Wang, G.H. Wang, Geometric and electronic properties of titanium clusters studied by ultrasoft pseudopotential, Solid State Commun. (2001). 118, 157–161.  
 [2] L. Lian, C.X. Su, P.B. Armentrout, Collision-induced dissociation of  $\text{Ti}_n$  ( $n = 2-22$ ) with Xe: bond energies, geometric structures, and dissociation pathways, J.Chem. Phys. (1992). 97, 4084–4093.



## P56 – CPCQ2017

## IMPACT OF ANTI-SITE DEFECT ON ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF THE FePt THIN FILMS.

Katia Hammar, Leila Messad, Abdelhamid Ziane

Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université de Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie  
 \*hammar.katia@yahoo.fr

**Abstract**

FePt alloys have attracted industrial interest as promising materials for manufacturing recording media [1-2], because of their advantageous properties: simple composition and high thermal stability with large magneto-crystalline anisotropy. We have applied the Density Functional Theory (DFT) method using the Generalized Gradient Approximation (GGA) to investigate the defect structure on the  $L1_0$  FePt surface. The presence of anti-site in the perfect surfaces (Fig. 1) induces changes in the electronic properties that can be quantitatively determined by the increase of the Fe magnetic moment in the both most outer atomic layers (Fe or Pt terminations). This augmentation of the magnetic moment is about 4.55 %, 3.79 % for Fe or Pt respectively compared to the bulk value.

**Keywords:** Atomic defects,  $L1_0$  FePt, DFT

**References**

- [1] Da-Hua Wei, Po-Wei Chi, and Chung-Hua Chao, Japanese Journal of Applied Physics 53 (2014) 11RG01.  
 [2] Barbara Dymerska, Jehyun Lee, Josef Fidler and Dieter Suess, Journal of Physics D: Applied Physics, 45 (2012) 495001 (8pp).

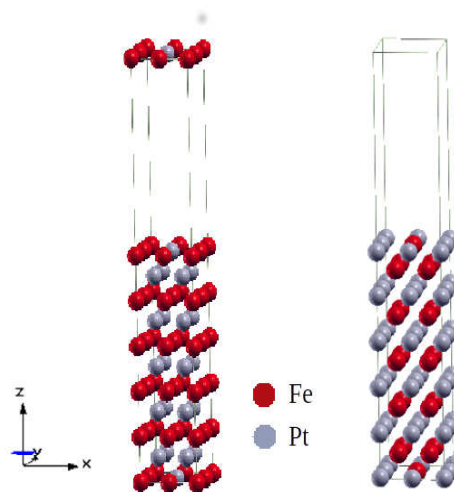


Fig. 2: FePt slabs with anti-site defects

## P57 – CPCQ2017

EFFECTS OF LITHIUM INTERCALATION ON STRUCTURAL, ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF  $WO_3$ : A FIRST PRINCIPLES INVESTIGATION

Ammaria Mahmoudi<sup>a\*</sup>, Houda Imane Faraoun<sup>a</sup>, Mostafa Kerim Benabadj<sup>a</sup>, Malika Dergal<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Division Etude et Prédiction des Matériaux (DEPM), Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables (URMER)- Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen 13000, Algérie  
 \* amaria\_physique@yahoo.fr

**Abstract**

The correlations between electronic and optical properties of pure  $WO_3$  and the effect of Li Intercalated in the matrix are investigated within density functional theory using both the revised gradient-corrected Perdew–Burke–Ernzerhof (GGA-PBE), GGA+U and HSE06 functional frame works along with ab initio pseudopotentials method. Calculation performed with HSE06 functional proves that this compound is wide band gap semiconductors. 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

## Introduction

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 [1,2]. Transition metal oxides of  $WO_3$  [3] exhibit various important properties, including the electrochromic effect [4]. Electrochromic materials change their optical properties, due to the action of an electric field, which can be changed back to the original state by a field reversal. There are two major categories of those materials: transition metal oxides including intercalated compounds, and organic compounds including polymers. The electrochromic effect occurs in inorganic compounds by the absorption of the electrons ( $e^-$ ) and ions (A) generated simultaneously and injected into the network. This is expressed by the equation: **(Transparent)** $MO_3+xA^+ + xe^- \leftrightarrow A_x MO_3$ **(Colored)**. Usually, the  $MO_3$  doped with alkali metals ( $H^+$ ,  $Li^+$ ,  $Na^+$ ,  $K^+$ ,  $Rb^+$  or  $Cs^+$ ) are also known to possess excellent electrochromic effect [1].

## Results and discussions

In this work, we report our computational results for lithium inserted in  $WO_3$  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 pseudopotentials 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

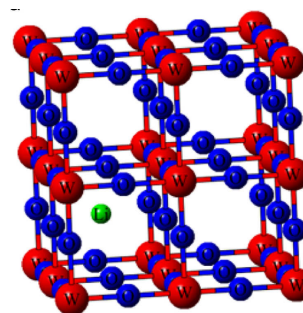


Figure1. Supercells doped with Li-atom  $WO_3$ .

## Conclusion

To conclude, the main work presented here is an investigation of some effects of Lithium doping on structural, electronic and optical properties of  $WO_3$  using first principal calculations. Results clearly demonstrate that the band gap energy of this oxide calculated with HSE functional is close to the experimental value compared to the GGA-PBE and GGA+U calculations, which fail to describe the band gap. It is also shown that the incorporation of low concentration of Li-ion in  $WO_3$  matrix causes a negligible deformation in crystalline structure. This insertion generates a number of other modifications in electronic densities of states and absorption coefficients for  $WO_3$ . The conduction bands are shifted towards the Fermi level leading to the narrowing of the energy band gap compared to pure compound. The visible absorption coefficients are also modified.

## References

- [1]. C.G. Granqvist, Handbook of Inorganic Electrochromic Materials, Elsevier, Amsterdam, 1995.
- [2]. S.S. Sunu, E. Prabu, V. Jayaraman, K. I. Gnanasekar, T. Gnanasekaran, Sens. Actuators B 94 (2003)189–196.
- [3]. W.C.Dautremont-Smith, Displays 3 (1982) 3–22.
- [4]. C.M. Lampert, Sol. Energ. Mater.11 (1984)1–27.

## P58 – CPCQ2017

**DOPING  $Cr_n$  ( $n=2-6$ ) NANOPARTICLES WITH AN S IMPURITY.  
IMPACT ON THE STRUCTURAL, ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES.**

R. Mecheref<sup>a,\*</sup>, S. Bouarab<sup>1</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ).*

*Université Mouloud Mammeri BP N° 17 RP, 15000 Tizi-Ouzou Algérie*

\* [r\\_mecheref@yahoo.fr](mailto:r_mecheref@yahoo.fr)

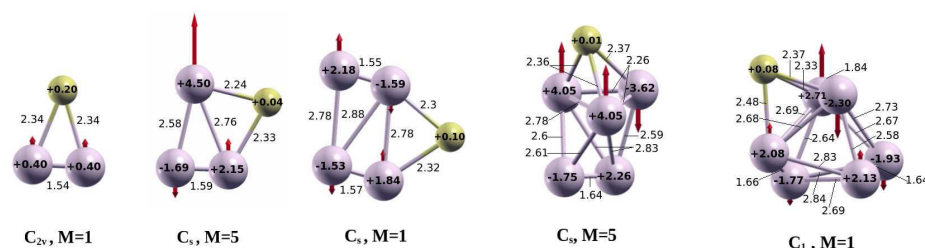
### Abstract

The impact of sulphur doping on the geometrical and electronic properties of small chromium clusters with up to six atoms is investigated within the density functional theory in the generalized gradient approximation for exchange and correlation. Neutral and charged states are considered in order to analyze the behavior of the vertical ionization potential and adiabatic electron affinity as a function of cluster size. We find good agreement with experimental data for the above electronic indicators in the case of pure chromium clusters, and show that S doping enhances their absolute stability, without destroying for the smaller ones, or not completely for the larger ones, the dimerization pattern typical of small particles made of elements with exact half-band filling. Thus, the chromium skeleton is largely preserved in general. Moreover, S doping does not destroy the odd-even behavior of the electronic quantities either. We find lower relative stability in clusters with odd number of Cr atoms than in those with even number, while only odd-Cr clusters retain a total magnetic moment which results slightly quenched upon S doping. We show that doping with an S impurity is a way to increase the stability of small Cr nanoparticles, without substantially modifying their magnetic properties and other electronic indicators..

**Mots clés / Keywords:** Ab-initio calculations, Cluster state, Doping, Chromium, Sulfur

### Introduction

Transition-metal (TM) sulfides belong to an important class of inorganic materials widely used in a variety of applications, such as catalysts in sulpho-reductive hydrotreating processes in the petroleum industry, and lubrication [1,2]. At the nanoscale level, metal sulfide nanomaterials have promising applications in electronic, optical and optoelectronic devices. Pure CrS has a significant hardness, although the toughness is insufficient for its use in manufacturing tools. In this regard, it was recently found that the density and fracture toughness of CrS cermets (ceramic-metal composites) increases with the addition of Cr. This also improved both the flexural strength and hardness of the cermet by 60% and almost 38 %, respectively. TM sulfides are also relevant from the fundamental viewpoint due to their complex size- and composition dependent electronic structure and geometrical properties. On the one hand, Cr has an exact half-band filling which favors the formation of strongly bonded dimers in low dimensional structures, a fact that may change upon doping with a different element. On the other hand, the atomic and covalent radii of Cr are much larger than those of S, while the opposite trend holds for electronic properties like the electronegativity and electron affinity. The combined scientific and technological relevance of such materials has motivated a substantial interest towards an understanding of their properties.



**Figure:** Putative ground-states of anionic  $Cr_nS$  clusters ( $n=2-6$ ).

### References

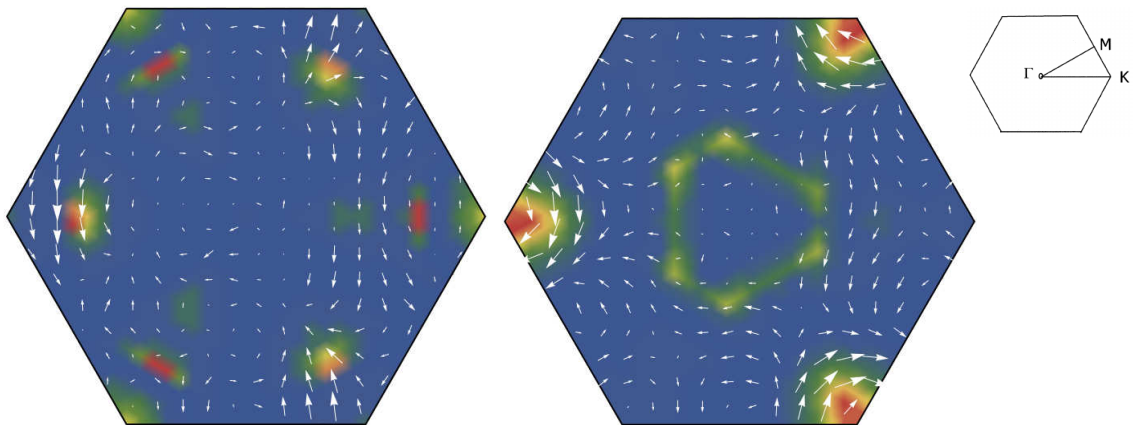
- [1] F.J. Clauss, in *Solid Lubricants and Self-Lubricating Solids*, (Academic, New York, 1972).
- [2] J.R. Lince and P.D. Fleischauer, *J. Mater. Res.* 2 (1987) 827.

## P59 – CPCQ2017

## SPIN-FLIP TRANSITIONS INDUCED BY TIME-DEPENDENT ELECTRIC FIELDS IN TUNED TRANSITION METAL DICHALCOGENIDES MAGNETIC THIN FILMS.

Omar Messaoudi<sup>a\*</sup>, Julen Ibanez-Azpiroz<sup>b</sup>, Hamid Bouzar<sup>a</sup>, Samir Lounis<sup>b</sup><sup>a</sup> LPCQ, UMMTO, Tizi Ouzou, Algérie<sup>b</sup> PGI and IAS Forschungszentrum, Jülich, Allemagne\* [o.messaoudi@fz-juelich.de](mailto:o.messaoudi@fz-juelich.de)**Abstract**

We study from first principles the relativistic electron structure of Transition Metal Dichalcogenides such as MoS<sub>2</sub> and WS<sub>2</sub> on top of which Iron is deposited as a monolayer or as a single impurity. The resulting systems turn out to be magnetic and, in particular, the states near the Fermi level show a non-negligible noncollinear spin-polarization due to the effect of spin-orbit coupling. In these noncollinear states, we analyze the excitations induced by a time-dependent electric field employing a formalism based on the maximally localized Wannier functions [1]. Finally, we analyze the absorption spectrum of circularly polarized light and discuss the possibility of observing a dichroic signal. Preliminary results show the noncollinear nature of the bands we are focusing on (**Fig 1**) and the inequivalent valleys of the Brillouin zone.



**Fig1:** Spin polarization of two bands near the Fermi level for MoS<sub>2</sub> coated with Iron.

**References**

[1] J. Ibañez-Azpiroz et. Al, Phys. Rev. Lett. **109**, 156401 (2012)

## P60 – CPCQ2017

## STUDY OF ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF CoRhMnSn HEUSLER COMPOUND.

Rachida Nourine<sup>a\*</sup>, Ahmed Bahi Azzououm<sup>b</sup>, Ali Benamara<sup>c</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique théorique et de physique des matériaux (LTPM), UHBC, Chlef, Algérie.<sup>b</sup> Laboratoire de Traitement du signal et de l'Imagerie (LATS), USDB, Blida, Algérie.<sup>c</sup> Laboratoire de Physique théorique et de physique des matériaux (LTPM), UHBC, Chlef, Algérie.\* [nourine.rachida@yahoo.fr](mailto:nourine.rachida@yahoo.fr)**Abstract**

The first-principles calculations are performed to study the electronic and magnetic properties of CoRhMnSn Heusler compound. The electronic structure calculations based on density functional (DFT) theory within the generalized gradient approximation (GGA) for the exchange and correlations, we implement the spin-orbit coupling effects. Our results reveal that the CoRhMnSn in the ferromagnetic configuration shows half-metallic character, which make this material very interesting in spintronics field.

**Keywords:** DFT, magnetism, FP-LAPW, half-metal, Heusler, spin-orbit.

**Introduction**

The Heusler alloys are usually ternary compounds with the stoichiometric formula  $X_2YZ$  or  $XYZ$ , where X and Y are transition metals and Z represents an III, IV or V group elements [1, 2]. They crystallized in the  $L2_1$  structure with space group  $Fm\bar{3}m$ , this crystal structure consists of four fcc sublattices as  $X_1 = (0, 0, 0)$ ,  $X_2(1/2, 1/2, 1/2)$ ,  $Y(1/4, 1/4, 1/4)$ ,  $Z(3/4, 3/4, 3/4)$ . When one of the two X atoms in  $X_2YZ$  alloys is substituted by a different transition metal  $X'$ , a quaternary compound with the composition  $XX'YZ$  is generated (space group  $F43m$ ) and LiMgPdSn as prototype.

**Calculation method**

In order to examine the effects of spin-orbit coupling on the electronic and magnetic properties of CoRhMnSn Heusler compound, we carried out the electronic structure calculation using the full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method as implemented in Wien2k package [3, 4]. The exchange and correlation potential was taken within the generalized gradient approximation (GGA) [5, 6].

The muffin-tin sphere radii (RMT) were chosen 2.0a.u for Co and Rh, 2.4a.u for Mn and 2.6a.u for Sn. The highest orbital momentum for the wave function expansion inside atomic spheres is  $l_{max}=10$ . The convergence of the basis set was controlled by a cutoff parameter  $R_{MT}K_{max}=9$  where  $R_{MT}$  is the smallest muffin-tin sphere radius and  $K_{max}$  is the largest reciprocal lattice vector used in the plane wave expansion within interstitial region.

**Conclusion**

We have used the full potential Linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method by employing GGA approximation to investigate the effects of spin-orbit coupling on the electronic and magnetic properties of CoRhMnSn Heusler compound. Our results show that this material has a ferromagnetic half-metallic character with 100% as spin polarization.

**References**

- [1] A. Nourmohammadi, M.R. Abolhasani, Solid State Commun. 150 (2010) 1501.
- [2] L.Kronik, M.Jain, J.R. Chelikowsky, Phys.Rev. B : Condens.Matter66 (2002)041203.
- [3] P.Hohenberg, W.Kohn, Phys.Rev.B 136(1964) 864.
- [4] W.Kohn, L.J.Sham, Phys.Rev.A 140(1965) 1133.
- [5] J. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett 77 (1996) 3865.
- [6] G. Kresse, D. Joubert, Phys. Rev. B 59 (1999) 1758.

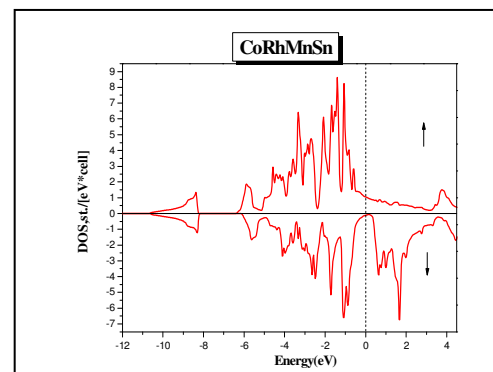


Fig.1. The total density of states of CoRhMnSn

## P61 – CPCQ2017

INFLUENCE OF THE SINGLE IRON ANISOTROPY FIELD AND THE DZYALOSHINSKII-MORIYA TERM ON BULK AND SURFACE SPIN FLUCTUATIONS DYNAMICS IN TRIFLUORIDES  $MF_3$  (M= Fe, Cr).Malik. Brihmat<sup>a</sup>, Ouramdane. Ould Fella<sup>a,b\*</sup>, Hassina. Nadour<sup>a</sup>, Mokrane. Tamine<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Tizi-Ouzou BP 17RP, 15000 Tizi-Ouzou, Algeria.<sup>b</sup> : Ecole préparatoire Sciences et Techniques d'Alger, Lycée Emir Abdelkader, BP 474, Place des Martyrs, Alger\* [wilidz@yahoo.fr](mailto:wilidz@yahoo.fr)**Abstract**

We have theoretically investigated the influence of the anisotropy field and the Dzyaloshinskii-Moriya (D-M) type coupling on bulk and surface spin excitations. Two applications of the formalism developed here have been done on the trifluorides  $MF_3$  (M=Fe, Cr) structures which provides a good illustration of the presence of magnetic frustration due to competing interactions and the existence of non-collinear structures. In the first part the bulk and surface spin dynamics are analyzed under the influence of anisotropy field whereas in the second step the antisymmetric interaction (D-M) is considered thus enabling a detailed analysis on the influence of the Dzyaloshinskii-Moriya (D-M) term on the propagating and evanescent precessional fields occurring in the neighborhood of the bulk-surface region. The bulk-surface spin dynamics are studied using theoretical formalism based on the symmetry properties obtained from the semi-infinite system by examining the matching equations for evanescent and propagating solutions deduced from the bulk secular equation, satisfying surface boundary conditions. The calculations have been carried out considering the competing inter-sublattices nearest and intra-sublattices next nearest neighbors exchange interactions occurring in the bulk and surface. An energy gap which illustrates a new magnetic ground state for surface spin quantum configuration is evidenced. In addition, it was observed that this energy gap increases as the non-collinearity increases.

**Keywords** : Antisymmetric exchange, Anisotropy field, Spin-wave, Matching procedure, Magnons.

## P62 – CPCQ2017

ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF COBALT DOPED ARSENIC CLUSTERS  $CoAs_n$  (n=15-24).S. Safer<sup>a\*</sup>, S. Mahtout<sup>a</sup>, M. A. Belkhir<sup>a</sup>, K. Rezouali<sup>a</sup>, 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 Université Lyon1-CNRS, Université de Lyon, 69622 Villeurbanne Cedex, France[sofiane\\_technologie@yahoo.com](mailto:sofiane_technologie@yahoo.com)**Abstract**

The arsenic clusters have been the topic of many experimental and theoretical studies [1,3]. The main reasons of this interesting subject are that arsenic has found wide applications in many fields, such as semiconductors, bio-pharmaceutics and it is one of the most toxic and carcinogenic element raising very important environmental issues [4]. In this work, we report the structures, electronic and magnetic properties of pure arsenic  $As_{n+1}$  and cobalt doped arsenic clusters  $CoAs_n$  (n =15 - 24). All these 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 cobalt doped arsenic cluster  $CoAs_n$  is more stable than the pure  $As_{n+1}$  clusters. This proves that the doping Co atoms generally enhance the stability of arsenic cages clusters. This behavior may be due to the absorption of the dangling bonds of the arsenic cage by the doping cobalt atom. The HOMO-LUMO gaps show a decreasing tendency with the increasing of clusters size for pure and doped structures. This indicates that the chemical activities of these clusters are generally enhanced when the size increases. The HOMO-LUMO gaps of  $CoAs_n$  clusters are relatively small (less than 1.4 eV) for n=15, 16, 19, 22, 23, 24. This indicates that the Co atom enhances the metallic behavior of the  $CoAs_n$  clusters compared to the corresponding pure arsenic clusters. Large values



of HOMO-LUMO gap are observed for  $\text{CoAs}_{17}$  and  $\text{CoAs}_{21}$  indicating that these clusters are more inert with respect to chemical reactions. The magnetic properties are studied by analysing the different values of total spin magnetic moment for each cluster. It is defined as the difference of charge in spin up and spin down electrons. We show that the total spin magnetic moment depend on the atomic position of Co atom and the number of As neighbouring atoms. Also, the analysing of the partial density of states (PDOS) shows that the magnetic moment of  $\text{CoAs}_n$  clusters is mainly due to 3d electrons. In the same time, only a few contributions are due to the 4s and 4p states. We have also examined chemical hardness of  $\text{CoAs}_n$  clusters by analysing the values of the vertical electron affinity (VEA) and the vertical ionization potential (VIP) ( $\eta = \text{VIP} - \text{VEA}$ ). We observe that the clusters with size  $n = 16, 17, 18, 19, 21$  have higher hardness are more stable than the clusters of other size. This also indicates the high chemical stability of these clusters. The high value of VEA for  $\text{CoAs}_n$  clusters are observed for  $n = 15, 20, 23$ . This indicates that these clusters will liberate more energy comparatively to the neighboring ones when they capture one electron. Consequently, these clusters are more stable.

**Keywords:** Clusters, As, Co, DFT, structural properties, electronic properties, magnetic properties.

### References

- [1]. X. Bai, Q. C. Zhang, J. C. Yang. H. M. Ning, probing the electronic structures and properties of neutral and charged monomethylated arsenic species ( $\text{CH}_3\text{As}_n^{(-1,0,+1)}$ ,  $n = 1 - 7$ ) using gaussian-3 theory, J. Phy. Chem. A 116 (2012) 9382 - 9390.
- [2]. K. S. Bhatia, W. E. Jones, Autoionized series in the arc spectrum of arsenic; Can. J. phy. 49 (1971) 1773 - 1782.
- [3]. S. Safer, S. Mahtout, K. Rezouali, M.A. Belkhir, F. Rabilloud, Properties of neutral and charged cobalt-doped arsenic  $\text{CoAs}_n^{(0\pm 1)}$  ( $n = 1-15$ ) clusters by density functional theory, Comp.Theo. Chem. 1090 (2016) 23-33.
- [4]. M.Z. Shen, H.F. Schaefer, Dodecahedral and smaller arsenic clusters:  $\text{As}_n$ ,  $n = 2, 4, 12, 20$ , J. Chem. Phys. 101 (1994) 2261-2266.



**P63 – CPCQ2017****ETUDE D'ONDE DE SPINS AU VOISINAGE D'UNE INTERFACE DU TYPE Fe(110)/Ni(110).**Lamia Saim<sup>a\*</sup>, Rachid Tigrine<sup>a,b</sup><sup>1</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou<sup>2</sup> Laboratoire des Molécules et des Matériaux Université du Maine, Av. Olivier Messiaen, 72085 Le Mans Cedex 09 France.  
[lamiasa2010@yahoo.fr](mailto:lamiasa2010@yahoo.fr)**Résumé**

Ce travail est consacré à l'étude d'ondes de spins diffusées par une interface reliant deux matériaux ferromagnétiques de structure cristallographique différente, l'un est cubique centré et l'autre est cubique à face centré dans la direction [110]. Nous l'appliquons au système Fe(110)/Ni(110). Pour cette étude nous utilisons la méthode de raccordement et un hamiltonien d'Heisenberg décrivant toutes les interactions possibles entre premiers proches voisins. Les états de magnons localisés au voisinage du défaut considérés et les densités d'états des spins formant la zone perturbée ont été calculées pour les différentes valeurs des trois paramètres caractérisant le système étudié.

**Mots clés :** onde de spin, méthode de raccordement, interfaces ferromagnétique.

**Introduction**

L'étude des propriétés d'interfaces est un domaine de recherche en pleine évolution [1-2], puisque l'une des obsessions de la technologie moderne est de créer des systèmes atomiques capables de transférer une information à l'échelle du manomètre. Dans ce contexte, la science des surfaces joue un rôle capital. L'existence d'interfaces dans les matériaux constitue une brisure de symétrie qui peut affecter et modifier profondément ces propriétés magnétiques et dynamiques.

**Principe de la méthode**

La méthode que nous avons choisie pour l'étude des systèmes en présence d'interfaces est la méthode de raccordement [3-4].

**Etats localisés de spins au voisinage de l'interface magnétique**

Les modes propres de magnons localisés au voisinage de l'interface magnétique sont déterminés à l'aide de la relation de compatibilité suivante :

$$\det[M_s(m \times m)] = 0$$

Tel que  $M_s$  est la matrice dynamique carrée du système perturbé.

**Densités d'états magnoniques**

Pour calculer la densité d'états de magnons au voisinage de l'interface magnétique en utilisant un formalisme basé essentiellement sur les fonctions de Green et la méthode de raccordement [5-6].

**Références**

- [1] N. Shibata, S. D. Findlay, S. Azuma, T. Mizoguchi, T. Yamamoto, Y. Ikuhara, *Nature Materials* **8**, 654–658 (2009)
- [2] Verbeeck, G. V. Tendeloo, A. Brinkman & H. Hilgenkamp, *Nature Materials* **5**, 556 - 560 (2006)
- [3] A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous, R. Tigrine and R. Chadli, *Eur. Phys. J. B* **82**, 53 (2011).
- [4] B. Bourahla, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de T. Ouzou (2007).
- [5] M. Eisenbach, B. L. Gyorffy, G. M. Stocks, B. Ujfalussy, *Phys. Rev. B* **65**, 144424 (2002).
- [6] O. Nafa, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi. Ouzou (2014).

## P64 – CPCQ2017

ETUDE AB INITIO DES PROPRIETES STRUCTURALES, ELECTRONIQUES ET OPTIQUES DU SYSTEME  
Li<sub>2</sub>TeZ. Souadia<sup>a</sup>, A. Bouhemadou<sup>a</sup>, A. Bennamer<sup>b</sup>, R. Belkofsi<sup>c</sup> et S. Saib<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire pour développer des nouveaux matériaux et leur caractérisation, Département de Physique, Faculté de Science1, Université Sétif, 19000 Setif, Algeria

<sup>b</sup> Laboratoire d'Etudes des Surfaces et Interfaces des Matériaux Solides (LESIMS), Département de Physique, Faculté de Science3, Université Sétif 1, 19000 Setif, Algeria

<sup>c</sup> Laboratoire de physico-chimie des matériaux et catalyse, département de physique, faculties de sciences exactes2. Université A/MIRA Bejaia, 06000, Algeria

<sup>d</sup> Laboratoire de Physique des matériaux et Applications, Université de M'sila, 28000 M'sila, Algeria

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

**Résumé**

Dans ce travail nous avons mené une étude, basée sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) [1], pour étudier les propriétés structurales, électroniques et optiques du système Li<sub>2</sub>Te. Nos calculs atomistiques ont été exécutés avec le code CASTEP, où les fonctions d'ondes des électrons de valence sont représentées dans une base d'onde plane et les électrons du cœur sont décrits à travers des pseudopotentiels[2,3]. L'échange et corrélations a été traité dans le cadre de l'approximation du gradient généralisé (GGA). L'investigation des propriétés structurales des composés binaires a montré que les résultats relatifs au paramètre du réseau concordent bien avec les données théoriques et expérimentales disponibles dans la littérature. Nous avons représenté les structures de bande, leurs densités d'états et leurs propriétés optiques et nous avons comparé nos résultats avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux.

**Mots clés:** métaux alcalins, DFT, pseudopotentiels, GGA, électroniques, optiques.

**Références**

- [1] J.P. Perdew, A. Zunger Self-interaction correction to density functional approximations for many-electron systems. Phys. Rev B, (1981), 23:5048–5079  
[2] J.C. Phillips, Phys. RevB. (1959) ,112, 685.  
[3] J.C. Phillips, L. Kleinman, Phys. RevB. (1959),116, 287.

## P65 – CPCQ2017

DENSITY FUNCTIONAL STUDY OF THE STRUCTURES AND ELECTRONIC PROPERTIES OF SULFUR-DOPED  $\text{Mo}_n\text{S}$  CLUSTERS,  $n=1-10$ .M. Ziane<sup>a\*</sup>, F. Amitouche<sup>a</sup>, S. Bouarab<sup>a</sup>, A. Vega<sup>b</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, B.P.No. 17 RP, 15000 Tizi Ouzou, Algeria.<sup>b</sup>Departamento de Física Teórica, Atomica y Óptica, Universidad de Valladolid, Paseo Belen 7, E-47011 Valladolid, Spain.

\*ziane84@yahoo.fr

**Abstract**

Structural and electronic properties of pure molybdenum  $\text{Mo}_n$  and molybdenum-sulfide  $\text{Mo}_n\text{S}$  ( $n=1-10$ ) clusters are calculated by using an *ab initio* method based on projector augmented wave pseudopotential. The geometry optimization of the different isomeric structures was determined within the spin-polarized density functional theory using the generalized gradient approximation for the exchange and correlation energy. The dimerization tendency observed in transition metal with half-filled shell is significantly reduced in both types of clusters by using 4-*p* semicore as valence states for Mo. The S atom binds bridge positions of Mo core for  $n=2-5$  and 3-fold hollow sites for larger sizes. The desulfurization energy (removing the S atom) is much higher than removing one Mo atom from the  $\text{Mo}_n\text{S}$  clusters. The total magnetic moment in pure Mo clusters oscillates between 0  $\mu\text{B}$  for even- $n$  and 2  $\mu\text{B}$  for odd- $n$ , typical of small particles made of elements with exact half-band filling. The spin polarization in  $\text{Mo}_n\text{S}$  clusters is antiparallel for  $n=2,3$ , parallel for  $n=4$ , and vanishes otherwise.

**Keywords** : Molybdenum, Sulfur, Clusters, Geometrical structures, Binding energy, Magnetic moment**Introduction**

The interest in the studies of atomic clusters have attracted a lot of attention because of their possible technological applications which include the possibility of developing novel cluster-based materials using the size dependence of their properties. Of particular interest are the binary clusters composed of transition metals and non metal-elements with potential application in many fields [1]. Generally, the structure and electronic properties of the cluster can be significantly influenced by an impurity atom, as in Silver-sulfides [2] or Gold-sulfides [3]. In the present work we performed detailed density functional calculations of the geometrical structures, spin-polarized electronic structure and related electronic properties of non-stoichiometric  $\text{Mo}_n\text{S}$ ,  $n=1-10$ . We address how the doping with a single S atom affects the geometries and the electronic structure of pure molybdenum clusters. Before, we determined the lowest-energy structures of pure  $\text{Mo}_n$  clusters,  $n=1,10$ . This has been done and discussed in relation with available theoretical and experimental results.

**Conclusion**

The structural analysis of  $\text{Mo}_n\text{S}$  clusters shows that S tend to bind bridge positions up to  $n=6$  and caps 3-fold hollow sites of  $\text{Mo}_n$  cores for larger clusters. The dimerization tendency observed in transition metal with half-filled shell is significantly reduced in both types of clusters by using 4-*p* semicore as valence states for Mo. The desulfurization (removing the S atom) from  $\text{Mo}_n\text{S}$  systems requires more energy than extracting the less bonded Mo atom of the cluster, indicating that the Mo-S bonding is stronger than the Mo-Mo one.

**References**

- [1] Vaz, C. A. F. Bland, J. A.C. Lauhoff, G. Rep. Prog. Phys. 71 (2008) 056501.
- [2] C. Majumder, S. K. Kulshreshtha. Phys Rev, B 73 (2006) 155427.
- [3] L. Han, X. Kuang, L. Ding, P. Shao, Y. Jin H. Li, J. Mol. Model 20 (2014) 2252

## P66 – CPCQ2017

## THE ELECTROCHEMICAL BEHAVIOUR OF ALUMINIUM ALLOY IN CHLORIDE SOLUTION IN THE PRESENCE OF INORGANIC ADDITIVES AS CORROSION INHIBITORS.

Meryem Acila<sup>a\*</sup>, Hakim Bensabra<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire des Interactions Matériaux Environnement (LIME), Université, Jijel, Algérie

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

**Résumé / Abstract**

The effect of molybdate and vanadate inhibitor ions on the corrosion of aluminium alloy in near-neutral chloride solution has been studied using measurements of the open circuit potential and its variation with time, electrochemical impedance measurements and polarization curves. In addition, scanning electron microscopy coupled with energy dispersive spectroscopy and X-ray photoelectrons were used for surface analysis. The results show that both inhibitors present an interesting protective effect against pitting corrosion of aluminum. However the effect of molybdate is more significant than the one of vanadate.

**Mots clés / Keywords :** sodium vanadate, sodium molybdate, corrosion, inhibitor.

**Introduction**

Although aluminium is a reactive metal ( $E^\circ = -1.66$  V vs SHE), it is resistant to corrosion in solutions of pH between 4 and 9, whenever aggressive ions, such as chloride, are not present. This resistance is attributed to the presence of a thin, adherent and protective surface oxide film [1]. Above and below this pH range, solubility of the oxide film increases, and aluminium exhibits uniform attack. Most of the electrochemical corrosion behavior carried on aluminum studies were conducted in chloride media and inhibitors used to fight against this phenomenon are generally chromate, harmful to health and the environment [2]

**Experimental :**

The corrosion experiments were performed on rectangular samples, which were cut from plate-shaped 5083 aluminum alloy. The WE was enclosed with epoxy resin, to allow the cross-section (0.5 cm<sup>2</sup>) to expose to the solution. Before each experiment, the exposed surfaces were with silicon carbide paper to 1200 grit in presence of aqueous alumina suspension and then degreased with acetone, cleaned with distilled water and finally dried in air. The corrosion tests were carried out immediately after drying. In all measurements, the counter electrode was a platinum gauze and the reference electrode was Ag/AgCl. All potentials are referred to the Ag/AgCl. The polarization E against I curves were obtained by means of the linear potential sweep technique with sweep rates of 1 mV going from cathodic to anodic side. Impedance measurements were performed in the frequency range from 100 kHz to 100 mHz with an a.c. voltage amplitude 10 mV.

**Conclusion**

The inhibiting action and the adsorption behavior of sodium molybdate and sodium vanadate on AA 5083 alloy was investigated in 0.1M NaCl solution by means of potentiodynamic and impedance measurements. Polarization measurements show that the addition of inhibitors induces a decrease in the anodic current density. Molybdate ions inhibit the pitting corrosion of AA5083 alloy more effectively than the vanadate ions in the same range of concentrations. EIS studies also show the diameter of the high frequency capacitive semicircle markedly increased with the addition of the inhibitors, especially in the presence of molybdate ions indicating its superior inhibiting properties.

**References**

- [1] N.D. Alexopoulos, C.J. Dalakouras, P. Skarvelis, Corros. Sci. 55 (2012) 289–300.
- [2] M.A. Quraishi, A. Singha, V. Kumar Singha, D. Kumar Yadav, A. Kumar Singh, Mater. Chem. Phys. 122 (2010) 114.
- [3] E.A. Noor, J. Appl. Electrochem. 39 (2009) 1465.
- [4] KIM S J, HAN M S, JANG S K., The Korean Journal of Chemical Engineering, 2009, 26(1): 250–257.

## P67 – CPCQ2017

## ÉTUDE PHYSICO-CHIMIQUE DE L'ADSORPTION DES IONS METALLIQUES PAR UNE ARGILE ACTIVEE.

Fahima .Belhocine , Makhlof Boufatit

Laboratoire de Physique et Chimie des Matériaux (LPCM), Université de Tizi-Ouzou  
 Université : université Mouloud Mammeri TIZI-OUZOU  
 bel\_kahina@yahoo.fr

## Résumé

Dans ce papier nous présentons une préparation d'une argile de type Maghnia activée (0.05M HCl), caractérisée par spectroscopie infrarouge à transformée de fourie (IFTR) et par microscopie électronique à balayage (MEB) Puis utilisée pour l'élimination des ions métalliques ( $Pb^{2+}$ ) qui sont présents dans les systèmes aqueux. Cette élimination est influencée par un ensemble de parametres a savoir la concentration des ions  $Pb^{2+}$ , le pH du milieu, la masse de l'argile activée, le temps de contact et la température. Deux modèles cinétiques ont été étudiés ceux du pseudo premier ordre et pseudo second ordre, et cela afin de décrire l'ordre de la réaction d'adsorption des ions métalliques ( $Pb^{2+}$ ) par l'argile activé a une température de 25°C et une concentration de 10mg/L.

**Mots clés :** Argile activée, IFTR, MEB, Elimination,  $Pb^{2+}$ .

## Introduction

Les métaux lourds sont toxiques même à faible concentration et ont la capacité de s'accumuler tout au long de la chaîne alimentaire, Parmi ces métaux, on trouve le plomb [1], notre travail est basé sur le traitement des polluants dans les rejets industriels en utilisant un matériau argileux.

## Resultats et discussion

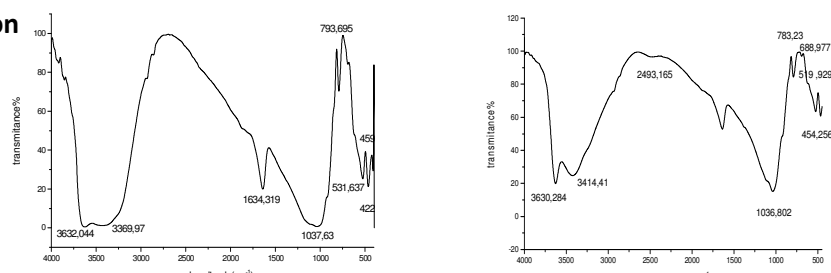


Fig .1 : Spectre IR de a) l'argile non active e t b) l'argile active avec (0.05M HCl)

Le Tableau.ci-dessous donne les Constantes du pseudo-premier ordre et du pseudo-second ordre d'adsorption des ions  $Pb^{2+}$  (pH= 4.5),  $[Pb^{2+}] = 10$  mg/L; masse d'argile activée: 1g;T=25°C

Ions métalliques	Pseudo-premier ordre				Pseudo-second ordre		
	$q_{exp}$ (mg/g)	$q_c$ (mg/g)	$K_1$ (mn <sup>-1</sup> )	$R^2$	$q_e$ (mg/g)	$K_2$ (g/mg.mn)	$R^2$
$Pb^{2+}$	0.416	0.006	0.011	0.388	0.412	-27.188	0.9999

## Conclusion

Les résultats de la caractérisation de l'argile avant et après activation par différentes techniques physico- chimiques, révèlent, la prédominance de la montmorillonite, la présence du quartz et de la calcite comme impuretés cristalline majeurs. L'étude cinétique de l'adsorption des ions  $Pb^{2+}$  permettent de constater que l'équation du pseudo-second ordre décrit de manière satisfaisante le mécanisme d'adsorption de ces ions. Le processus expérimental est régi par un phénomène de diffusion intra particulaire

## Références

[1] F.Belhocine, H. Assameur, S. Chegrouche and M. Boufatit. Contribution to kinetic investigations of  $Cd^{2+}$ ,  $Pb^{2+}$   $Co^{2+}$  and  $Ni^{2+}$  adsorption onto acid activated clay. International Conference on Bioinspired and Biobased Chemistry and Materials on October 3-5, 2012, Nice, France

**P68 – CPCQ2017**  
**ETUDE PAR DFT DE LA CALCITE-VI SOUS PRESSION.**

R. Belkfsi , I. Belabbas

*Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse, Faculté des Sciences Exactes.*

*Université Abderrahmane Mira de Bejaia (Algérie).*

[belkfsi.reguia@yahoo.com](mailto:belkfsi.reguia@yahoo.com)

### Résumé

Le carbonate de calcium ( $\text{CaCO}_3$ ) est le minéral le plus abondant dans la croûte terrestre. Sous l'effet d'une pression le  $\text{CaCO}_3$  entreprend une succession de transitions de phase, conduisant à l'apparition de différentes formes allotropiques dont : la calcite-I, la calcite-II, la calcite-III, la calcite-IIIb, la calcite-VI, l'aragonite et la post-aragonite. Le polymorphe calcite-VI a été mis en évidence récemment par Merlini et al. [1]. Ces derniers, ont montré que la calcite-VI cristallise dans le système triclinique. Cependant, bien que les propriétés structurales de ce polymorphe sont connues, il n'en demeure pas moins des autres propriétés physiques.

Dans le présent travail nous avons mené une étude atomistique, basée sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) [2], pour prédire l'évolution de certaines propriétés élastiques du polymorphe calcite-VI du  $\text{CaCO}_3$  en fonction de la pression. Nos calculs atomistiques ont été exécutés avec le code ABINIT [3], où les fonctions d'ondes des électrons de valence sont représentées dans une base d'ondes planes et les électrons du cœur sont décrits à travers des pseudo-potentiels. L'échange et corrélations a été traité dans le cadre de l'approximation du gradient généralisé (GGA). Appartenant au système triclinique, les 21 constantes élastiques indépendantes de la calcite-VI ont été déterminées, ainsi que leur dépendance en pression, dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité avec perturbations (DFPT) [4]. L'examen de l'évolution du module de compression calcite-VI montre un comportement quasi-linéaire entre 15 et 40GPa.

**Mots clés :** DFT, DFPT, calcite-VI,  $\text{CaCO}_3$ , module de compression.

### Références

- [1] Merlini M, Hanfland M, Crichton WA (2012)  $\text{CaCO}_3$ -III and  $\text{CaCO}_3$ -VI, high-pressure polymorphs of calcite: possible host structures for carbon in the Earth's mantle. *Earth Planet Sci Lett* 333–334:265–271.
- [2] Perdew JP, Zunger A (1981) Self-interaction correction to density functional approximations for many-electron systems. *Phys Rev B* 23:5048–5079.
- [3] Gonze X, Lee C (1997) Dynamical matrices, Born effective charges, dielectric permittivity tensors, and interatomic force constants from density-functional perturbation theory. *Phys Rev B* 55:10355–10368.
- [4] Baroni S, de Gironcoli S, Dal Corso A, Giannozzi P (2001) Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Rev Mod Phys* 73:515–562.

## P69 – CPCQ2017

ELECTROSYNTHÈSE ET CARACTÉRISATION DE COUCHES MINCES D'OXYDE DE CÉRIUM (CeO<sub>2</sub>)Chabha Ben Mouhoub<sup>\*</sup>, Aziz Kadri, Nassima Benbrahim

Laboratoire de Physique et Chimie des Matériaux (LPCM), Université Mouloud Mammeri, B.P. 17, Tizi-Ouzou, 15000, ALGERIE  
<sup>\*</sup>[bmchaba@yahoo.fr](mailto:bmchaba@yahoo.fr)

**Résumé**

Nous nous intéresserons dans ce travail à la synthèse et la caractérisation de films minces d'oxyde de cérium (CeO<sub>2</sub>). L'élaboration a été réalisée par voie électrochimique (voltammétrie cyclique, chronoampotentiométrie...). Des paramètres, tels que la concentration du bain, la densité de courant ou la durée de l'électrodépôt ont été explorés. Les films obtenus ont été caractérisés par microscopie électronique à balayage (MEB) et diffraction des rayons X (DRX). Les diffractogrammes (DRX) obtenus montrent qu'il s'agit bien de la structure cristalline de type fluorine dans laquelle cristallise l'oxyde de cérium. Les différentes raies constatées se superposent à celle d'un échantillon de CeO<sub>2</sub> commercial. Les images MEB révèlent des morphologies qui dépendent des conditions de synthèse (densité de courant et durée du dépôt). A titre d'exemple, une structure sous forme de roses de sable est observée pour une densité de courant de 0.25mA/cm<sup>2</sup> et une durée de 20 minutes.

**Mots clés :** Oxyde de cérium, électrodépôt, DRX, MEB.

**Introduction**

L'élaboration de couches minces d'oxydes dont l'épaisseur est inférieure à 10 μm peut être menée par différentes techniques notamment la méthode sol-gel, la pulvérisation cathodique, l'ablation laser, les dépôts chimiques ou physiques en phase vapeur...etc. Pour notre part, nous nous sommes intéressés à l'électrodépôt cathodique de films minces d'oxyde de cérium. Pour ce faire, des procédés électrochimiques tels que la voltammétrie cyclique ou la chronopotentiométrie ont été utilisés.

**Synthèse de CeO<sub>2</sub>**

L'électrodépôt est réalisé sur des substrats platine ou fer à partir d'un bain de Ce(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>. Le mode de synthèse adopté est galvanostatique ou potentiodynamique. Différents paramètres ont été explorés.

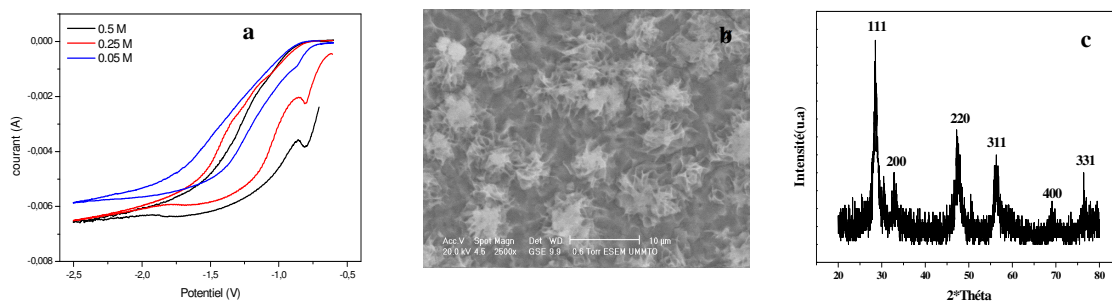


Fig. 1 : (a) Courbe I=f(E) dans une solution Ce(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>, (b) image MEB du film de CeO<sub>2</sub> et (c) DRX du film de CeO<sub>2</sub>

**Conclusion**

Ce travail a été dédié à la synthèse de films d'oxyde de cérium (CeO<sub>2</sub>) par voie électrochimique. Différents paramètres ont été explorés. Les caractérisations menées montrent que la morphologie, la structure et l'épaisseur dépendent sensiblement des conditions de synthèse (concentration, densité du courant appliqué et durée).



## P70 – CPCQ2017

**THE AB INITIO STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF THE FULL-HEUSLER COMPOUNDS X-N (X = Rb, K AND Cs) USING THE LOCAL SPIN DENSITY APPROXIMATION (LSDA) AND THE MODIFIED BECKE-JOHNSON (MBJ) POTENTIAL.**

S. Benatmane\*, B. Bouhafs

Department of physics Faculty of sciences Djillali Liabes University of Sidi Bel-Abbes, 22000, Algeria  
Email\* : b.saadia@live.fr

### Abstract

We present an overview on the magnetic properties of the half-Heusler XN compounds (where X = Cs, Rb and K). The spin-polarized calculations by use of the full potential linear augmented-plane waves method, indicate that these materials are half-metallic ferromagnets with an integer magnetic moment of  $2 \mu_B$ . The most important property is that the ferromagnetism is originated from the polarization of the p-N orbitals with an sp-hybridization. We give also a comparison between the local spin density approximation (LSDA) and the modified Becke–Johnson exchange potential approximation (mBJ–LDA) on the electronic and magnetic properties.

Spintronics is a term coined for the spin-controlled electronics,[1] which is expected as a next-generation technology after the silicon-based one. The main concept of this new technology is to use the novel notch provided by the spin degree of freedom of electrons. Spintronics has the potential advantage of nonvolatility, speeding up of data processing, high circuit integration density, reduction in power consumption. The discovery of the giant magnetoresistance (GMR) in a multilayered structure [2, 3] is considered the beginning of the spintronics. As the basic block, the system consists of two magnetic layers and a nonmagnetic buffer layer in between. The directions of magnetization in the two magnetic layers can be switched between parallel to anti-parallel configurations by an external magnetic field, which results in a difference in the resistance by a factor of two.[2] It is the first control on the transport of electrons by tuning the spin degree of freedom: electrons passed through the first magnetic layer are partially spin polarized, which then pass more easily the second magnetic layer if the magnetization of the second magnetic layer is in the same direction. This scientific innovation has triggered a revolution in technology and industry, and devices such as spin valve[4] and magnetic tunnel junction[5,6] have been invented and implemented into drivers of hard discs in commercial-use personal computers.

**Keywords :** Half-Heusler compounds, Half-metallic ferromagnets ;Density functional theory mBJ–LDA

### References

- [1] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, D. M. Treger, *Science* 2001, 294, 1488.
- [2] M. N. Baibich, M. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* 1988, 61, 2472.
- [3] J. Barnas, A. Fuss, R. Camley, P. Grunberg, W. Zinn, *Phys. Rev. B* 1990, 42, 8110.
- [4] B. Dieny, V. S. Speriosu, S. Metin, S. S. P. Parkin, B. A. Gurney, P. Baumgart, D. R. Wilhoit, *J. Appl. Phys.* 1991, 69, 4774.
- [5] J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong, R. Meservey, *Phys. Rev. Lett.* 1995, 74, 3273.
- [6] T. Miyazaki, N. Tezuka, *J. Magn. Magn. Mater.* 1995, 151, 403.

## P71 – CPCQ2017

ETUDE DES PROPRIETES MAGNETIQUES DE ZnSiAs<sub>2</sub> DOPE PAR LES METAUX DE TRANSITION.

H. Bouhanibenziane, K. Hebali, O. Sahnoun, M. Sahnoun

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique Quantique de la Matière et Modélisation Mathématique (LPQ3M), Faculté des Sciences Exactes, université de Mostapha Stambouli à MASCARA.

[bouhanibenziane\\_hamida@yahoo.fr](mailto:bouhanibenziane_hamida@yahoo.fr)

### Résumé

L'étude des semi-conducteurs magnétique dilués (DMS) constitue, depuis plusieurs années, un sujet de recherche majeur en physique de la matière condensée. L'intérêt de ces composé est double, puisqu'ils sont, à la fois, des matériaux semi-conducteurs, et ferromagnétiques. Ce travail présente une contribution à l'étude des propriétés des matériaux chalcopyrite ZnSiAs<sub>2</sub> dopé aux métaux de transition. Les calculs des différentes propriétés structurales, électronique et magnétique ont été réalisé en se basant sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), dont la méthode des ondes planes augmentées (LAPW) a été utilisée.

### Introduction

Pour connaître le site le plus favorable, nous avons créé une super-cellule de 2x2x1 constituée de 64 atomes et nous avons remplacé un seul atome de (Zn, Si) par un seul atome de métaux de transitions (MT = Cr, Mn, Fe, Co, V) pour obtenir Zn<sub>1-x</sub>MT<sub>x</sub>SiAs<sub>2</sub> et ZnSi<sub>1-x</sub>MT<sub>x</sub>As<sub>2</sub> avec x=0.125. L'énergie de formation est donc calculée pour chaque configuration ferromagnétique relative à chacun des atomes d'impureté [1]

$$E_f = \frac{1}{64} [E((Zn, Si)_{1-x}MT_xAs_2) - E(ZnSiAs_2) - \mu(Mn) + \mu(Zn, Si)]$$

### Résumé de graphe

Les niveaux 3d du (Co,V) de spin majoritaire sont localisés juste au-dessous du niveau de Fermi. Une faible hybridation entre les niveaux 3d du (Co,V) de spin minoritaire avec la bande de valence implique un résultat demi-métalique

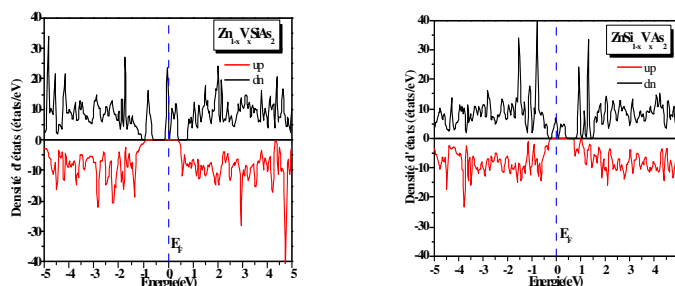


Fig. 1 Densités d'états du ZnSi<sub>1-x</sub>VxAs<sub>2</sub> ou Zn<sub>1-x</sub>SiVxAs<sub>2</sub>

### Conclusion

Ces résultats montrent l'intérêt du dopage introduit par les métaux de transition, du fait qu'avec de faibles pourcentages de dopage, nous pouvons obtenir de nouveaux matériaux susceptibles d'être largement utilisés dans la spintronique.

### Références

[1] C.-W. Zhang and S.-S. Yan, Appl. Phys. Lett. 95 (2009) 232108.

**P72 – CPCQ2017**  
**ETUDE PAR SIMULATION ATOMISTIQUE DE L'IKAITE.**

G. Chahi<sup>1\*</sup>, I. Belabbas<sup>1</sup>, D. Bradai<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Equipe de cristallographie et simulation des matériaux, Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse, Université Abderahmane Mira. Bejaia (06000). Algérie.*

<sup>2</sup> *Faculté de Physique, USTHB, BP32, El-Alia, Bab Ezzouar, Alger (Algérie).*

\* [chahi.pt.pq@gmail.com](mailto:chahi.pt.pq@gmail.com)

### Résumé

Dans ce travail, des simulations atomistiques, basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), ont été réalisées sur l'ikaite, une phase hexahydratée du carbonate de calcium ( $\text{CaCO}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), dans le but de déterminer ses propriétés élastiques.

Caractériser au mieux ces propriétés permet d'apporter des informations fondamentales pour la compréhension de la nature des liaisons chimiques mises en jeu au sein de l'ikaite. Les calculs ont été réalisés avec le code ABINIT, à base d'ondes planes et de pseudo-potentiels, en traitant les effets d'échange-corrélations tout d'abord avec la fonctionnelle PBE basée sur l'approximation GGA, puis en incluant des corrections qui tiennent compte des interactions à longue portée. La méthode DFT-D2 de Grimme [5] a été utilisée pour quantifier les interactions de type Van der Waals.

Dans un premier temps, une étude systématique des propriétés structurales a été réalisée. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les données expérimentales. Dans un deuxième temps, des calculs portant sur les propriétés élastiques ont été réalisés dans le cadre de la théorie la fonctionnelle de la densité avec perturbations (DFPT).

Les constantes élastiques ont été d'abord calculées. Les valeurs numériques obtenues ont été ensuite employées, en utilisant les estimations de Voigt-Reuss-Hill, pour déterminer le module de compression, le module de cisaillement, le module de Young ainsi que le coefficient de Poisson. L'étude des propriétés élastiques a été complétée par le calcul des vitesses de propagation des ondes acoustiques et la température de Debye.

**Mots-clés :** Ikaite, DFT, DFPT, Abinitio, constantes élastiques, Van der Waals.

### Références

- [1] R. Demichelis, P. Raiteri, J. D. Gale, *Journal of Crystal Growth* 401, 33-37, 2014.
- [2] I.P. Swainston, R. P. Hammond, *Mineralogical Magazine* 67, 555-562, 2003.
- [3] A.R. Lennie, C. C. Tang, S.P. Thompson, *Mineralogical Magazine* 68, 135-146, 2004.
- [4] W. Sekkal, A. Zaoui, *Scientific Reports* 3, 1587, 2013.
- [5] S. Grimme, *J. Comp. Chem* 27, 1787, 2006.

## P73 – CPCQ2017

## SYNTHESIS OF AN IONIC LIQUID &amp; APPLICATION IN THE EXTRACTION OF CHROMIUM.

Karima Cheballah<sup>a\*</sup>, Lynda Mitiche<sup>a</sup>, Claudia Fontàs<sup>b</sup>, Amar Sahmoune<sup>a</sup><sup>a</sup> Equipe de Recherche « Matériaux et Procédés pour L'Environnement », Université Mouloud MAMMERI, Tizi-Ouzou, Algérie<sup>b</sup> Department of Analytical Chemistry, University of Girona, 17071 Girona, Spain.\* [cheballahkarima@yahoo.fr](mailto:cheballahkarima@yahoo.fr)**Abstract**

Tricaprylmethyl ammonium salicylate (TOMAS) ionic liquid has been employed as a carrier for the extraction of chromium from acidic solutions. The effect of pH value on the recovery of metal ions has been investigated. Synthesis of TOMAS was done in laboratory of Gerona, it is important that both starting substances used for TOMAS synthesis are readily available and inexpensive, and the procedure of synthesis is quite easy.

**Keywords:** ionic liquid, extraction, chromium.

**Introduction**

Ionic liquids (ILs, low-melting organic salts) have been widely employed in liquid–liquid extraction for about a decade, since the first report by Rogers and co-workers [1] Ionic liquids are growingly popular because of a combination of unique properties [2]. It has been reported that ionic liquids can be used in solvent extraction of metal ions.

**Synthesis of TOMAS**

Aliquat336 (~0.2 mol) was mixed with 30% excess amount of sodium salicylate in 200mL of chloroform. The mixture was shaken for 4 h and then rinsed with large amount of distilled water 20 times. After that solvent was evaporated in rotary evaporator and remained liquid was heated up to 100 °C under reduced pressure for 5 h. After cooling to room temperature white solid was obtained. After being equilibrated with water the compound becomes slightly yellowish viscous liquid with density 0.942 g·mL<sup>-1</sup> that does not freeze at least to -18 °C. Found water content is ca. 0.18 wt.% (0.09M) and 4.83 wt.% (2.52M) (Karl Fisher titration) for solid and equilibrated with water liquid compound, respectively

**Application of TOMAS**

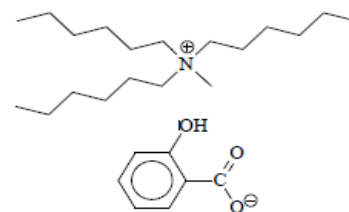
In order to evaluate the extraction efficiency of TOMAS for Cr (V) and Cr (III) in aqueous solutions, different liquid–liquid experiments were carried out. Chromium is present in the aqueous phase in different forms depending on the pH. Therefore, preliminary experiments were designed at neutral and acidic pH values. The results show that Cr (VI) is totally recovered using Cr (VI) at 10ppm, NaNO<sub>3</sub> 0.01M as liquid solution at acidic pH and TOMAS dissolved in dichloromethane as organic phase.

**Conclusion**

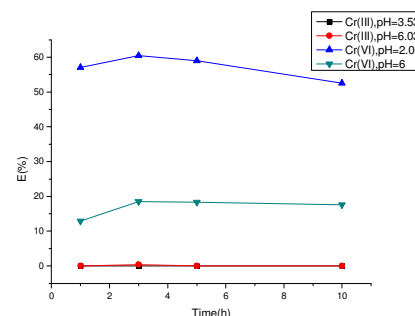
In conclusion, a novel tetraalkylammonium-based ionic liquid TOMAS has been found to be a highly efficient extraction solvent for recovery of chromium in hexavalent oxidation state from aqueous solutions. Hexavalent chromium is better extracted than chromium (III); the extraction rate for Cr (VI) is 60.43%.

**References**

- [1] J.G. Huddleston, H.D. Willauer, R.P. Swatloski, A.E. Visser, R.D. Rogers, Chem. Commun. (1998) 1765.  
[2] I.V. Pletnev, S.V. Smirnova, K.S. Khachatryan, V.V. Zernov, Russ. Chem. J. 58 (2004) 51.



Triocylmethylammonium salicylate (TOMAS), [TOMA][Sal]



Liquid-liquid extraction of chromium: Aqueous phase, 10ppm, NaNO<sub>3</sub> 0.01M at different pH / organic phase, 5.10<sup>-3</sup>M of TOMAS in CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>.

## P74 – CPCQ2017

## THERMAL STUDY OF PHOTO-POLYMERIZATION REACTION IN POLYACRYLATE/LIQUID CRYSTAL BLENDS.

Zakia. Hadjou Belaid<sup>a\*</sup>, Lahcèn. Méchernène<sup>a</sup>, Fatima Zohra Abdoune<sup>a</sup>, Derouiche Berougiaa<sup>a</sup>, Ulrich Maschke<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Recherche sur les Macromolécules, Université Aboubakr Belkaïd de Tlemcen, Algeria.

<sup>b</sup> Unité Matériaux et Transformations (UMET), UMR CNRS N°8009, Université des Sciences et Technologies de Lille, France.

\* [z\\_hadjou@yahoo.fr](mailto:z_hadjou@yahoo.fr)

### Abstract

The kinetics of the photoinitiated polymerization of tripropylene glycol diacrylate (TPGDA) monomers mixed with E7 eutectic liquid crystal have been studying using isothermal photo differential scanning calorimetry (DSC) experiment in order to identify and evaluate the various thermal effects occurring during the reaction of photopolymerization under UV light. The isothermal photo-DSC provided complex thermogrammes showing a competition between an exothermic heat generated by the reaction of monomers conversion and an endothermic heat produced by the UV lamp. This unexpected phenomenon has been observed in a previous work and was associated to a heating of the PDLC material by irradiating UV lamp. The dependences of photopolymerization kinetics on dose and intensity of the curing UV light have been investigated.

**Keywords:** PDLC, TPGDA, E7 liquid crystal, photopolymerization, Photo-DSC.

### Introduction

Polymer Dispersed Liquid Crystals (PDLC) were elaborated by polymerization induced phase separation under ultraviolet (UV) [1], represent great potential for a variety of electro-optical applications. In the last work [2], the transmission versus time curves of in-situ UV-cured TPGDA/E7 films reveal a surprising domain, characterised by an enhancement of the film transparency, is observed at longer relaxation times. This new phenomenon is probably due to IR spectrum and high intensity of UV radiation [3]. Photo-calorimetry (Photo-DSC) has been used for studding a kinetics and reactivity of photoinitiator [4]. The kinetic DSC profiles make it possible to find the origin of this thermal effect.

### Experimental part

A difunctional monomer used in this work is Tripropyleneglycoldiacrylate (TPGDA,  $M_n=300\text{g/mol}$ ). The commercial liquid crystal E7 was employed which represents a mixture of four cyanobiphenylene derivatives. Initial mixtures containing 30 weight-percent (wt.%) of monomer, 70 wt.% of E7, and 1wt.% (of the weight of the monomer) of a photoinitiator (Lucirin TPO, from BASF) were mixed together for several hours until the mixture became homogeneous. The polymerization and crosslinking processes were induced by a LC-08 irradiation source (from Hamamatsu), equipped with a Xenon lamp and an optical fiber. In this study the photo polymerization kinetics were monitored by a differential scanning calorimeter (perkin-elmer DSC 8000) adapted for photochemical measurement, and a cooling system by a liquid nitrogen stream.

### Conclusion

Heat flow clear to the photopolymerization reaction is independent on the UV radiation dose but decreases according to the UV intensity, since it has the presence of an endothermic energy flow which plays a significant role for a reactive mixture in the presence of LC E7. The results show that a high intensity UV lamp heats the material and slows the polymerization process which affects the electro-optical properties.

### References

- [1] Fergason. J. L. *SID Dig.* 16, 68. (1985).
- [2] Hadjou Belaid, Z., Méchernène, L., Maschke, U. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* (2009). 502 29.
- [3] Hadjou Belaid, Z., Méchernène, L., Maschke, U. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* (2011). 544 1.
- [4] J. F. Rabek. *Elsevier Applied Science*, London, p, 371,1993.

## P75 – CPCQ2017

**ETUDE AB INITIO DE L'EFFET DE TEMPERATURE HYDROSTATIQUE SUR UN COMPOSE  
CRISTALLIN : Sr<sub>2</sub>YTaO<sub>6</sub>**

F. Labani<sup>1</sup>, T. Ouahrani<sup>2,3</sup> and B. Lasri<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Université Dr Tahar Moulay de Saïda, Algérie.

<sup>2</sup>Ecole Préparatoire en Sciences et technique (EPST), Tlemcen, Algérie

<sup>3</sup>Laboratoire de Physique Théorique, Université de Tlemcen, Algérie

**Abstract**

By means of Atoms in Molecules (AIM) tools implemented in the *abinit* code, we attempt to explore local properties of some simple and double perovskite compounds. In our investigation we use algorithms involving a numerical charge density values on a grid. The main standpoint of our focus is decomposing electronic densities and that in order to get partition of the unit the cell in a local volume ( $v_\Omega$ ) and atomic contributions like atomic charge ( $Q_\Omega$ ). This notion of atomic partition allows us to explore the bonding behavior of our compounds by useful and sophisticated methods. We pay attention to the metallization and others phenomena resulting from pressure induced phase transition. Many qualitative ideas about the chemical bond change along these transitions can be quantified from this study.

**Références**

- [1] R.F.W. Bader, *Atoms in Molecules: A Quantum Theory* (Oxford University Press, Oxford, 1990)  
 [2] T. Ouahrani, R. Khenata, B. Lasri, A.H. Reshak, A. Bouhemadou, S.Bin-Omran, *Physica B : Condensed Matter Physica B* 407 (2012) 3760-3766  
 [3] B. Lasri, I. Merad Boudia, and T. Ouahrani, *EPJ Web of Conferences* 44 03002 (2013)  
 [4] T. Ouahrani, B Lasri, S Bekhechi and M Mebrouki *Phys. Scr.* 86 (2012) 025706  
 [5] A.D. Becke, K.E. Edgecombe, *J. Chem. Phys.* 92 (1990) 5397.

## P76 – CPCQ2017

**SYNTHESIS BY SOL GEL AND CHARACTERIZATION OF ZnCO<sub>2</sub>O<sub>4</sub> PYRAMIDAL MICROCRYSTALS AS A  
HIGH PERFORMANCE PSUEDOCAPACITOR ELECTRODE**

Loubna Merabet<sup>a\*</sup>, Kamel Rida<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratory of the Interactions Materials-Environment (LIME), University of Jijel, 18000 Jijel, Algeria*

\* [katiloulou-2010@hotmail.fr](mailto:katiloulou-2010@hotmail.fr)

**Abstract**

A promising Zn-substituted Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (ZnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) electrode material was successfully synthesized through a sol gel method. The structure and morphology of the material are characterized by X-ray diffraction, scanning electron microscopy and IR. The supercapacitive properties of ZnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> films based electrodes have been studied in aqueous NaOH (1 M) electrolyte solution. Meanwhile, the electrochemical performances of the samples were studied using cyclic voltammetry (CV) and electrochemical impedance spectroscopy (EIS). The results show that the spinel structure ZnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> own the best performance, good electrochemical stability, excellent electrochemical reversibility and exhibits a high specific capacitance. The maximum supercapacitance obtained is 350 F g<sup>-1</sup> in a potential window of [-0.6–0.5V] at a scan rate of 10 mV s<sup>-1</sup>.

**Keywords :** sol gel, spinel ZnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, physicochemical characterization, electrochemical characterization.

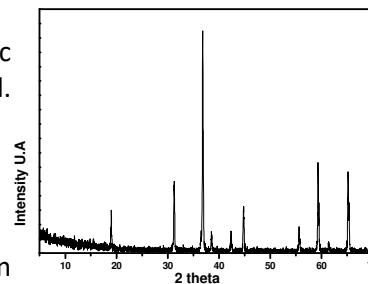
**Introduction**

Electrochemical supercapacitors are charge-storage devices that have a greater power density and longer cycle life compared to batteries[1], and higher energy density compared with conventional capacitors.



### Synthesis and characterization of ZnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

The ZnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> powder were synthesized by sol-gel method using citric acid. The mixture stirred virogously at 80°C until the formation of the gel. The gel was heated in air at 550°C . the result of DRX confirm the formation of the phase without any impurity. The morphology of the material has a very porous and pyramidal structure which will help the redox reactions at the interface of the material. The result of FTIR confirm the formation of ZnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> . The electrochemical characterization



was made by voltametry cyclic and impedance. We can notice that these curves have excellent stability and good electrochemical reproducibility[2]. The Nyquist curve shows that the comporment of the material is pseudocapacitive with a surface capacity  $C_s = 759 \text{ mF.cm}^{-2}$ .

### Conclusion

To sum up ZnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> spinel was prepared with a facile low cost sol gel method and although the sample is pure, it gave excellent results  $350 \text{ Fg}^{-1}$  and after the study that made us come to the conclusion that this type of electrode is promising for environmentally friendly electrochemical supercapacitor.

### References

- [1] G. Zhang, T. Wang, X. Yu, H. Zhang, B. Lu, Nano energy, 2 (2013) 586-594.  
 [2] T .Kim, A. Ramadoss, B. Saravanakumar, G. Kumar, S.J. Kim. App Sur Sci. 370 (2016) 452-458.

## P77 – CPCQ2017

### EFFECT OF SINTERING TIME ON THE MICROSTRUCTURE, DENSITY, AND POROSITY OF CHROMIUM FERRITE.

H. Nadour<sup>a,b\*</sup>, M. Tamine<sup>a</sup>, S. Yefsah<sup>b</sup>,

<sup>a</sup> Chemical Department, Faculty of Science, Mouloud MAMMERI University, Tizi-Ouzou, ALGERIA

<sup>b</sup> Laboratory of Physics and Quantum Chemistry (LPCQ), Mouloud MAMMERI University, Tizi-Ouzou, ALGERIA

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

### Abstract

Nano crystalline Chromium ferrites were prepared by using chemical Co-precipitation method and followed by heat treatment at 1000°C. X-ray diffraction and scanning electron microscopy were used to investigate the influences of sintering time at same annealing temperature on the the structure, density and porosity of Cr-ferrite. The XRD patterns of the samples provide the evidence of two phases at 1000°C. SEM micrographs of this samples revealed that the grain size increases and the porosity decreases with the increase in sintering time at same temperature.

**Keywords:** Ferrite, sintering time, Co-precipitation, density, porosity, X-ray techniques.

### Introduction

Ferrites, Chromium and metal substituted Chromium ferrites have attracted a lot interest in recent years due to their distinct optical, electric, and magnetic properties [1,3]. The present paper gives the results concerning the effects on structural properties of sintering time at same temperature.

### Results and discussion

The XRD patterns of Cr-ferrite (Fig 1) show a mixture of two crystalline phases, particles with hexagonal morphology and particles with cubic morphology. The micrographs measured by scanning electronic microscopy (SEM) are given in Fig. 2 and Fig 3. As can be seen that the grains grow dramatically with the heating temperature increasing, which indicates that higher sintering temperature is beneficial for ferrite formation and crystallization. The density of the specimens has been deter-mined accurately by the hydrostatic method and the percentage of porosity was calculated. The values of the bulk density and the percentage of porosity for ferrites are given in Table 1.



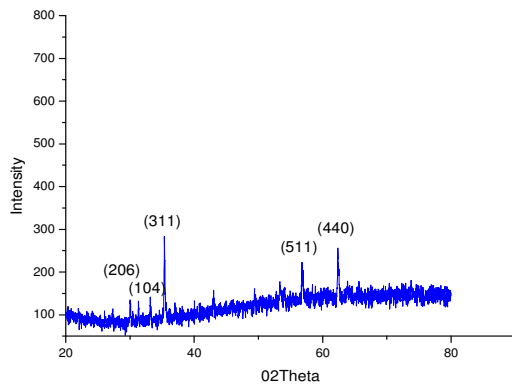


Fig 1: XRD patterns of Chromium ferrite particles calcined at 1000°C

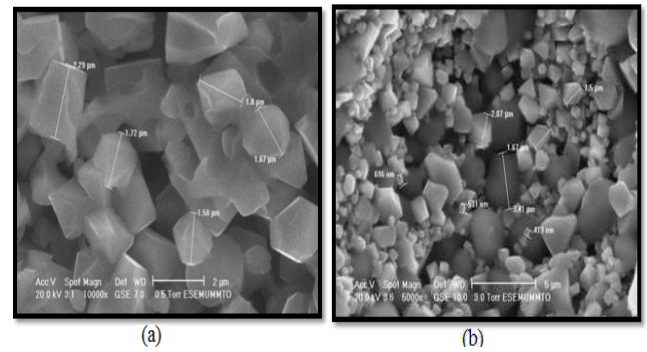


Fig 2: SEM micrograph of the sample obtained by calcined at 1000°C for: (a) 2h, (b) 10h

The increases in density of the samples also influence the increase in grain size and decrease in the degree of porosity can be seen from the table 1.

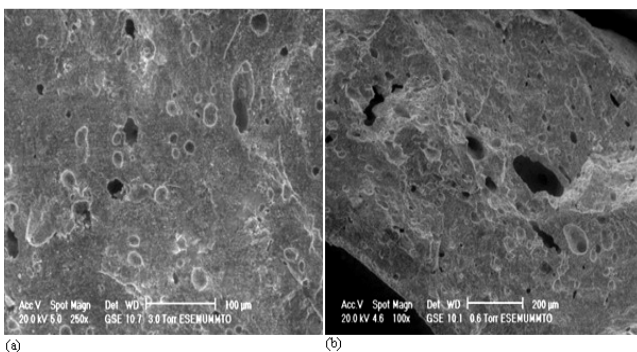


Fig 3: SEM micrograph of the sample obtained by calcined at 1000°C for: (a) 2h, (b) 10h

<i>Sintering Temperature (°C)</i>	<i>Density (Gm/cm<sup>3</sup>)</i>	<i>Porosity (%)</i>	<i>Size(nm)</i>
1000(02h)	3.34	0.96	1580-2290
1000(10h)	3.45	0.32	2007-5310

Table 1: Density, porosity and size of the sample obtained by calcined at 1000°C

The sintering for 10 hours at 1000°C temperature has greater distribution of pores within particles than that of sample sintering for 02 hours at 1000°C. The reason is due to rapid grain increase at very last sintering degree; because the pores has been moved away along the grain boundaries and that they were migrating from boundaries into the indoors grain [4].

### Conclusion

XRD show a mixtures nanocrystalline oxide, the process is dominated by the equilibrium of two phases, Chromium-doped hematite and Chromium-doped magnetite. At higher sintering time the bulk density increases and the porosity decreases progressively. The variations in properties for this ferrite have many contributing factors, which include density, change in cation distribution and relative stability.

### References

- [1] J.-F.Lutz, S. Stiller, A. Hoth, L. Kaufner, U .Pison, R .Cartier, Bio macromolecules 7 (2006) pp 3132 -3138.
- [2] H.S.Huang, J.F.Hainfeld, Int.J.Nanomed.8 (2013) pp 2521-2529.
- [3] T.Kobayashi, Biotechnol.J.6 (2011) pp 1342-1347.
- [4] Mittemeijer, Eric J,Fundamentals of Materials Science. Springer Berlin Heidelberg, (2010) pp 371-461.

**P78 – CPCQ2017****ELABORATION DE L'ANODE AlZnSnMg POUR LA PROTECTION CATHODIQUE DE L'ACIER DANS L'EAU DE MER.**C. Oulmas<sup>a</sup>, D. Boughrara<sup>a</sup>, S. Boutarfaia<sup>b</sup>, A. Kadri<sup>a</sup>, N. Benbrahim<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie des Matériaux LPCM, Tizi Ouzou, Algérie<sup>b</sup> Centre de Recherche Nucléaire de Draria, Alger, Algérie[cilyaoulmas@gmail.com](mailto:cilyaoulmas@gmail.com)**Résumé**

La performance d'une anode sacrificielle est reliée à son efficacité électrochimique, pour cela, des chercheurs ont axé sur le développement d'alliages d'aluminium avec un film d'oxyde qui peut être rompue par l'ajout de certains éléments. L'alliage AlZnSn2.5%Mg élaboré par fusion est mis en solution pour protéger l'acier durant un mois de couplage. L'état de surface avant et après immersion dans une eau agressive ASTM D1141-98 est caractérisé par MO, MEB couplée à l'EDX. Les précipités formés lors de la solidification sont caractérisés par la DRX. D'après nos résultats l'anode a 2.5%Mg s'avère de meilleure composition et peut être utilisée avec succès comme une anode sacrificielle pour la protection de l'acier en eau de mer.

**Mots clés :** Anodes sacrificielles, protection cathodique, MO, MEB-EDX**Introduction**

A l'heure actuelle et pour faire face à la corrosion de l'acier dans un environnement agressif tel que l'eau de mer, des méthodes de maintenance électrochimique sont toujours en voie d'utilisation. Parmi elles, on trouve la protection cathodique par anodes sacrificielles [1,2]. Ces anodes sont électrochimiquement plus électronégatives que la structure à protéger.

**Partie expérimentale**

Les alliages d'aluminium sont les plus souvent utilisés dans ce domaine en donnant un meilleur rendement en courant galvanique [3,4]. L'objectif clé de ce travail est d'élaborer l'alliage Al-5Zn-0.22Sn-2.5Mg pour protéger l'acier dans une solution ASTM D1141-98. En premier lieu l'alliage est élaboré par fusion des éléments purs, dans un four sous atmosphère d'argon dans un creuset en carbure de silicium. La coulée se fait après brassage du bain liquide dans un moule cylindrique en graphite. Par la suite, l'alliage subit un vieillissement à température ambiante pour permettre le durcissement de l'alliage par précipitation de composés intermétalliques dans la matrice d'aluminium. L'état de surface de l'alliage a été observé par microscope optique (MO) et par microscope électronique à balayage (MEB en mode électrons rétrodiffusés) couplée à la microanalyse EDX. Les composés intermétalliques formés au cours de la solidification de l'alliage, sont détectés par DRX.

**Conclusion**

L'alliage Al-5Zn-0.22Sn-2.5Mg, après un mois de protection de l'acier, présente une meilleure activité sacrificielle comparée à l'anode sans Mg; ce qui rend cet alliage un bon candidat pour la protection de l'acier en eau de mer.

**Références**

- [1] A.I.Muazu, S. A.Yaro, J.Minerals & Materials Characterization & Engineering, Vol. 10, No.2, (2011), pp.185-198.
- [2] B. Laoun, K. Niboucha, L. Serir, Revue des Energies Renouvelables Vol. 12 N°1 (2008) 99 – 104.
- [3] D.Baxter, J.Britton Offshore Cathodic Protection, (2006). 101, 10851.
- [4] J.Genesca, J.Juareg, Contributions to Science 1 (3), (2007), 331 – 334.

## P79 – CPCQ2017

## STUDIES OF TEMPERATURE-DEPENDENT BEHAVIOR AND CRYSTALLIZATION KINETICS OF $(\text{Co}_{58}\text{Fe}_{32}\text{Ta}_{10})_{80}\text{B}_{20}$ SOFT MAGNETIC METALLIC GLASS BY ELECTRONIC AND CALORIMETRIC MEASUREMENTS.

B. Smili<sup>a,\*</sup>, M. Mayoufi<sup>a</sup>, I. Kaban<sup>b,c</sup>, J.G. Gasser<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Chimie des Matériaux Inorganiques, Université Badji-Mokhtar Annaba, BP12, 23000 Annaba, Algérie

<sup>b</sup> IFW Dresden, Institut des Matériaux Complexes, P.O. Box 270116, 01171 Dresden, Allemagne

<sup>c</sup> Laboratoire de Chimie et Physique - Approche Multi-échelle des Milieux Complexes Chimie, Physique et Matériaux, Université de Lorraine, 1 Boulevard Arago - 57078 Metz cedex 3, France.

\* [smili.billel@yahoo.fr](mailto:smili.billel@yahoo.fr)

### Abstract

In this paper, the thermal stability, and structural changes of  $(\text{Co}_{58}\text{Fe}_{32}\text{Ta}_{10})_{80}\text{B}_{20}$  metallic glass will be characterized by electrical resistivity, absolute thermo-electric power, differential scanning calorimetry (DSC), X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy (SEM). A very good agreement between the phase transition temperatures determined using different techniques has been determined. Thermal stability and crystallization kinetics of  $(\text{Co}_{58}\text{Fe}_{32}\text{Ta}_{10})_{80}\text{B}_{20}$  amorphous alloy were evaluated under isothermal and non-isothermal conditions by using electrical resistivity measurements. The activation energies for crystallization  $E_x$ , were evaluated from different heating rate using the Kissinger and Ozawa methods, and calculated to be 479.5 KJ/mole and 468.6 kJ/mol, respectively. From TER data It was found that the  $(\text{Co}_{58}\text{Fe}_{32}\text{Ta}_{10})_{80}\text{B}_{20}$  metallic glass has A wide supercooled liquid region of 63 K and high activation energy of crystallization evaluated from different heating rate calculated to be 479.5 kJ/mol and 468.6 kJ/mol using the Kissinger and Ozawa methods respectively, this demonstrates the very high thermal stability of this glassy alloy. The isothermal crystallization process of the melt-spun  $(\text{Co}_{58}\text{Fe}_{32}\text{Ta}_{10})_{80}\text{B}_{20}$  amorphous alloy described by the Johnson-Mehl-Avrami equation, and the Avrami exponents obtained are in the range of 1.97 to 2.23 with an average value of  $n = 2.11$ . In the isothermal process the activation energy, calculated by the Arrhenius equation decreases as the volume fraction converted between 10 % and 90 %, and giving an average value of  $E_x = 467.2$  kJ/mol. The crystal structure and the morphology in the raw state and after thermal treatment have been investigated by X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscope (SEM).

**Keywords:** Metallic glass, Phase transition, Thermal stability, Electronic transport properties.

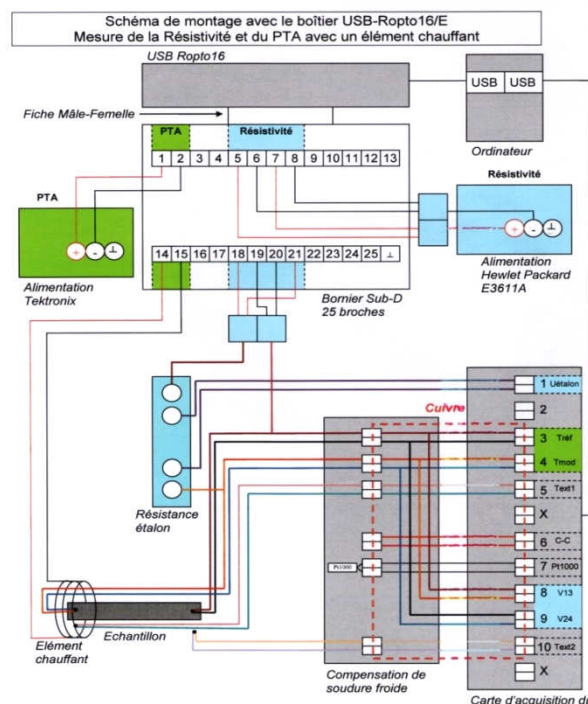


Fig. 1 : Experimental setup for thermopower and resistivity measurements at 300-1600 K

### Conclusion

The high sensitivity of the electronic transport properties of the structural changes enabled us to find the phase transitions where the amorphous pass from the disordered state to a crystalline state, and study the kinetics of this passage in isothermal regime. The characterization by measuring resistivity and thermoelectric power is as an additional means of analysis probably as well as DSC (if not better). In this context, the study of the  $(\text{Co}_{58}\text{Fe}_{32}\text{Ta}_{10})_{80}\text{B}_{20}$  soft magnetic metallic glass confirmed the potential of this means of investigation to study the thermal behavior, kinetics and nanostructural change of MGs.

### References

- [1] A. Ben Abdellah, B. Grosdidier, S.M. Osman, S.M. Mujibur Rahman, M. Mayoufi, J. Ataati, J.G. Gasser, Spin-state dependence of electrical resistivity and thermoelectric power of molten Al-Mn alloys: Experiment and theory," *Journal of Alloys and Compounds* pp.658.2016.
- [2] L. Abadlia, F. Gasser, K. Khalouk, M. Mayoufi, and J. G. Gasser, "New experimental methodology, setup and LabView program for accurate absolute thermoelectric power and electrical resistivity measurements between 25 and 1600 K: Application to pure copper, platinum, tungsten, and nickel at very high temperatures," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 85, no. 9, 2014.



## **12<sup>ÈMES</sup> JOURNÉES DE CHIMIE THÉORIQUE ET COMPUTATIONNELLE**







## **COMMUNICATIONS ORALES**







## COL - JCTC12

FIRST-PRINCIPLE CALCULATIONS OF H<sub>2</sub> MOLECULE INSIDE BORON-NITROGEN NANOTUBES

Y. Belmiloud<sup>(1)</sup>, W. Djitli<sup>(1)</sup>, M.L. Abdelatif<sup>(1)</sup>, H. Abdeldjebbar<sup>(1)</sup>, B. Tangour<sup>(2)</sup>, M. Brahimi<sup>(1)</sup>

(1)- Laboratoire de Physico-Chimie Théorique et de Chimie Informatique. Faculté de Chimie, Université des Sciences et Techniques Houari Boumediene, Alger, Algeria.

(2)-Research Unity on Fundamental Sciences and Didactics, Team of Theoretical Chemistry and Reactivity, Universitéde Tunis-El Manar, Tunis, Tunisia.

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

### Abstract

DFT/B3LYP and CAM-B3LYP calculations have been performed in order to study H<sub>2</sub> molecule behavior inside boron-nitrogen nanotubes(BNNT) (2,2), (3,3), (4,4) and (5,5) which diameters ranged from 2.86 to 6.99 Å. Atomic charge distribution have been extracted from Natural Bond Orbitals analysis (NBO). Several basis sets of different sophistication degree have been tested as 3-21G(p), 4-31G(p), 6-31G and 6-311G(d,p). This work has allowed us to compare the behavior of a hydrogen molecule introduced perpendicular and parallel to the axis of various boron-nitrogen and carbon nanotubes of close size diameters. The main difference is the disappearance of the H-H bond activation zone in BNNTs because of the absence of interactions between the  $\pi$  electrons and hydrogen such those existing in CNTs. The most important phenomenon is the shortening of the H-H bond by interaction of hydrogen atomic radius with the repulsive zone of van der Waals potential of BNNT's walls. This has led to the appearance of a dipole moment in the inclusion complex H<sub>2</sub>@BNNT. The most important consequence of the existence of this dipole moment is IR activation of H-H stretching vibration that becomes intense and nanotube diameter dependent. As application, this vibration frequency may be used for detecting or assaying H<sub>2</sub> contained in the nanotubes or to deduce the diameter of the host tube.

**Key-words:** Boron-Nitrogen Nanotube, carbon nanotube, DFT/CAMB3LYP, van der Waals radius, encapsulation energy.

### Introduction

Boron nitride and carbon materials are isoelectronic systems because B and N atoms totalize 8 valence electrons as 2 carbon atoms do. For this reason they exhibit similar behavior. BN crystals exist in different forms that have similar carbon lattice structures. The Boron Nitride Nanotubes (BNNTs) are composed of N and B atoms and they have analogous structures as carbon nanotubes (CNTs) [1-3]. Although these two types of nanotubes have structural similarities, they significantly differ in their physical and chemical properties. Research activities on BNNTs are increased recently. Several theoretical and experimental studies revealed the secrets of this material. The high electronegativity of N causes an asymmetric charge distribution in B–N bonds in BNNTs [4,5]. The B–N bonds have a partially ionic character which provides an important feature to BNNTs compared to CNTs. The former possess electrical properties which are not dependent on their, chirality and number of tubular walls [6-7].

The absence of formally  $\pi$  bonding between the boron and the nitrogen may be at the origin of those differences. It is clear that the existence of the lone pair of the nitrogen and boron in vacant orbital will condition the comportment of BNNTs. In order to further exploration of their hollow space that exists, we performed a study of hydrogen molecule confinement into different (n,n) nanotube varying their diameters, n ranging from 2 to 5 that are (2,2), (3,3), (4,4) and (5,5). We will compare obtained results with those found when we used carbon nanotubes. To do this, we will insert a hydrogen molecule in a perpendicular position to the axis of BNNTs, using the density functional theory (DFT). We will examine confinement energy, H-H bond length, atomic charges, dipole moment and vibrational frequencies of the studied systems.

### Conclusion

This work has allowed us to compare the behavior of a hydrogen molecule introduced perpendicularly to the axis of various boron-nitrogen and carbon nanotubes of size close diameters. In both cases the confinement energy is positive but becomes very low for large diameters. The main difference is the disappearance of the H-H bond activation zone in BNNTs because of the absence of interactions between the  $\pi$  electrons and hydrogen such those that exist in CNTs.

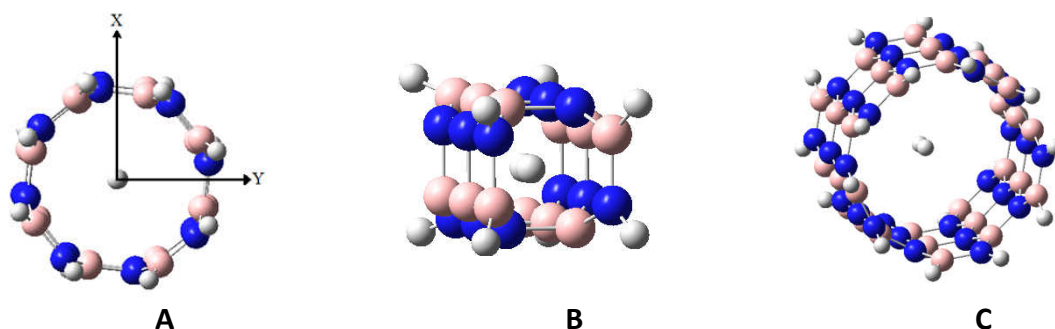


Figure 1: a- Parallel Orientation of  $H_2$  inside a BNNT, b-  $H_2(//)$ @(2,2) c-  $H_2(//)$ @(5,5)

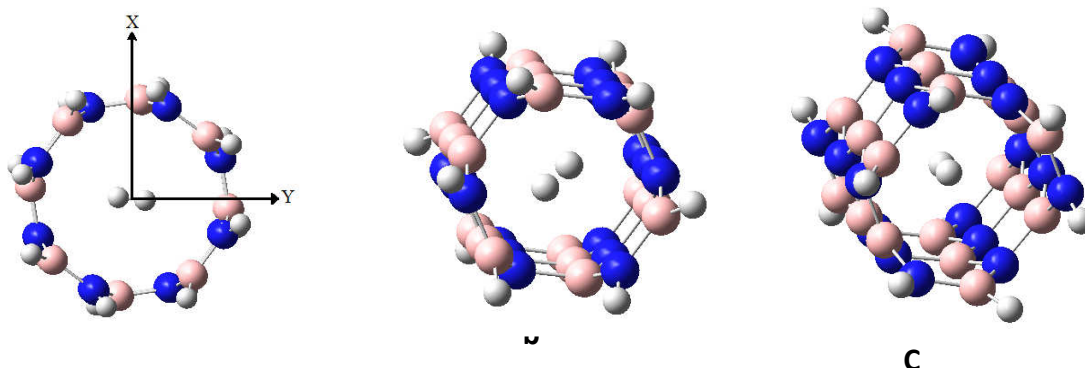


Figure 2: a- Perpendicular Orientation of  $H_2$  inside a BNNT, b-  $H_2(\perp)$ @(2,2) at DFT/B3LYP c-  $H_2(\perp)$ @(3,3) at DFT/CAM-B3LYP level

The most important phenomenon in this range of diameter is the shortening of the H-H bond by interaction of hydrogen atomic radius with the repulsive zone of van der Waals potential of BNNT's walls. This has led to a polarization of the appearance of a dipole moment in the inclusion complex  $H_2@(n,n)$ . The most important consequence of the existence of this induced dipole moment is IR activation of H-H stretching vibration that becomes very intense and whose value depends on the diameter of the nanotube. As application, this vibration frequency may be used for detecting or assaying  $H_2$  contained in the nanotubes or to deduce the diameter of the host tube.

#### Acknowledgments

This work is the result of an Algerian-Tunisian cooperation.

We are very grateful to the Laboratory of Theoretical Physical Chemistry and Computational Chemistry of Chemistry Faculty of U.S.T.H.B. having subsidized all our research, particularly Professor Mr. Brahimi. Special thanks to Universite de Tunis El Manar for hosting our students in training, in particular Professor Bahoueddine Tangour and Meriam Tangour for all their valuable support.

#### References

- [1] Golberg, D.; Bando, Y.; Huang, Y.; Terao, T.; Miyome, M.; Tang, C.; Zhi, C. *ACS Nano* 2010, 4, 2979–2993.
- [2] Wang, J.; Lee, C. H.; Yap, Y. K. *Nanoscale* 2010, 2, 2028–2034.
- [3] Golberg, D.; Bando, Y.; Tang, C. C.; Zhi, C. Y. *Adv. Mater.* 2007, 19, 2413–2432.
- [4] Cohen, M. L.; Zettl, A. *Phys. Today* 2010, 63, 34–38.
- [5] Tiano; Cheol Park; Joseph W. Lee; Hoa H. Luong; Luke J. Gibbons; Sang-Hyon Chu; Samantha Applin; Peter Gnoffo; Sharon Lowther; Hyun Jung Kim; Paul M. Danehy; Jennifer A. Inman; Stephen B. Jones; Jin Ho Kang; Godfrey Sauti; Sheila A. Thibeault; Vesselin Yamakov; Kristopher E. Wise; Ji Su; Catharine C. Fay, 2014, Proc. SPIE 9060, *Nanosensors, Biosensors, and Info-Tech Sensors and Systems*, 906006; DOI: 10.1117/12.2045396
- [6] X. Blase, A. Rubio, S. G. Louie and M. L. Cohen, *Europhys. Lett.*, 1994, 28, 335–340.
- [7] A. Rubio, J. L. Corkill and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B: Condens. Matter*, 1994, 49, 5081–5084.
- [8] Y. Belmiloud, W. Djitli, M.L. Abdelatif, H. Abdeldjebar, B. Tagour and M. Brahimi *Superlattices and Microstructures*. DOI:10.1016/j.spmi.2016.10.081

## CO1 - JCTC12

ETUDE THEORIQUE DE LA COMPLEXATION DE N-BENZOYL- $\beta$ -PHENYLISOSERINE PAR L'EXCES DU  $\text{Ca}^{2+}$  PRESENT DANS LA CELLULESoraya Abtouche<sup>a\*</sup>, Meziane Brahimi<sup>a</sup>, Xavier Assfeld<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physico-Chimie Théorique et Chimie Informatique. BP 32 EL Alia, Bab Ezzouar 16111, Alger, Algérie.<sup>b</sup> Théorie-Modélisation-Simulation UMR CNRS UL7565 Université de Lorraine, 1 Boulevard des Aiguillettes, BP 70239, 54506 Vandœuvre-lés-Nancy Cedex, France.\* [sabtouche@yahoo.fr](mailto:sabtouche@yahoo.fr)

## Résumé

Les ions métalliques tel que le calcium, le fer, le magnésium... jouent un rôle vital dans l'organisme, particulièrement le calcium. Ce dernier, constitue un messenger important de la signalisation. L'excès de calcium présent dans la cellule et le milieu extracellulaire favorise la prolifération des cellules cancéreuses en engendrant une dépolymérisation des tubulins [1-3]. Par conséquent, Il est important de procéder à une investigation théorique de l'interaction Molécule active-métal, dans le cas où la molécule active est un anticancéreux comme le Paclitaxel (Taxol) qui est un inhibiteur mitotique utilisé en chimiothérapie du cancer du sein et de l'ovaire [4]. Le but de cette étude est d'examiner la possibilité que l'ion  $\text{Ca}^{2+}$  se complexe avec le taxol qui pourrait constituer une possibilité de piéger les ions  $\text{Ca}^{2+}$  en excès.

Dans un premier temps, on s'est intéressé à une des parties active du Taxol, à savoir la chaîne Latérale (CL) figure1. On a utilisé la méthode DFT avec la base standard 6-31+G\* et les deux fonctionnelles B3LYP et WB97XD. Selon le type d'interaction, trois complexes ont été sélectionnés, le complexe de type  $[\pi \dots \text{Ca}]^{2+}$  formant le groupe GI, le complexe de type  $[\text{NCCCO} \dots \text{Ca}]^+$  formant le groupe GII et enfin le complexe de type  $[\text{dimer} \dots \text{Ca}]^0$  formant le groupe GIII, figure2.

Les résultats révèlent que la complexation est gouvernée par l'énergie d'interaction plutôt que l'énergie de complexation. L'analyse NBO a été utilisée pour évaluer la quantité du transfert de charge du ligand au métal (LMCT). La HOMO est localisée principalement sur CL alors que la LUMO est localisée sur l'ion  $\text{Ca}^{2+}$ . Cette étude, nous permet de conclure que le taxol peut se complexer, dans les tubulins, avec les ions  $\text{Ca}^{2+}$ , ce qui pourrait être une des explications de l'inhibition de la prolifération des cellules cancéreuses.

**Mots clés :** N-Benzoyl- $\beta$ -phenylisoserine,  $\text{Ca}^{2+}$ , conformation, interaction energy, complexation energy, DFT-D2, charge transfer.

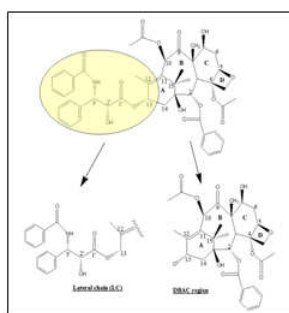


Fig 1 : Structure du Taxol et les régions actives chaîne latérale et le DBAC de la chaîne latérale (CL)

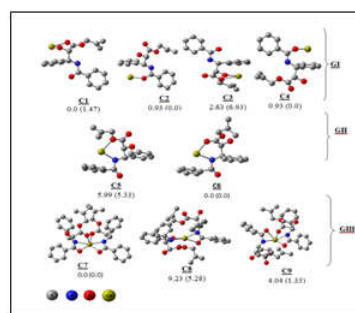


Fig 2 : Les différents sites de complexation

## Références

- [1] Stephen J. Lippard, "Metals in medicine", Book Bioinorganic chemistry, 1994. ISBN 0-935702-57-1. QP531. B543.
- [2] Willams, R. J. P. 1970. The biochemistry of sodium, potassium, magnesium and calcium. Q. Rev. Chem. Soc., 24, 331-65.
- [3] Z. Pan, A. Avila, L.Gollahon, Paclitaxel Induces Apoptosis in Breast Cancer Cells through Different calcium Regulating Mechanisms Depending on External Calcium Conditions. Int. J. Mol. Sci. 2014, 15, 2672-2694.
- [4] T. Sugimura, M. Terada, J. Yokota, S. Hirohashi, K. Wakabayashi, Multiple Genetic Alterations in Human Carcinogenesis, Environmental Health Perspectives 1992, Vol. 98, pp. 5-12.

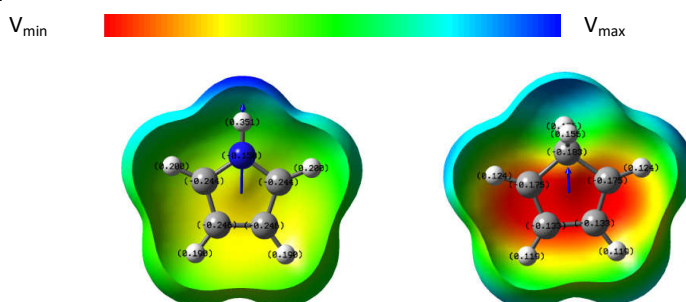
## CO2 - JCTC12

## ACIDITIES OF HYDROCARBONS AND NITROGEN-CONTAINING HETEROCYCLES IN DMSO: A THEORETICAL INVESTIGATION

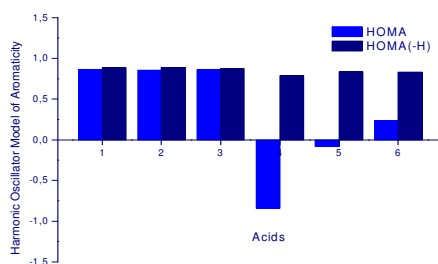
Berkane Ariche<sup>a\*</sup>, Ali Rahmouni<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Modélisation et de Méthodes de Calcul, Université Moulay Taher de Saida, B.P. 138, Cité En-nasr, route de Mascara, 20002 Saida, Algérie.\* [ariche.berkane.univ.saida@gmail.com](mailto:ariche.berkane.univ.saida@gmail.com)**Abstract:**

SMD and IEFPCM continuum solvation models have been used, in combination with three quantum chemistry methods (B3LYP, M062X and CBS-QB3) to study the equilibrium acidities of pyrrole, indole and carbazole as well as their hydrocarbon analogues in DMSO. Theoretical parameters such as aromaticity indices (HOMA and SA), molecular electrostatic potential (MEP) and atomic charges have been calculated using SMD/B3LYP/6-311++G(d,p) combination. Calculated pKa values indicate that no combination of solvation model and quantum chemistry method provides particularly different values. However there is generally good agreement with experimental data with all deviations less than the acceptable error margin for a directly calculated pKa values. Constructed MEP surfaces show clearly the electron density change accompanying the deprotonation process and explain the relative stability of conjugate bases. The evaluated aromaticity indices seem to be directly related to acids strength.

**Keywords:** pKa Calculation, Aromaticity, Density functional theory, CBS-QB3, SMD, Electrostatic interaction.



**Fig. 1** Molecular electrostatic potential maps MEPs of systems 1 and 4. Red color indicates most electron-rich site and blue color most electron-poor site.



**Fig. 2** Calculated HOMA indices for acids and their conjugate bases (HOMA(-H)).

## CO3 - JCTC12

## ETUDE THÉORIQUE DES PROPRIÉTÉS STRUCTURALES ET ANTIOXYDANTE DE LA CURCUMINE

Kahina Bakhouché<sup>a</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  
[kahinabak@yahoo.fr](mailto:kahinabak@yahoo.fr)

**Résumé**

Dans ce travail nous allons déterminer théoriquement l'activité antioxydante de la curcumine en phase gazeuse. Les mécanismes de transfert de charge, les potentiels ou les enthalpies relatives au départ d'un proton ou d'un électron et quelques propriétés chimico-physiques (géométries, charges, HOMO, LUMO) des deux formes (énol et cétone) de la curcumine sont calculés en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT.

**Mots clés:** Activité antioxydante, Curcumine, Charges, DFT, HOMO, LUMO, Spectre de vibration

**Introduction**

Les antioxydants peuvent piéger les entités oxydantes en captant leur électron libre pour former des entités plus stables. Plusieurs études stipulent que l'utilisation des antioxydants peut contribuer à réduire les risques des maladies chroniques et dégénératives [1]. Les principales molécules antioxydantes apportées par l'alimentation sont: la vitamine C, la vitamine A, la vitamine E et la curcumine. Cette dernière occupe une place très importante [2]. La curcumine existe sous deux formes: énoles et cétone, la forme énoles est la plus active, elle prédomine en solution.

**Détail théorique**

Les différents paramètres géométriques et énergétiques de l'état fondamental des deux formes de la curcumine (**Fig.1**) sont calculés en utilisant la DFT au niveau PBE0/6-31+G\* et M06/6-31+G\*. Tous les calculs effectués dans ce travail utilisent le code de calculs GAUSSIAN 09.

**Conclusion**

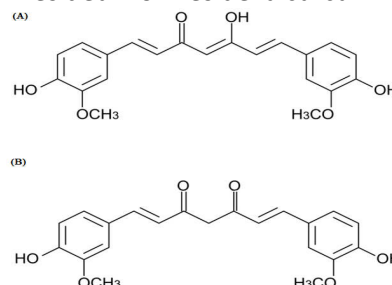
Les énergies obtenues pour les différents mécanismes de la réactivité, confirment que la forme énoles de la curcumine est la structure la plus active.

**Remerciements**

Les auteurs, Kahina Bakhouché et Dalila Hammoutène remercient l'Agence Thématique de Recherche en Sciences et Technologie-ATRST-DGRSDT-MESRS.

**Références**

- [1] X. Leverve, Intensive Care Med. 29 (2003) 511-519.  
 [2] B. Lhalvorsen, M.H. Carlsen, Am. J. Clin. Nutr. 84 (2006) 95-110.

**Fig.1.** Les deux formes de la curcumine

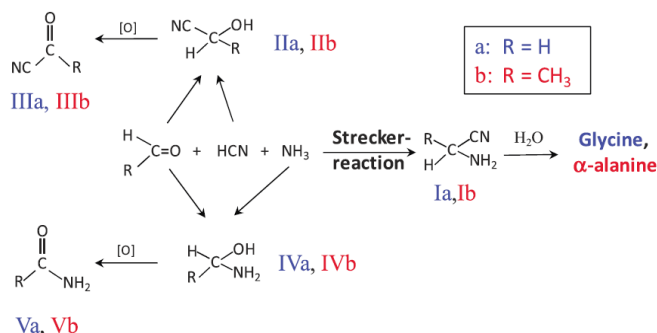
## CO4 - JCTC12

## ETUDE THEORIQUE ET EXPERIMENTALE DE MOLECULES D'INTERET ASTROCHIMIQUE

A. Bellili<sup>1</sup>, M. Hochlaf<sup>1</sup>, R. Liguerrri<sup>1</sup>, M. Schwell<sup>3</sup>, L. Poisson<sup>4</sup>, C. Puzzarini<sup>6</sup><sup>1</sup> ENS de Lyon Laboratoire de Chimie UMR 5182, 46, allée d'Italie 69364 LYON, FRANCE.<sup>2</sup> U. Paris Est, MSME, UMR 8208 CNRS, 5 Bd Descartes, 77454 Champs-sur-Marne, FRANCE.<sup>3</sup> LISA, UMR 7583 CNRS, U. Paris Est-Créteil et Paris Diderot, 61, A. Général de Gaulle, 94010 Créteil, FRANCE.<sup>4</sup> LIDyL, UMR 9222 CNRS, U. Paris-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, FRANCE.<sup>5</sup> Dipartimento di Chimica "Giacomo Ciamician", Università di Bologna, Via F. Selmi, Bologna, ITALIE.\* [bellili.avad@gmail.com](mailto:bellili.avad@gmail.com)

## Résumé

Dans ce travail nous nous sommes intéressés à l'étude théorique et expérimentale de la molécule prébiotique pyruvonitrile (PY, NC-C(O)CH<sub>3</sub>) [1]. Cette molécule est inspirée de la réaction de Strecker [2] qui est un scénario plausible de formation d'acides aminés dans des conditions physico chimiques interstellaires.



**Figure 1** : Réactions attendues dans des conditions interstellaires.

Durant cette étude nous avons mesuré les spectres de photoionisation de la pyruvonitrile avec le spectromètre DELICIOUS3 disponible sur la ligne DESIRS du Synchrotron SOLEIL. La seconde partie de ce travail consiste à calculer par les méthodes ab-initio de la chimie quantique à fin d'analyser les spectres et de déterminer les mécanismes de la fragmentation de l'ion PY<sup>+</sup> formé. Nous avons également traité les états excités de cet ion. Nous avons ainsi déterminé les énergies d'apparition des fragments des rapports de branchement d'état à état correspondants. Nous avons également déterminé les constantes spectroscopiques (vibration et rotation) de la molécule neutre et ionisée qui permettront leur détection dans le milieu interstellaire.

## Références :

[1] A.belloche, K.M.Menten, C.Comito, H.S.P.Muller, P.Schilke, J.Ott, S. Thorwirth, C.Hieret, A&A.482,179-196 (2008).

[2] Danger et al, 2011 Astrophys 535 (2011), A47, 1-9.



## CO5 - JCTC12

**THEORETICAL SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION OF ETHYLENE GLYCOL AT LOW TEMPERATURES (HIGHLY CORRELATED AB INITIO CALCULATIONS AND VARIATIONAL PROCEDURE)**

Rahma Boussassi <sup>a,b\*</sup>, Maria Luisa Senent Diez <sup>a</sup>, Nejm-Eddine Jaïdane <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Departamento De Química y Física Teóricas, Instituto de Estructura de la Materia, C.S.I.C., Serrano 121, Madrid 28006, Spain

<sup>b</sup> Laboratoire de Spectroscopie Atomique, Moléculaire et Applications-LSAMA, LR01ES09, Faculté des sciences de Tunis, Université de Tunis El Manar, 2092, Tunis, Tunisie.

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

**Abstract:**

Ethylene glycol (EG) is a relevant astrophysical species and it was detected in the interstellar medium [1]. This molecule can be classified in the double molecular symmetry group G8 and displays nine stable conformers, gauche and trans. In the gauche region, the effect of the potential energy surface anisotropy due to the formation of intramolecular hydrogen bonds is relevant. For the primary conformer, the ground vibrational state rotational constants are computed at 6.3 MHz, 7.2 MHz and 3.5 MHz from the experimental parameters [2]. A variational procedure of reduced dimensionality based on CCSD(T)-F12 calculations is applied to understand the far infrared spectrum [3].

**Keywords:** Non-rigid, weak intramolecular interaction, torsional spectra

Ethylene glycol displays very low torsional energy levels whose classification is not straightforward. Given the anisotropy, tunneling splittings are significant and unpredictable. The ground vibrational state splits into 16 sublevels separated approximately  $142\text{ cm}^{-1}$ . Transitions corresponding to the three internal rotation modes allow assign previous observed Q branches [4]. Band patterns, calculated between  $362.3\text{ cm}^{-1}$  and  $375.2\text{ cm}^{-1}$ , between  $504\text{ cm}^{-1}$  and  $517\text{ cm}^{-1}$  and between  $223.3\text{ cm}^{-1}$  and  $224.1\text{ cm}^{-1}$ , that correspond to the tunnelling components of the  $\nu_{21}$  fundamental, are assigned to the prominent experimental Q branches [4].

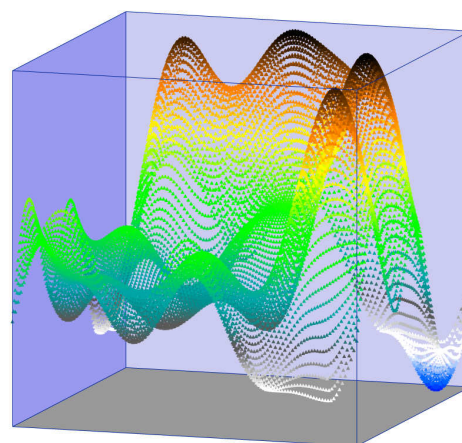


Fig. 1: Potential Energy Surface of EG.

**Acknowledgments:**

This research was supported by the MINECO of Spain grant FIS2013-40626-P and Tunisian grant. The authors acknowledge the COST Actions CM1405 "MOLIM" and CM1401 "Our Astrochemical History". The authors acknowledge the CTI (CSIC) and CESGA for computing facilities.

**References**

- [1] J. M. Hollis, F. J. Lovas, P. R. Jewell, L. H. Coudert, *Astrophys J.* 571 (2002) 59-62.
- [2] D. Christen, L. H. Coudert, R. D. Suenram, F. J. Lovas, *J. Mol. Spectrosc.* 172 (1995) 57-77.
- [3] R. Boussessi, M. L. Senent, N. Jaïdane, *J. Chem. Phys.* 144 (2016) 164110-1-11.
- [4] P. Buckley, P. A. Giguère, *Can. J. Chem.* 45 (1967) 397-407.

## CO6 - JCTC12

ETUDE THEORIQUE DU MECANISME ET SELECTIVITE DE LA REACTION DE CYCLOADDITION [3+2]  
ENTRE L'YLURE D'AZOMETHINE ET LE NITROSTYRENE

Abdelmalek Khorief Nacereddine<sup>a,b\*</sup>, Lilia Nasri<sup>b</sup>, Abdelhafid Djerourou<sup>b</sup>, Mar Rios-Gutiérrez<sup>c</sup> et Luis R. Domingo<sup>c</sup>

<sup>b</sup> Département de Physique et Chimie, Ecole Normale Supérieure d'Enseignement Technologique de Skikda, Skikda, Algérie

<sup>a</sup> Laboratoire de Synthèse et Biocatalyse Organique, Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar d'Annaba, Annaba, Algérie

<sup>c</sup> Department of Organic Chemistry, University of Valencia, Dr. Moliner 50, E-46100 Burjassot, Valencia, Spain.

\* [khorief.abdelmalek@univ-annaba.org](mailto:khorief.abdelmalek@univ-annaba.org)

## Résumé

Une étude computationnelle du mécanisme et de la sélectivité des réactions de CA32 de l'ylure d'azométhine (YA) avec un nitroalcène aromatique NAA (nitrostyrène) a été réalisée en utilisant des méthodes DFT au niveau théorique MPWB1K/6-31G (d). Les voies stéréosélectives endo/exo et régiosélectives ortho/méta possibles ont été explorés et caractérisés. L'analyse de la surface d'énergie potentielle montre que cette réaction de CA32 favorise cinétiquement la formation du cycloadduit généré à partir de l'approche ortho-exo (Voir Figure) comme un seul isomère, en accord avec les données expérimentales. Le solvant n'a aucun effet remarquable sur la sélectivité, mais il diminue légèrement les énergies d'activation. Les valeurs du transfert de charge calculé aux états de transition expliquent le caractère polaire de ces réactions et les énergies d'activation faibles de ces réactions de CA. Les indices de réactivité dérivant de la DFT expliquent les valeurs des énergies d'activation faibles ; en conséquence de l'engagement des nucléophiles et électrophiles forts dans ces réactions.

**Mots clés :** Ylure d'azométhine, [3+2] cycloaddition, sélectivité, mécanisme, Calculs DFT, Analyse NCI.

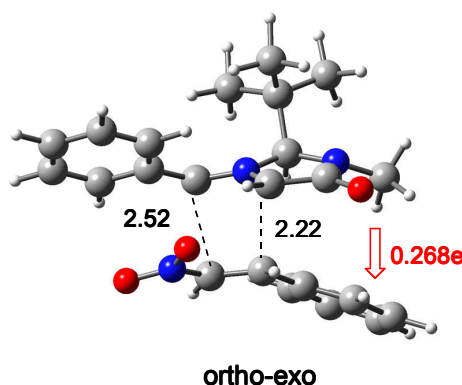


Fig. Structure de l'approche la plus favorisée avec la longueur des nouvelles liaisons et la valeur du TDEG

## Références

- [1]. Xia Zhang, Xiaoyan Wang, Yanyang He, Ying Liu, Jie Liu, Jianyou Shi. *Tetrahedron Letters* 57, 2016, 1143–1145.
- [2]. AK Nacereddine, H Layeb, F Chafaa, W Yahia, A Djerourou, LR Domingo, *RSC Advances*, 5, 2015, 64098-64105, b) AK Nacereddine, C Sobhi, A Djerourou, M Ríos-Gutiérrez, LR Domingo *RSC Advances*, 5, 2015, 99299-99311, c) Ríos-Gutiérrez, M., Chafaa, F., Nacereddine, A. K., Djerourou, A., and Domingo, L. R. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 70, 2016, 296–304.
- [3]. L. R. Domingo, M. J. Aurell, P. Pérez and R. Contreras, *Tetrahedron*, 58, 2002, 4417.
- [4]. P. Jaramillo, L. R. Domingo, E. Chamorro and P. Pérez, *J. Mol. Struct.*, 68, 2008, 865

## CO7 - JCTC12

STRUCTURAL, CHEMICAL REACTIVITY OPTICAL AND NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF  $\text{Ln}(\text{Tp})_2$  COMPLEXES: A DFT+TD-DFT STUDYDouniazed Hannachi<sup>1,2</sup>, Ahlem Khireddine<sup>1</sup>, Mohamed Fahim Haroun<sup>1,3</sup>, Henry Chermette<sup>4</sup><sup>1</sup> Département de Chimie, Faculté des Science, Université de Setif-1, El Bez, Setif, Algerie<sup>2</sup> Laboratoire Chimie des Matériaux et des Vivants: Activité, Réactivité, Université El-Hadj

Lakhdar, Batna, Algerie

<sup>3</sup> Laboratoire de Physique Quantique et Systèmes Dynamiques, Faculté des Sciences, Université de Setif-1, El Bez, Setif, Algerie<sup>4</sup> Université de Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, ENS-Lyon, CNRS UMR 5280, Institut des Sciences Analytiques, 69622 Villeurbanne Cedex, France\* [h\\_douniazed@yahoo.fr](mailto:h_douniazed@yahoo.fr)**Abstract**

The molecular structure of  $\text{Ln}(\text{Tp})_2$  (where, Ln= La, Pr, Sm, Eu, Gd, Dy, Tm, Yb and Lu, and Tp = ring-unsubstituted tris (pyrazolyl) borate) complexes, is determined by DFT calculations at B3LYP/CEP-121G and PBE/TZP level. Local and global reactivity descriptors were computed in order to predict reactive sites and reactivity on the  $\text{Ln}(\text{Tp})_2$  complexes for electrophilic, nucleophilic and radical attacks. The first-order hyperpolarizability ( $\beta_0$ ) and related properties ( $\alpha$ ,  $\alpha_0$  and  $\Delta\alpha$ ) of the title compounds are calculated by using B3LYP/CEP-121G in gas phase. The effect of solvent on nonlinear optical (NLO) response has been studied using DFT-PCM model. Time dependent density functional theory (TD-DFT) has also been used to calculate the optical absorption spectrum of the lanthanide complexes in gas phase. Quantum theory of atoms in molecules (QTAIM) has been employed to elucidate the interaction characteristics in the  $\text{Ln}(\text{Tp})_2$  complexes.

**Keywords** : Sandwich Structure, NLO, DFT, TD-DFT, DFT-PCM, QTAIM.**References**

[1] A. Momin, L. Carter, Y. Yang, R. McDonald, S. Essafi, F. Nief, I. D. Rosal, A. Sella, L. Maron and J. Takats, *Inorg. Chem.*, (2014) 53, 12066-12075.

[2] M. Kühling, C. Wickleder, M. J. Ferguson, C. G. Hrib, R. McDonald, M. Suta, L. Hilfert, J. Takats and F. T. Edelman, *New J. Chem.*, (2015) 39, 7617-7625.

[3] S. Grimme, P. R. Schreiner, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2011) 50, 12639–12642.

[4] Schinzel, M. Bindl, M. Visseaux, H. Chermette, *J. Phys. Chem. A*, (2006) 110, 11324-11331.

## CO8 - JCTC12

SOLVATATION DE  $Mg^+$  DANS L'AMMONIAC ET EFFETS DE LA TEMPERATUREAwatef Hattab<sup>a</sup>, Zoubeida Dhaouadi<sup>a</sup>, Jean Jules Fifen<sup>b</sup> et Alhadji Malloum<sup>a,b</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Spectroscopie Atomique Moléculaire et Applications, Faculté des Sciences de Tunis, Université de Tunis El Manar, Campus Universitaire, 1060, Tunis, Tunisie<sup>b</sup>Département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Ngaoundéré, B.P. 454, Ngaoundéré, Cameroun\* [Hattab.Awatef@gmail.com](mailto:Hattab.Awatef@gmail.com)**Résumé**

Détermination théorique des structures relatives aux clusters  $[Mg(NH_3)_{n=1-7}]^+$  en utilisant les méthodes quantiques MP2 et DFT-M062x/6-31++G\*\* et un modèle de solvation hybride et effets de la température sur les changements structuraux.

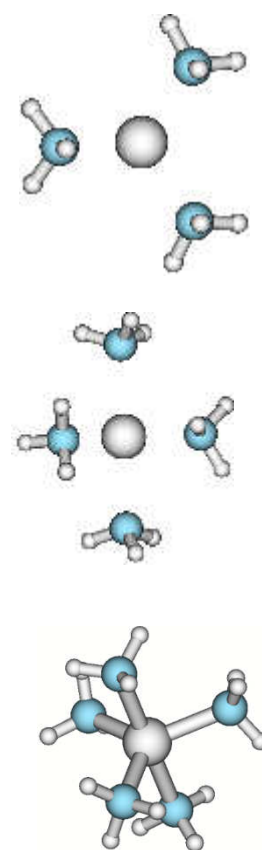
**Mots clés:** Clusters, Solvant, ion solvato, liaisons ioniques, liaisons hydrogène.

Plusieurs recherches théoriques et expérimentales ont montré le rôle primordial de la solvation des ions métalliques en chimie, en biochimie et en biologie[1-4]. En effet, les ions solvatés existent avec une forte concentration dans l'organisme de l'être humain et leur présence ou absence influencent les fonctions vitales[5]. Les métaux alcalino-terreux agissent sur le fonctionnement et la stabilité des molécules biologiques tel que l'ARN[2,4]. Des travaux antérieurs ont étudié l'agrégat  $[Mg(NH_3)_{n=1-6}]^+$  en utilisant les méthodes de la chimie théorique et ont montré que le nombre de coordination de  $Mg^+$  est de 4[6-9]. Ces travaux n'ont pas exploré un nombre suffisant de structures pour  $n=5$  et  $6$  et n'ont pas déterminé l'influence de la température sur la stabilité structurale de ces complexes moléculaires.

Dans ce travail, nous avons utilisé un modèle de solvation hybride où les clusters  $[Mg(NH_3)_{n=1-7}]^+$  sont plongés dans un solvant d'ammoniac. Nous avons déterminé en premier les structures des isomères possibles pour chaque  $n$  en utilisant les méthodes quantiques MP2 et DFT-M062x avec une base 6-31++G\*\*. La stabilité relative de ces complexes ainsi que les facteurs qui la renforcent ont été déterminés. Une analyse de population statistique nous permet de déterminer à différentes températures les isomères possibles ou majoritaires.

**Références :**

- [1] R. K. O. Sigel, A. M. Pyle, Chem. Rev. 107 (2007) 97.
- [2] S. A. Woodson, Curr. Opin. Struct. Biol. 9 (2005) 104.
- [3] V. J. DeRose, Curr. Opin. Struct. Biol. 13 (2003) 317.
- [4] A. M. Pyle, J. Biol. Inorg. Chem. 7 (2002) 679.
- [5] K. D. Collins, Biophys. Chem. 119 (2006) 271.
- [6] C. W. Bauschlicher Jr, M. Sodupe, H. Partridge, J. Chem. Phys. 96 (1992) 4453.
- [7] A. Andersen, P. B. Armentrout, J. Phys. Chem. A 104 (2000) 692.
- [8] T. Shoeib, R. K. Milburn, G. K. Koyanagi, A. C. Hopkinson, Int. J. Mass Spectrom. 201 (2000) 87.
- [9] K. Ohashi, J. Chem. Phys. 393 (2004).

Les structures les plus stables de  $[Mg(NH_3)_{n=3-5}]^+$ .

## CO9 - JCTC12

## SIMULATION PAR DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE DU COMPORTEMENT INTERFACIAL DES FONDUS DE POLYMÈRES LINÉAIRES ET CYCLIQUES

Chahrazed Meddah<sup>a\*</sup>, Andrey Milchev<sup>b</sup>, Sid Ahmed Sabeur<sup>a</sup>, Alexander M. Skvortsov<sup>c</sup>*a Laboratoire d'Étude Physique des Matériaux, Faculté de Physique, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran (USTO-MB), 31000 Oran, Algérie**b Institute for Physical Chemistry, Bulgarian Academia of Sciences, 1113 Sofia, Bulgaria**c Chemical-Pharmaceutical Academy, Prof. Popova 14, 197022 St. Petersburg, Russia*\* [chahrazedmeddah@gmail.com](mailto:chahrazedmeddah@gmail.com)**Résumé**

Dans cette communication, nous présentons les résultats d'une simulation par dynamique moléculaire des fondus de polymères linéaires et cycliques, confinés entre deux parois solides impénétrables. Nous étudions les propriétés thermodynamiques telles que la pression  $P_N$  et la tension de surface  $\gamma_N$  à l'interface en fonction de la taille des chaînes de polymères  $N$ . Pour les chaînes linéaires, nous trouvons que la pression et la tension de surface sont inversement proportionnelles à  $N$ , indépendamment de la nature répulsive ou attractive de la surface.

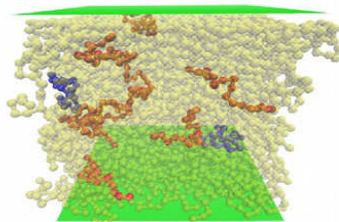
Par contre, pour le cas des polymères cycliques, ces propriétés sont constantes quelle que soit la taille des chaînes. Nous examinons aussi les propriétés structurales et l'effet de la topologie des polymères sur le comportement des chaînes à l'interface.

**Mots clés:** fondus de polymères, chaînes linéaires, polymères cycliques, tension de surface, DM.

Nous nous intéressons au comportement des fondus de polymères en confinement pour élucider une question notable; comment varient la pression et la tension de surface avec la longueur des chaînes  $N$ ? Et qui est responsable de cette dépendance? [1]. Le modèle sphères-ressorts [2] est utilisé pour modéliser les polymères flexibles. Les conditions aux limites périodiques sont appliquées suivant X-Y.

En direction de Z, nous ajoutons deux surfaces solides parallèles (voir figure ci-dessous). La simulation DM est effectuée sous LAMMPS [3] en utilisant le thermostat de Langevin. La formule d'Irving-Kirkwood est utilisée pour calculer les composantes (normale et tangentielle) de la pression ainsi que la tension de surface [4,5]. Pour les polymères linéaires, nous trouvons que  $P_N - P_\infty \propto N^{-1}$ ,  $\gamma_N - \gamma_\infty \propto N^{-1}$  ( $P_\infty$ ,  $\gamma_\infty$  sont l'extrapolation de  $P_N$ ,  $\gamma_N$  respectivement quand  $N \rightarrow \infty$ ).  $P_N$  et  $\gamma_N$  sont constantes pour leurs homologues cycliques.

Nous interprétons ces observations par l'absence (cas des anneaux) ou la croissance des monomères libres en fin de chaînes dont la concentration varie en  $2/N$  dans le cas des polymères linéaires. A l'interface, les polymères cycliques sont plus compacts. Cependant, à l'échelle des monomères, les deux topologies présentent un comportement identique. Nous étudions aussi, la similitude [6] entre le comportement d'une chaîne gaussienne au Point Critique d'Adsorption et celui d'une chaîne dans un fondu. Une nouvelle analogie est établie pour le cas des polymères cycliques.

**Références**

- [1] Ch. Meddah, A. Milchev, S. A. Sabeur, A. M. Skvortsov, J. Chem. Phys., 145 (2016) pp 194902.
- [2] K. Kremer, G. S. Grest, J. Chem. Phys. 92 (1990) pp 5057.
- [3] J. Plimpton, J. Comput. Phys. 117 (1995) pp 1, <http://lammmps.sandia.gov>.
- [4] J. H. Irving, J. G. Kirkwood, J. Chem. Phys. 18, (1950) pp 817.
- [5] J. Sarabadani, A. Milchev, T. A. Vilgis, J. Chem. Phys. 141 (2014) pp 044907.
- [6] A. M. Skvortsov, F. A. M. Leermakers, G. J. Fleer, J. Chem. Phys. 139 (2013) pp 054907.

## CO10 - JCTC12

## ENANTIOSELECTIVE REDUCTION OF PROCHIRAL KETONES PROMOTED BY AMINO AMIDE RUTHENIUM COMPLEXES: A DFT STUDY

Yazid Meftah<sup>a\*</sup>, Samira Maou<sup>a</sup>, Françoise Delbecq<sup>b</sup>, Carine Michel<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de chimie appliquée, Université mohamed khider, Biskra, Algeria<sup>b</sup> Laboratoire de chimie, École normale supérieure, Lyon, France\* [y.meftah@univ-biskra.dz](mailto:y.meftah@univ-biskra.dz)**Abstract**

Ruthenium chemistry is versatile and widespread, with superior performance for reaction types such as asymmetric transfer hydrogenation. In order to gain insight into the mechanistic details of such system, density functional theory (DFT) studies are often employed. But how accurate is DFT for modeling ruthenium-mediated transformations in solution?

**Keywords:** DFT, Dispersion, Ruthenium, ATH, enantioselectivity.

**Introduction**

The asymmetric hydrogenation of ketones by hydrogen transfer (ATH) is one of the largest applications of catalysis in synthetic and pharmaceutical industry [1]. In previous works, we have shown that DFT calculations are a very useful tool for explaining mechanisms [2].

**Investigation of the effect of the functional in the determination of the geometrical parameters and of the enantioselectivity in ATH of acetophenone catalyzed by Ru(II) complexes:**

We have investigated the performance of several functionals in the prediction of the geometrical parameters of four diastereomeric half-sandwich Ru(II) cationic complexes containing amino amide ligands. Firstly, four functionals not including dispersion, namely PBE, BP86, B3LYP and TPSS were used. Secondly, to account for dispersion, two types of functionals were used. The first ones are constructed to account for dispersion, namely wB97X, wB97XD, M06L and M06. The second type of functionals includes dispersion by addition of the D3 version of Grimme's dispersion with Beck-Johnson Damping functions to the ones used previously [PBE-GD3BJ, TPSS-GD3BJ, BP86-GD3BJ, B3LYP-GD3BJ]. The [MP2] method and the double hybrid functionals [B2PLYP, B2PLYPD] were also used, finally The ATH of acetophenone catalyzed by Ru (proline-amide) hydride complexes is also computed against different functionals to understand the influence of the functional on the selectivity, Different solvent models (IEFPCM and SMD) were evaluated.

**Conclusion**

(PBE-GD3BJ/LANL3TZ, PCM) is the most accurate computational protocol identified here for computing geometrical parameters and enantiomeric excess of ruthenium-catalyzed reactions in solution, our results showed that important insights can be obtained with such a theoretical approach, particularly the origin of the reaction asymmetry. This can help experimentalists to design new catalysts that will ensure good enantioselectivity.

**Acknowledgments**

The authors are very thankful to the « Université de Lyon, CNRS, Ecole Normale Supérieure de Lyon, 46 Allée d'Italie, 69364 Lyon, Cedex 07, France and Pole modélisation numérique (PSMN) in Ecole Normale Supérieure de Lyon for offering the computing facilities.

**References**

- [1] Weiwei Zuo, Robert H Morris, *Nature Protocols*. (2015), 10, 241–257.  
[2] F. Delbecq, V. Guiral, P. Sautet, *Eur. J. Org. Chem.* (2003), 2092-2097.



## CO11 - JCTC12

## SUBSTITUENT EFFECT ON THE INTRAMOLECULAR ARENE/ALLENE DIELS-ALDER REACTION: sEDA AND pEDA DESCRIPTORS

Lynda Merzoud<sup>a, b\*</sup>, Meriem Almi,<sup>a</sup> Amar Saal<sup>a, b</sup>, Ramdane Moussaoui<sup>c</sup>, Ourida Ouamerali<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratory of Computational and Theoretical Chemistry and Photonics, USTHB University of Algiers, 16111, Algeria.<sup>b</sup> LCPM, UMMTO University of Tizi-Ouzou, 15000, Algeria; <sup>c</sup> LCAGC, UMMTO.\* [merzoud-lynda@live.fr](mailto:merzoud-lynda@live.fr)**Abstract**

The density functional theory has been applied to the study of the intramolecular arene/allene Diels-Alder reaction (IMDA). The synchronous concerted mechanisms were studied at the M062X/aug-cc-pvDZ//B3LYP/6-31G(d,p) level. The effect of chemical substitutions on the IMDA reaction has studied. Thus, some substituents and positions was chosen to express divers electron donor-acceptor properties and two descriptors, sEDA and pEDA, have been used to reveal the  $\sigma$  and  $\pi$  electron shift between the substituent and core-molecule.

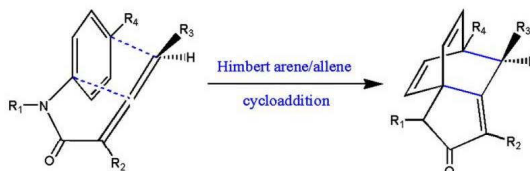
**Keywords** : IMDA; Cycloaddition; sEDA; pEDA; Synchronicity; DFT calculations

**Introduction**

Thirty years ago, Himbert and Henn reported the intramolecular arene/allene. [1] Starting from allenecarboxanilide, this reaction provides an efficient and straightforward way to reach complex bridged polycyclic architectures (*c.f. schema1*).

The aim of this study is to evaluate the role of the substitution in different positions on the IMDA reaction. On the basis of M06-2X/aug-cc-pvDZ//B3LYP/6-31G(d,p) calculations, the relative stability and reactivity were discussed. The variation of activation energy as function of sEDA and pEDA has been studied in order to check if it does exist a correlation between substituents parameters and kinetic of reaction. To our knowledge, this present work would be the first systematic study of substituent effects on the IMDA reaction based on sEDA and pEDA descriptors.

**Schema 1.** Himbert arene/allene Cycloaddition

**Results and Discussion**

Thus, in order to promote the Himbert reaction, it is more suitable to choose substituents with a high  $\sigma$  and/or  $\pi$  donor or acceptor character in R1. For the substitution in R2, the results exhibit almost a linear correlation with the substituent  $\sigma$  effect descriptor. Strong  $\sigma$ -electron acceptors (sEDA  $\square$  0) at R2 lead to a diminution of activation energy of the reaction. Because of the rupture of conjugation between the double bond in the allene moiety.

The IMDA reaction can be tuned by introducing either electron-withdrawing or electron-donating substituents at proper positions of the diene and/or the dienophile. The obtained results show that these IMDA reactions are normal electron demand. The substitution in R4 is favored by an electron-donating. It undergoes regionspecific normal demand.

**Conclusion**

The Himbert IMDA reaction is a normal electron demand. The presence of substituent on R1 and R2 positions influence the kinetic of this reaction. Moreover, the strongest is the character (donor or acceptor!) of the substituent the fast is the reaction.

**References**

[1] Himbert, G.; Henn, L. *Angew. Chem., Int. Ed.* 21 (1982) 620-620.

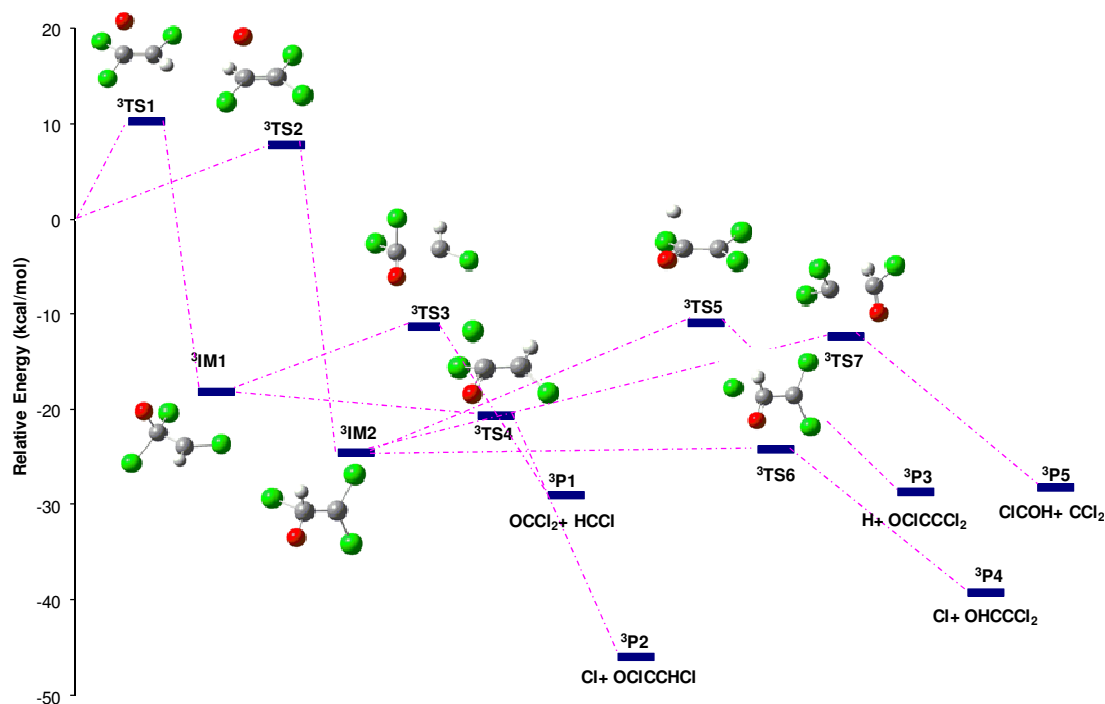


## CO12 - JCTC12

THEORETICAL STUDY OF ATMOSPHERIC REACTION OF OXYGEN ATOM O(<sup>3</sup>P) WITH TRICHLOROETHYLENE. O-ADDITION AND H-ABSTRACTIONBoulanour Messaoudi<sup>a,b\*</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Thermodynamique Appliquée et Modélisation Moléculaire, Université de Tlemcen, Tlemcen, Algérie<sup>b</sup> Ecole Supérieure en Sciences Appliquées, Tlemcen, Algérie\* [messaoudiboulanour@gmail.com](mailto:messaoudiboulanour@gmail.com), [messaoudiboulanour@yahoo.ca](mailto:messaoudiboulanour@yahoo.ca)**Abstract**

The reaction of trichloroethylene with triplet oxygen atom has been probed at MP2/6-311G\*\* and CBS-QB3 levels of theory. Both O-addition and H-abstraction were studied and the most important stationary points had been located (**Figure 1**). The O(<sup>3</sup>P) can be added to either carbon atoms of the trichloroethylene double bond with a slight preference to the less substituted end (C1). Our results show that the obtained products are: (OCICCl<sub>2</sub> + H) P1, (OCICCHCl + Cl) P2, (OCICCl<sub>2</sub> + H) P3, (ClCOH + CCl<sub>2</sub>) P4, (HOCCl<sub>2</sub> + Cl) P5, where (OCICCHCl + Cl) P2, (ClCOH + CCl<sub>2</sub>) P4 are found to be the most favoured ones. The calculated findings at the CBS-QB3 level of theory are in very good agreement with experimental results and the O-addition is by far the most important reaction with respect to H-addition.

**Keywords :** Trichloroethylene, O(<sup>3</sup>P), O-addition, H-abstraction, CBS methods.



**Fig. 1 :** O-addition profile of O(<sup>3</sup>P) to trichloroethylene at CBS-QB3 level of theory.

**References**

- [1] R. P. Wayne, *Chemistry of Atmospheres*, 2nd ed., Oxford Science Publication Inc., Oxford, 1991.
- [2] R. J. Cvetanovic, D. L. Singleton, *Rev. Chem. Int.*, 5 (1984) pp 183-226.
- [3] T. Oguchi, A. Ishizaki, Y. Kakuta, H. Matsui, *J. Phys. Chem. A*, 108 (2004) pp 1409-1416.

## CO13 - JCTC12

## MAGNETIC PROPERTIES OF DIOXO-BRIDGED DIURANIUM COMPLEXES WITH DIAMOND-CORE STRUCTURAL MOTIFS : A RELATIVISTIC DFT STUDY

Billel Teyar<sup>1</sup>, Lotfi Belkhiri<sup>2</sup>, Abdou Boucekkine<sup>3</sup><sup>1</sup> Université Ziane Achour de Djelfa, 17000 Djelfa, Algeria<sup>2</sup> URCHEMS, Département de Chimie, Université des Frères Mentouri, 25017 Constantine, Algeria<sup>3</sup> Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS-Université de Rennes 1, Campus de Beaulieu, F-35042 Cedex Rennes, France[billel\\_teyar@yahoo.fr](mailto:billel_teyar@yahoo.fr)**Abstract**

Electronic structures and magnetic properties of the binuclear bis( $\mu$ -oxo)  $U^{IV}/U^{IV}$   $K_2[\{((^{nP,Me}ArO)_3tacn)U^{IV}\}_2(\mu-O)_2]$  and  $U^V/U^V$   $[\{((^{nP,Me}ArO)_3tacn)U^V\}_2(\mu-O)_2]$  ( $tacn$  = triazacyclononane,  $nP$  = neopentyl) complexes, exhibiting  $[U(\mu-O)_2U]$  diamond-core structural motifs, have been investigated computationally using scalar relativistic Density Functional Theory (DFT) combined with the Broken Symmetry (BS) approach for their magnetic properties. Using the B3LYP hybrid functional, the BS ground state of the pentavalent  $[U^V(\mu-O)_2U^V] 5f^1-5f^1$  complex has been found of lower energy than the high spin (HS) triplet state, thus confirming the antiferromagnetic character in agreement with experimental magnetic susceptibility measurements. The nonmagnetic character observed for the tetravalent  $K_2[U^{IV}(\mu-O)_2U^{IV}] 5f^2-5f^2$  species is also predicted by our DFT calculations, which led practically to the same energy for the HS and BS states.

**Keywords** : DFT, B3LYP hybrid, Broken Symmetry (BS).**Introduction**

Since the first report of the landmark magnetic diuranium(V) para-imido  $[(MeC_5H_4)_3U]_2(\mu-1,4-N_2C_6H_4)$  complex by Rosen et al.,<sup>1</sup> which exhibits a significant antiferromagnetic  $5f^1-5f^1$  coupling, the chemistry of this new class of fascinating bimetallic systems became during the past decade an active area of research. A Density Functional Theory (DFT) studies are useful to estimate the J constant from high spin (HS) and broken symmetry (BS) state energies. Despite its drawbacks, the BS approach, initially introduced by Noodleman and Davidson,<sup>2</sup> has been successfully employed in combination with the hybrid B3LYP functional. We are particularly interested in the bis( $\mu$ -oxo) isovalent diuranium  $U^V/U^V$   $[\{((^{nP,Me}ArO)_3tacn)U^V\}_2(\mu-O)_2]$  and  $U^{IV}/U^{IV}$   $K_2[\{((^{nP,Me}ArO)_3tacn)U^{IV}\}_2(\mu-O)_2]$  complexes,<sup>3</sup> for which no systematic theoretical study has been reported, yet. For this particular study, we apply relativistic ZORA/DFT computations that we found successful in our preceding works. Our theoretical study is also likely to explain the redox properties of these species.

**Results and Discussion**

The magnetic characters of the  $[U^V(\mu-O)_2U^V]$  and  $K_2[U^{IV}(\mu-O)_2U^{IV}]$  complexes are investigated. We remind that the former exhibits experimentally an antiferromagnetic exchange coupling within the  $U^V-(\mu-O)_2-U^V$  core. On the contrary, for  $K_2[U^{IV}(\mu-O)_2U^{IV}]$ , no magnetic exchange coupling is reported, on the basis of its magnetic susceptibility data. As aforementioned, we make use of the Yamaguchi formula<sup>4</sup> within the BS approach to estimate the J coupling constant. The computed total bonding energy TBE (eV),  $\Delta E = E_{BS} - E_{HS}$ , energy differences, the mean values  $\langle S^2 \rangle$  of the squared spin operator, as well as the computed exchange coupling constants J are given in Table 1. In this table, the computed values have been obtained by means of the B3LYP hybrid functional.

**Table 1.** ZORA/B3LYP/TZP Computed TBE (eV),  $\Delta E$  (eV/cm<sup>-1</sup>) Energy Differences,  $\langle S^2 \rangle$  Values, and Exchange Coupling  $J$ (cm<sup>-1</sup>) Constant for the U<sup>V</sup>( $\mu$ -O)<sub>2</sub>U<sup>V</sup> and K<sub>2</sub>[U<sup>IV</sup>( $\mu$ -O)<sub>2</sub>U<sup>IV</sup>] Optimized Complexes

B3LYP	TBE <sub>HS</sub> (eV)	TBE <sub>BS</sub> (eV)	$\Delta E$ (eV/cm <sup>-1</sup> )	$\langle S^2 \rangle_{HS}$	$\langle S^2 \rangle_{BS}$	$J$ (cm <sup>-1</sup> )
U <sup>V</sup> ( $\mu$ -O) <sub>2</sub> U <sup>V</sup> 5f <sup>1</sup> -5f <sup>1</sup>	-1279.8514	-1279.8537	-0.0023/-18.55	2.012	1.020	-18.55
K <sub>2</sub> [U <sup>IV</sup> ( $\mu$ -O) <sub>2</sub> U <sup>IV</sup> ] 5f <sup>2</sup> -5f <sup>2</sup>	-1284.9573	-1284.9570	0.0003/2.42	6.015	2.013	0.60

### Conclusion

The magnetic exchange coupling interactions in dioxo-bridged U<sup>V</sup>( $\mu$ -O)<sub>2</sub>U<sup>V</sup> and K<sub>2</sub>[U<sup>IV</sup>( $\mu$ -O)<sub>2</sub>U<sup>IV</sup>] binuclear complexes with diamond-core shape, exhibiting the 5f<sup>1</sup>-5f<sup>1</sup> and 5f<sup>2</sup>-5f<sup>2</sup> electron configurations, respectively, have been investigated theoretically for the first time using relativistic ZORA/DFT computations combined with the broken symmetry (BS) approach. ZORA/B3LYP computations predict an antiferromagnetic exchange coupling for the pentavalent UV( $\mu$ -O)<sub>2</sub>UV system, in agreement with experimental findings; however, it is worth noting that our method of computation leads to a single mean coupling constant, that is,  $J = -18$  cm<sup>-1</sup>, whereas experimentally, two constants could be derived from magnetic susceptibility measurements:  $J(\text{parallel}) = -66$  cm<sup>-1</sup> and  $J(\text{perpendicular}) = -10$  cm<sup>-1</sup>.

### References

- [1] Rosen, R. K.; Andersen, R. A.; Edelstein, N. M. *J. Am. Chem. Soc.* 1990, 112, 4588–4590.
- [2] Noodleman, L. J.; Davidson, E. R. *Chem. Phys.* 1986, 109, 131–143. (b) Noodleman, L. J.; Peng, C. Y.; Case, D. A.; Mouesca, J. M. *Coord. Chem. Rev.* 1995, 144, 199–244.
- [3] Schmidt, A.-C.; Heinemann, F. W.; Lukens, W. W., Jr.; Meyer, K. J. *Am. Chem. Soc.* 2014, 136, 11980–11993.
- [4] Onishi, T.; Yamaki, D.; Yamaguchi, K.; Takano, Y. *J. Chem. Phys.* 2003, 118, 9747–9761. (c) Shoji, M.; Koizumi, K.; Kitagawa, Y.; Kawakami, T.; Yamanaka, S.; Okumura, M.; Yamaguchi, K. *Chem. Phys. Lett.* 2006, 432, 343–347.



## COMMUNICATIONS POSTERS



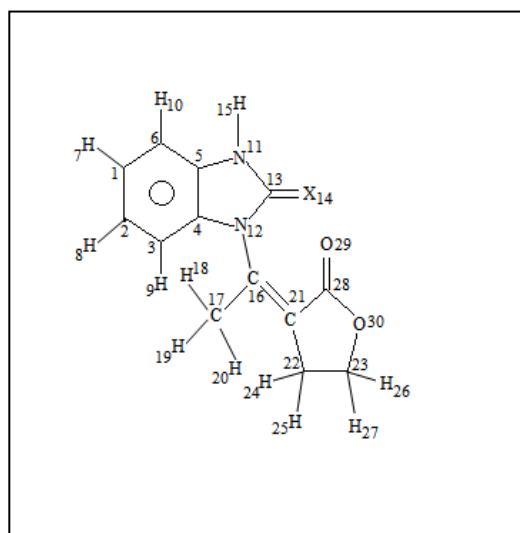


## P1 - JCTC12

## ETUDE THEORIQUE DE LA REACTIVITE DE NOUVELLES MOLECULES HETEROCYCLIQUES DERIVANT DES BENZIMIDAZOLONES

Hasnia Abdeldjebar<sup>a\*</sup>, Yamina Belmiloud<sup>a</sup>, Meziane Brahimi<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physico-Chimie Théorique et de Chimie Informatique  
Faculté de chimie. USTHB.BP 32 El alia 16111. Alger. Algérie.\* [hasna-ke@hotmail.fr](mailto:hasna-ke@hotmail.fr)**Résumé**

Les benzimidazolones sont des composés hétérocycliques diazotés sur lesquels est fixé un groupement carbonyle entre deux atomes d'azote. Cette particularité de structure lui confère une place considérable dans différents domaines. En effet, ce noyau constitue le principe actif de nombreux médicaments. Dans le cadre de ce travail, nous avons effectué une étude théorique de la réactivité de nouvelles molécules benzimidazolones qui ont été synthétisées par l'équipe de M. AMARI et col [1]. Cette étude est donc un complément théorique au travail expérimental; nous utilisons la théorie de la fonctionnelle densité (DFT) avec la fonctionnelle B3LYP/6-311G (d,p). pour calculer les énergies de dispersion à l'aide du logiciel Gaussian09. Les résultats théoriques obtenus sont en bon accord avec ceux obtenus expérimentalement, et ont permis de comprendre pourquoi certaines conformations sont privilégiées.

**Mots clés:** Hétérocycles, benzimidazolones, DFT.

**Fig 1.** La structure moléculaire du benzimidazolone (X14=O) et benzimidazole-2-thione (X14=S).

**Références**

[1] O. Bouaziz, F. Abboub, N. Khier-Bayou, M. Fodili, P. Hoffmann, M. AMARI, CRC. France. 2012, 15, 774-778.

## P2 - JCTC12

## PREDICTION OF THE RP-HPLC RETENTION OF O-METHOXYPHENOL BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY MODEL

Azeddine Addoun<sup>a\*</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Chromatographie, USTHB, Alger, Algérie\* [azeddine.addoun@gmail.com](mailto:azeddine.addoun@gmail.com)**Abstract**

In this work, prediction of the solvation behavior of an ionic compound by the DFT model is reported. Quantum parameters such as polarity ( $\mu$ ) and energy gap ( $\Delta E_{\text{gap}} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$ ) were determined. The different chemical structures of the analyte were investigated, neutral, ionic and hydrated form. Overall, quantum parameters of the neutral and hydrated compound predicted a weak solvation from the polar mobile phase. Experimental work ascertained this tendency by showing a better chromatographic retention and resolution when increasing the water ratio of the solvent. Concomitantly, decreasing the pH revealed the same outcomes. Hence, DFT model could be a powerful tool to consider before development of chromatographic methods.

**Keywords:** DFT, polarity, rp- HPLC**Introduction**

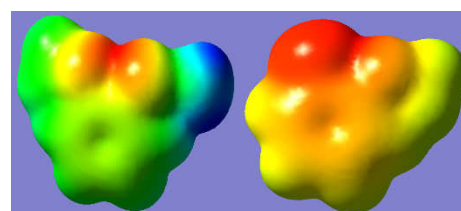
Prediction of the solvation behavior of the analyte afore the chromatographic analysis is of paramount importance for method development in quality control laboratories [1]. Indeed, quantum quantification of the complex distribution of the solute between the polar mobile (MP) and the appolar stationary (SP) phases is assumed to shorten the trial and errors step by reducing time and solvent consumption. The *o*-methoxyphenol (OMPh) is an ionized organic specie,  $pK_a = 9.95$ , which is slightly soluble in water. Using the DFT model, structure descriptors were determined to predict its solvation behavior within the chromatographic column. The interaction solute-water is the main focus as its determination is expected to reveal the strength of the hydrophilic interactions, *i.e.*, with the MP.

**Chemical structure and solvation descriptors**

Depending on the pH, OMPh could exist either in neutral or in ionic form. Another form is expected to predominate which is the hydrated shape *via* the hydrogen bond. By comparison, the ionic molecule showed the highest polarity, 7.466 D, with the lowest value of  $\Delta E_{\text{gap}}$ , 3.141 eV. The neutral and hydrated forms revealed closer values, 2.617 and 3.417 D for  $\mu$  and their  $\Delta E_{\text{gap}}$  were 5.878 and 4.943 eV respectively. Fig. 1 shows the charge distribution (elpot) of the hydrated and ionic forms, the red-yellow region is the denser in electrons and inversely for the green-blue region. Decreasing the pH favors the neutral and hydrated form predominance; hence, the hydrophilic interactions with the MP will be weaker. The experimental work showed that lowering the pH to 3, and increasing the water ratio of the MP increased the retention time, from 2.99 to 3.45 min.

**Conclusion**

The quantum parameters of the different analyte structures allowed to determine the solvation behavior of the OMPh within a polar solvent, water/MeOH, by predicting a weak solubility from the neutral form which favors the chromatographic retention time. Experimental tests have shown the good accordance of the prediction model. Hence, DFT method is a powerful tool to consider in chromatographic development field.



activity against pyrazoles.

**Reference**[1] J. E. Knox, H. P. Hratchian, N. Trease et al, *Chromatographia*, volume (59) pp 329-334.



## P3 - JCTC12

## DENSITY FUNCTIONAL THEORY MODEL FOR THE PREDICTION OF THE ADSORPTION CENTERS OF ORGANIC CORROSION INHIBITORS WITHIN ACIDIC MEDIUM

Azeddine Addoun<sup>\*a</sup>, Ahmed Haddad<sup>a</sup><sup>a</sup> Division de Corrosion, Protection et Durabilité des Matériaux, CRTI, Cheraga, Alger, Algérie<sup>\*</sup> [a.addoun@crti.dz](mailto:a.addoun@crti.dz); [azeddine.addoun@gmail.com](mailto:azeddine.addoun@gmail.com)**Abstract**

In this work, prediction of the potential adsorption centers of ascorbic acid (AA) and paracetamol (Par) compounds was carried out using DFT method at B3LYP/6-31G basis sets.  $E_{\text{HOMO}}$ ,  $E_{\text{LUMO}}$ ,  $\Delta E$ , total energy (TE) and polarity ( $\mu$ ) were taken into account to correlate their values to the inhibition efficiency of each substance. Comparatively, higher values of  $E_{\text{HOMO}}$ ,  $\mu$  and TE were noticed for AA which predict more reactivity; thus, a better adsorption property. Electrochemical tests were conducted for mild steel in 1 M HCl solution. The corrosion tests revealed a better inhibition efficiency for AA (up to 73.10%) against Par (up to 63.02%). Hence, application of the DFT model showed a very good agreement with the experimental values.

**Keywords:** Density functional theory, adsorption centers, corrosion inhibition

**Introduction**

Computational chemistry in corrosion inhibition field has gained great interest during the last two decades [1]. The determined quantum parameters were:  $E_{\text{HOMO}}$ ,  $E_{\text{LUMO}}$ ,  $\Delta E$  (eV), TE and  $\mu$  (D).  $E_{\text{HOMO}}$  corresponds to the electron-donor site; while the  $E_{\text{LUMO}}$  represents the electron-acceptor site. It is agreed that higher  $E_{\text{HOMO}}$  and lower energy gap ( $\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$ ) favor the adsorption of molecule onto the material surface which enhances the corrosion inhibition efficiency. Electrochemical tests followed the computational study; impedance spectroscopy was conducted to test the corrosion inhibition of each substance in 1M HCl.

**Quantum chemical parameters and corrosion tests**

The optimized structure of AA is displayed on Fig. 1. Overall, gap energy are lower and very close between both compounds. However, from the  $\mu$ , TE and  $E_{\text{HOMO}}$  quantum parameters; differences are more notable (6.37, -684.3 and -6.737 for AA vs. 3.85, -515.3 and -6.283 for Par). Several studies correlate a better corrosion inhibition property when these parameters are higher. Hence, it could be suggested that AA is theoretically a better corrosion inhibitor. The electrochemical tests showed the inhibition capability of both chemicals. Different concentration levels were tried (0.5 to 3 mM). However, ascorbic acid seemed to be a better inhibitor by showing a higher inhibition efficiency at 3 mM 73.13 % against 63.02 % for paracetamol at 1.5 mM.

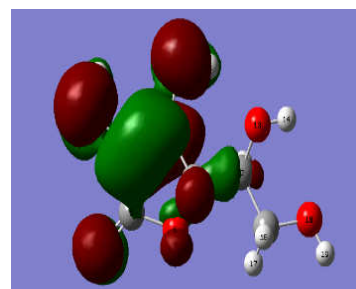


Fig. 1: HOMO distribution of AA

**Conclusion**

To conclude, quantum parameters were determined by means of DFT at the basis set B3LYP/6-31G. AA is predicted to be a better inhibitor due to the higher values of its quantum parameters. Electrochemical tests showed a better inhibition efficiency from the AA compound. Therefore, DFT method revealed a very good prediction ability for the prediction of the potential corrosion inhibitors.

**References**

[1] Gökhan Gece, Corrosion Science, 50 (2008) pp 2981-2992.

## P4 - JCTC12

## SYNTHÈSE, CARACTÉRISATION ET OPTIMISATION STRUCTURELLE À L'AIDE DE LA DFT DE CERTAINES BASES DE SCHIFF BENZOAZOLINONIQUE DÉRIVÉES DE SALICYLALDÉHYDE

Y. Adjeroud<sup>a\*</sup>, H. Chabane<sup>a</sup>, N. Chettibi<sup>a</sup>, H. Bentoumi<sup>a</sup> et M. Liacha<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Synthèse et Biocatalyse Organique (LSBO), Faculté des Sciences, Département de chimie, Université Badji Mokhtar-Annaba, B.P. 12 El-Hadjar, 23000 Annaba, Algérie\* [yasminachimie@yahoo.com](mailto:yasminachimie@yahoo.com)**Résumé**

On a synthétisé quelques nouveaux ligands de base de Schiff, qu'ont été synthétisés par condensation de la 6-amino-2 (3H)-benzoxazolone avec les salicylaldehydes. Les structures des composés nouvellement synthétisés ont été caractérisées par FT-IR, RMN-<sup>1</sup>H et RMN <sup>13</sup>C. Toutes les molécules de base de Schiff benzoxazolinoniques ont été modélisées et optimisées en utilisant les calculs de la théorie de la densité fonctionnelle (DFT). Ces calculs ont fourni des informations importantes sur la stabilité relative de diverses formes tautomères de ces composés.

**Mots clés :** base de Schiff, 2(3H)-Benzoxazolone, salicylaldehyde, DFT.

**Introduction**

La recherche et la synthèse de nouveaux composés chimiques et biochimiques sont aujourd'hui souvent associées à une étude par modélisation moléculaire. Auparavant, n'étaient pratiqués que des tests biologiques systématiques sur un grand nombre de molécules et, souvent, seule la chance permettait de mettre en évidence une piste intéressante [1]. Des nombreux efforts de recherche sur le profil antibactérien des bases de Schiff construites autour du modèle de salicylaldehyde, nous avons pensé intéressant d'associer ces deux modèles pharmacophoriques, 2 (3H)-benzoxazolone [2,3] et salicylaldehyde [4] dans la même structure.

**Résultats et discussions**

les optimisations ont été effectuées avec la méthode de DFT implémentés dans le programme Gaussian 09, la B3LYP associé à la base 6-31G (d,p). Dans notre travail on s'est intéressé au tautomérisme céto-énolique ou bases de schiff benzoxazolinonique sont impliquées dans le transfert de proton. Les bases de schiff benzoxazolinoliques a la possibilité de se trouver sous la forme cétonique et sous forme énolique. Une série de travaux expérimentaux utilisant des techniques spectroscopiques ont permis de distinguer les conformations de la molécule, qui se différencient dans l'emplacement des atomes d'hydrogène les plus labiles. Toutes les formes tautomères énoliques des bases de schiff benzoxazolinoliques, selon la méthode de DFT sont les plus stables que les formes cétoniques correspondantes.



Fig. 1: 6-(5-chloro-2-Hydroxybenzylideneamino)benzo[d]oxazol-2(3H)-one

**Conclusion**

La présente étude fournit une analyse de plusieurs propriétés moléculaires des bases de schiff benzoxazolinoniques par la méthode de DFT au niveau de B3LYP avec la base 6-31G (d,p). Les résultats des calculs montrent que la tautomérisation favorise la forme tautomère énolique, résultat révélant que la forme énolique est énergétiquement favorable.

**Références**

- [1] A. Hamdouch.M.-H. Depret, (2008).
- [2] A.R. Nadji-Boukrouche, O. Khoumeri, T. Terme, M. Liacha, P. Vanelle, Arkivoc x (2010) 358-370.
- [3] M. Feroci, I. Chiarotto, M. Orsini, G. Sotgiu, A. Inesi, Tetrahedron, 65 (2009) 3704-3710.
- [4] R. Herzfeld, P. Nagy, Curr. Org. Chem., 5 (2001) 373-94.

## P5 - JCTC12

## DETERMINATION STRUCTURALE ET ETUDE THEORIQUE DES COMPOSES HYBRIDES RICHE EN LIAISON HYDROGENE.

Fatima Allouche<sup>a\*</sup>, Tahar Benlecheb<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire des Structure, Propriétés et Interactions Inter Atomique (LASPI<sup>2</sup>A), Université de Khenchela, Algerie.\* [allouche\\_f@yahoo.fr](mailto:allouche_f@yahoo.fr)

## Résumé

L'objet de ce travail c'est d'étudier des nouveaux composés hybrides, riches en liaison hydrogène [1]. Son importance est confirmée par le nombre croissant d'études et de théories pour expliquer et lever toute ambiguïté sur cette interaction, ces liaisons assurent la cohésion dans les structures cristallines de ces composés [2, 3]. Les matériaux hybrides "organique inorganique" sont l'objet d'un intérêt immense [4], permettant d'allier à la fois certaines propriétés d'un matériau inorganique, et certaines propriétés d'un polymère. Cette symbiose entre deux mondes de la chimie considérés comme antagonistes peut aussi amener à des propriétés complètement nouvelles, et ouvre un vaste champ d'investigations pour le chimiste. Nous allons utiliser les potentialités qui offrent le logiciel ADF (Amsterdam Density Functional) pour étudier ce type de composés sous l'état solide et comprendre leur agencement.

**Mots clés:** Composés hybrides ; Diffraction des RX ; liaisons hydrogène ; ADF...

Dans ce travail, on s'est intéressés à l'étude, par diffraction des RX, des composés hybrides formés de matrice organique cationiques et d'anions minéraux. La combinaison de la matrice organique (acide anthranilique) et des anions minéraux nous a permis d'obtenir des structures originales présentant des liaisons hydrogènes fortes, moyennes et faibles. Plusieurs cristaux ont été déjà isolés dans ce système. Les deux nouveaux composés originaux à base de l'acide anthranilique et d'anions minéraux [5] ont été formés par l'acide anthranilique et les acides phosphorique et phosphoreux respectivement.

Le 1er composé étudié est le o-Carboxyanilinium Dihydrogenphosphate (o-CADP) (Fig 1). La jonction entre l'anion minéral et le cation organique est assurée par des liaisons hydrogène de type N-H...O et O-H...O. La structure est formée par une alternance de couches anioniques et de couche cationiques.

Le 2ème composé synthétisé est le o-Carboxyanilinium Dihydrogenphosphite (o-CADPx) (Fig 2). La structure de ce composé est formée par une alternance d'anions et de cations, donnant naissance ainsi à des couches anioniques parallèles.

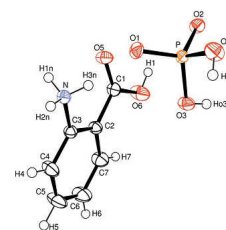
L'étude structurale et l'interprétation détaillée des liaisons hydrogène a mis en évidence l'existence de trois types de liaisons hydrogène assurant la cohésion et la stabilité de la structure. De fortes interactions par pont hydrogène O-H...O sont observées entre les groupements  $H_2PO_3^-$  et forment ainsi des dimères de formule  $[(H_4P_2O_6)]^{2-}$  et deux liaisons hydrogène faibles de type C-H...O, entre les cations et entre les cations et les anions.

Ces composés sont stabilisés par un réseau tridimensionnel des liaisons hydrogènes. Trois types d'interactions (anion-anion cation-cation et cation-anion) assurent la cohésion et la stabilité de la structure, l'utilisation de la Théorie de Bernstein a permis de comprendre l'agencement des interactions pour ce type de composés via les liaisons hydrogène.

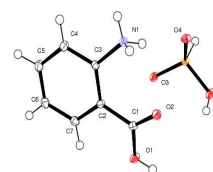
Et pour mieux comprendre l'influence de la liaison hydrogène dans la cohésion structurale une étude théorique va être élaboré via le logiciel ADF (Amsterdam Density Functional) qui offre un support important pour notre étude théorique.

## Références

- [1] Jeffrey, G. A. and Saenger, W. Hydrogen bonding in biological structures. Berlin, New York, Heidelberg: Springer-Verlag (1991).  
 [2] Benali-Cherif, N., Allouche, F., Direm, A., Soudani, K. Acta Cryst. E65, (2009) o664-o665,.



**Fig1 :** L'unité asymétrique du  $COOH-C_6H_4-NH_3^+ \cdot H_2PO_4^-$



**Fig 2 :** L'unité asymétrique  $COOH-C_6H_4-NH_3^+ \cdot H_2PO_3^-$

- [3] Benali-Cherif, N., Allouche, F., Direm, A., Boukli-H-Benmenni, L., Soudani, K. Acta Cryst. E63, (2007) o2054-o2056.
- [4] Mazeaud, A., Dromzee, Y. & Thouvenot, R, Inorg. Chem , 39, (2000) 4735-4740.
- [5] (a) Benali-Cherif, N., Allouche, F., Direm, A., Boukli-H-Benmenni, L., Soudani, K. Acta Cryst. E63, (2007) o2054-o2056.(b) Benali-Cherif, N., Allouche, F., Direm, A., Soudani, K. Acta Cryst. E65, (2009) o664-o665

## P6 - JCTC12

### ETUDE DE L'EFFET JAHN-TELLER MULTIMODE DANS LES HETEROPOLYANIONS DE TYPE ANDERSON

Meriem Almi,<sup>a</sup> Lynda Merzoud,<sup>a,b</sup> Amar Saal,<sup>a,b</sup> Ourida Ouamerali<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Chimie Théorique Computationnelle et Photonique, USTHB, Alger.

<sup>b</sup> Département de Chimie, UMMTO.

[almeriem92@gmail.com](mailto:almeriem92@gmail.com)

#### Résumé

Les polyoxométallates (POMs) sont des clusters inorganiques, comportant des liaisons métal-oxygène, et formés de métaux de transition à hauts degrés d'oxydation tels que : molybdène (VI), tungstène (VI) et le vanadium (V). Leurs applications s'étendent à des domaines aussi variés que la catalyse, la science des matériaux, la photonique, l'électronique, l'optique et la médecine. Cette large gamme d'utilités s'explique par la diversité de compositions et de structures rencontrées dans cette famille d'oxo-clusters.

Les POM sont, en général, des structures très régulières présentant une symétrie élevée dans la plupart des cas ! Dans ce type de clusters, les ions métalliques se trouvant au centre possèdent souvent un niveau électronique fondamental dégénéré ce qui donne lieu à l'effet Jahn-Teller (JT). Le théorème de JT, en 1937, suggèrent que dans ce type de systèmes, il y aurait une distorsion de la structure géométrique suivie de la levée de dégénérescence des niveaux électroniques et de diminution de l'énergie du système. Ces distorsions influent fortement sur les propriétés électroniques et magnétiques de ce dernier. Dans cette étude, nous discuterons les distorsions géométriques que subira la structure du POM d'Anderson lorsque des ions métalliques connus par leurs forts effets JT y sont introduit au milieu.

**Mots Clefs** : Polyoxométallates, Effet Jahn-Teller, Anderson-HPA, Hétéropolyanion, DFT.

## P7 - JCTC12

## ETUDE PAR DES METHODES QSAR DE PHENOTHIAZINE ANTIPSICHIQUES

Zineb Almi<sup>a\*</sup>, Salah Belaidi<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de chimie moléculaire et environnement, Université Med Khider, Biskra, Algérie\* [almizineb@hotmail.com](mailto:almizineb@hotmail.com)**Résumé**

Nous avons réalisé une comparaison structurale et électronique de la phénothiazine avec différentes méthodes théoriques (MM, PM3, Ab initio, DFT), puis nous avons étudié les effets de la substitution de quelques groupements sur le noyau de base des phénothiazines ce qui joue un rôle important sur la stabilité conformationnelle, et sur la réactivité chimique. et nous avons définis le model QSAR qui une relation mathématique, reliant les descripteurs à l'activité biologique anti MDR.

**Mots clés:** phénothiazine, antipsychotique, LogP, polarisabilité, anti MDR, QSAR .

**Introduction**

Les études théoriques s'orientent actuellement vers la conception rationnelle "Rational design". L'objectif de ce travail est d'une recherche fondamentale et originale sur les phénothiazines [1] antipsychotiques, lorsque nous avons réalisé une comparaison structurale et électronique. Les méthodes QSAR permettent de maitre en place une relation mathématique, reliant des propriétés moléculaires appelées descripteurs, à un effet expérimental cette relation est appelée un model QSAR.

**Etude des phénothiazine antipsychotiques**

Dans cette comparaison nous avons utilisé différentes méthodes de calcul (MM, PM3, Ab initio, DFT) et on a introduit des substituant dans diverses positions [2] sur la phénothiazine. Enfin nous avons établi des corrélations (structure-activité) entre l'activité biologique et la structure chimique, et le calcul a été réalisé à l'aide de logiciels suivants : HyperChem (8.0) et Gaussian (09). Puis un model QSAR qui est déterminé grâce à des outils d'analyse comme les régressions multilinéaires (MLR). A l'aide de logiciel SPSS (MLR), nous avons établi un model QSAR [3] de l'activité anti MDR [4] pour une série de 18 phénothiazines.

Nous avons définis les motifs structuraux intervenant dans les propriétés antipsychotiques des nouveaux phénothiazines, En effet dans les composés méthylés, le composé (4), méthyl-3, phénothiazine présente le plus faible gap (HOMO-LUMO) donc il est le plus actif chimiquement. Dans les composés chlorés, le composé (4), chloro-3, phénothiazine présente le plus faible gap (HOMO-LUMO), donc il est le plus actif chimiquement. L'énergie d'hydratation en valeur absolue, la plus importante pour les phénothiazines est celle de la cyamémazine (5.28 kcal/mol), ce composé a pour conséquence une meilleure distribution dans les tissus. La méthoxypromazine présente le coefficient de partage (Log P) le plus bas (-1.55), c'est le produit le plus hydrophile. Il se traduit par une meilleure tolérance gastrique.

**Conclusion**

A partir des résultats d'étude de model QSAR nous avons définis la relation:  $\log(1/A) = -3.823 + 6.739E_{LUMO} - 0.383\log P + 0.121HE - 0.059MR + 0.007MV + 0.008MW$ . avec:  $n = 18; r = 0.971; s = 0.1; F = 29.900; Q = 9.71$ . Alors  $E_{LUMO}$ , Log P, HE, MR, MV, et MW, sont les fiables descripteurs pour la prévision de l'activité. Le coefficient négatif de log P, explique que la diminution de la lipophilicité des molécules provoque une augmentation de leur activité biologique.

**Références**

- [1] S. Belaidi, Z. Almi, and D. Bouzidi, *J. Comput. Theor. Nanosci.* 11(2014) pp 2481-2488 .
- [2] S. Belaidi, Z. Almi, and L. Segueni. *Rev. Theor. Sci.*, 3(2015) pp 264-272.
- [3] Sk. M. Alam, S. Samanta, A. K. Halder, S. Basu, and T. Jha, *European Journal of Medicinal Chemistry* 44(2009) pp 359-364 .
- [4] I. M. Tsakovska, *Bioorg. Med. Chem.* 11(2003) pp 2889-2899 .

## P8 - JCTC12

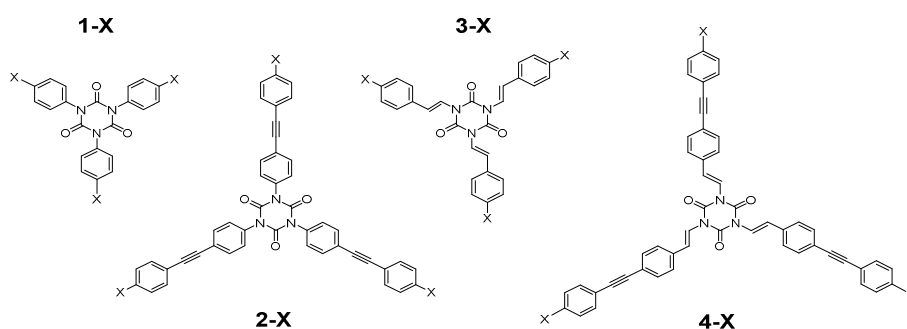
## ETUDE DFT ET TD-DFT DES PROPRIETES SPECTROSCOPIQUES ET D'OPTIQUE NON LINEAIRE DE COMPOSES A CŒUR ISOCYANURATE

Anissa Amar<sup>a,b</sup>, Abdou Boucekkine<sup>c</sup>, Frédéric Paul<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 Ez-zouar, Alger, Algérie<sup>b</sup> Faculté des Sciences, Département de Chimie, Université Mouloud Mammeri, Tizi Ouzou, Algérie<sup>c</sup> Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS-Université de Rennes 1, 35042 Rennes Cedex, France. \* email : [amaranissa2005@yahoo.fr](mailto:amaranissa2005@yahoo.fr)

## Résumé

Les composés isocyanurates symétriquement substitués par des groupements électro-donneurs s'inscrivent dans l'effort permanent de recherche de nouvelles molécules présentant le meilleur compromis entre une activité ONL quadratique élevée alliée à une bonne transparence dans le domaine du visible. L'objectif principal de cette étude théorique est d'analyser l'effet de la force du groupement donneur ainsi que l'effet de l'extension de la conjugaison des bras périphériques sur les propriétés spectroscopiques et d'ONL de ces molécules construites autour du noyau isocyanurate. Nous montrons que les résultats DFT et TD-DFT nous permettent de bien rationaliser les propriétés observées<sup>1,2</sup>.

**Mots clés :** Isocyanurate, DFT, TD-DFT, ONL, spectre d'absorption.



## Références:

- [1] G. Argouarch, R. Veillard, T. Roisnel, A. Amar, H. Meghezzi, A. Boucekkine, V. Hugues, O. Mongin, M. Blanchard-Desce, F. Paul, *Chem. Eur. J.* 2012, **18**, 11811-11827.  
 [2] G. Argouarch, R. Veillard, T. Roisnel, A. Amar, A. Boucekkine, A. Singh, I. Ledoux, F. Paul, *New J. Chem.* 2011, **35**, 2409-2411



## P9 - JCTC12

## THE ASM-EDA MODEL FOR RESOLVE THE AMBIGUOUS ENDO SELECTIVITY IN THE DIELS-ALDER REACTIONS

Naima Amghar<sup>a\*</sup>, Lynda Merzoud<sup>a,b\*</sup>, Meriem Almi,<sup>a</sup> Amar Saal<sup>a,b</sup>, AbdelAziz Kadri<sup>a</sup><sup>a</sup> LPCM, UMMTO University of Tizi-Ouzou, 15000, Algeria<sup>b</sup> Laboratory of Computational and Theoretical Chemistry and Photonics, USTHB University of Algiers, 16111, Algeria.\* [merzoud-lynda@live.fr](mailto:merzoud-lynda@live.fr)**Abstract**

Many organic reactions and reaction sequences have been developed for the construction of structurally complex polycyclic natural and non-natural products. We have computationally explored the reactivity of [4+2] cycloaddition between the cyclopentadiene (CP) and the dimethylmaleate (DMM). The density functional theory (M06/6-31G(d,p) level) rationalized the preference of endo adduct in thermal Diels-Alder reactions. This selectivity is due to the increase of the reactants deformation at  $r(\text{C}-\text{C}) < 2.5 \text{ \AA}$  in the exo pathway which causes the rise of its activation energy. The usage of the activation strain model confirmed that the orbital interactions are not responsible of the endo selectivity.

**Keywords:** Stereoselectivity; Cycloaddition; ASM-EDA; Cyclopentadiene; dimethylmaleate; DFT calculations.

**Introduction**

The Diels-Alder reaction [1] is one of the most important reactions both in synthesis and in its mechanistic implications. [2] Therefore, much attention was devoted to the facial stereoselectivity, i.e. exo vs endo approach. [2] Thus, the ASM-EDA Model allowed us to resolve definitively the ambiguous endo selectivity in the Diels-Alder reactions and understand the real factors controlling the formation of endo products in [4+2] cycloaddition.

**ASM-EDA study**

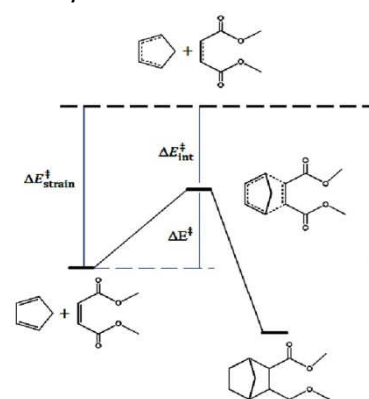
The activation strain analysis reveal that the exo orientation is, at the first stages of the reaction, more dominate but after  $r(\text{C}-\text{C}) = 2.5 \text{ \AA}$  the endo pathway does favor until the later stages. This finding implies that others factors controlling the endo selectivity obtained in the Diels-Alder reactions. Thus, the EDA method shows that the interaction energy between the CP and the DMM along the reaction coordinate  $\Delta E_{\text{int}}(\zeta)$  appears not to be at all decisive for the endo selectivity. Along the reaction coordinate, the  $\Delta E_{\text{strain}}(\zeta)$  increase, because the substrate becomes increasingly deformed. However, this deformation is more important in the exo orientation when the starting point is the two separate reactant, which approach from infinity to  $r(\text{C}-\text{C}) = 2.5 \text{ \AA}$ . At a short distance,  $r(\text{C}-\text{C}) < 2.5 \text{ \AA}$ , the deformation in the case of endo approach becomes more important. At the same time, the interaction  $\Delta E_{\text{int}}(\zeta)$  becomes more stabilizing in most cases.

**Conclusion**

The activation strain analysis identify the strain energy as a major factor in controlling the barrier heights. The orbital interactions are not contributed to the endo selectivity. These findings confirm that the orbital interaction-based explanation for the endo rule is not always correct.

**References**

- [1] Diels, O.; Alder, K. *Justus Liebigs Ann. Chem.* 98 (1928) 460.  
 [2] March, J. *Advanced Organic Chemistry, 4th ed.*; Wiley: New York, (1990) 842-852



Activation strain model for the Diels-Alder reaction between the cyclopentadiene (CP) and the dimethylmaleate (DMM)



## P10 - JCTC12

## PROPRIETES ENERGETIQUES ET TRANSFERT DE CHARGE DANS DES COMPOSES ORGANIQUES

B. Anak<sup>1,2\*</sup>, K. Bouchemella<sup>1</sup>, S. Saadi<sup>1</sup>, M. Bencharif<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Laboratoire de Chimie des Matériaux, Université Frère Mentouri Constantine.<sup>2</sup>Ecole Normale Supérieure de Constantine.[amel.anak@gmail.com](mailto:amel.anak@gmail.com)**Résumé**

Les composés oxadiazoles appartenant à la classe des composés organiques hétérocycliques [1]. Ces composés sont les plus utilisés à cause de leurs propriétés structurales et leurs activités biologiques diverse comme sédatives, antifongiques, anti convulsifs, anti tumoraux [2]. Ces molécules, en plus de leurs propriétés biologiques, présentent un potentiel optique pour leur utilisation en tant que "dye sensitizer" dans les dispositifs solaires. Ces oxadiazoles sont étudiés pour préciser leurs propriétés optiques et évaluer leur usage dans les cellules photovoltaïque hybride à colorant. Pour cela nous avons utilisé la DFT et la TD-DFT pour caractériser les états électroniques excités et identifier les propriétés optiques. Les résultats des études théoriques de spectroscopie seront discutés par comparaison aux résultats expérimentaux. Nous montrons que ces composés peuvent être utilisés dans la confection des cellules photovoltaïques, il s'agit de calculer les propriétés énergétiques les spectres d'absorption UV-Visible par deux fonctionnelles B3LYP et CAM-B3LYP [3] et avec la base de type 6-311G. Les calculs sont effectués avec le programme GAUSSIAN 09 et en utilisant l'interface graphique développée, par A. R. Allouche, nommée GABEDIT [4]. Les résultats obtenus montrés grâce aux propriétés optiques substitués au Br présentent un transfert de charge du cycle vers l'atome de Br, c'est donc un composé à transfert de charge interne. Enfin nous avons rationalisé les résultats obtenus pour toute molécule afin de confirmer éventuellement leur caractère optique. L'énergie des orbitales frontières de nos composés est proche de celle de semi-conducteur utilisé (TiO<sub>2</sub>) comme support dans la cellule photovoltaïque et présente un niveau énergétique favorable au transfert des charges dans nos composés.

**Références**

- [1] Kenneth D.R, and John M.S, *Bioorganic & Med Chem. Lett.* 11(2001) 753  
[2] Orlek B.S, Blaney F.E, Brown F, Clark M.S, Hadley M. S, Hatcher J, Riley G.J, Rosenberg H.E, Wadsworth H.J, and Wyman P, *J.Med. Chem.* 34 (1991) 2726.  
[3] T. Yanai, D.P. Tew, N.C. Handy, A new hybrid exchange-correlation functional using the Coulomb-attenuating method (CAM-B3LYP), *Chem. Phys. Lett.*, 393 (2004), pp. 51–57  
[4] A. R. Allouche, GABEDIT is a free graphical user interface for computational chemistry packages. It is available from <http://gabedit.sourceforge.net>.

## P11 - JCTC12

## ETUDE PAR LA MODELISATION MOLECULAIRE DES PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES DES DERIVES DE 1,3,4-THIADIAZOLE

Nabila Aoumeur\*, Noureddine Tchouar, Kamel Bentayeb, Oualid Oukil et Abderahim Rouane.

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

\* [aoumeur.nabila@yahoo.fr](mailto:aoumeur.nabila@yahoo.fr)

### Résumé

Dans le cadre de ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés structurales, électroniques de nouveaux composés conjugués basés sur des dérivés du 1,3,4-thiadiazole, 2-amino-5- (3-chlorobenzobenzothien-2-yl)-1,3,4-thiadiazoles (ACT), du 5-(3-chlorobenzobenzothien-2-yl)-2-(N-phénylamino)-1,3,4-thiadiazole (NPH-ACT), 2-amino-5-[(2,4-dichlorophénoxy)méthyl]-1,3,4-thiadiazole (ADMT) [(2,4-dichlorophénoxy)méthyl]-2-(N-phénylamino)-1,3,4-thiadiazole (NPH-ADMT). A cet égard, nous nous sommes naturellement tournés vers les approches de chimie quantique basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Une étude spectrale a été effectuée par la résonance magnétique nucléaire (RMN) et la vibration (IR) pour renforcer l'activité biologique de nos molécules étudiées.

**Mots clés :** 1,3,4-thiadiazole, DFT, RMN, propriétés électroniques.

### Introduction

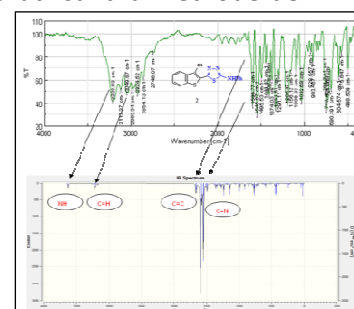
Les 1, 3, 4-thiadiazoles constituent une classe importante de composés hétérocycliques et font l'objet d'une recherche très active dans le monde en raison de leurs diverses propriétés [1,2].

### Etude comparative des propriétés physicochimiques pour les quatre formes d'isomères

Nous avons réalisé une série de calculs quantiques à l'aide du Gaussian 09 utilisant la méthode de DFT avec la fonctionnelle B3LYP et la base 6-31G (d) dans le but de déterminer les différentes propriétés électroniques, énergétiques et structurales de nos molécules, et trouver la structure la plus stable.

En se basant sur des résultats expérimentaux, l'étude par la spectroscopie IR et RMN- $H^1$  (les structures et déplacements chimiques) de noyau de base 1,3,4-thiadiazole a démontré que les molécules étudiées ont des activités biologiques intéressantes.

La figure (1) présente, le spectre IR<sub>EXP</sub> et IR<sub>THE</sub> du thiadiazole (NPH-ACT) qui reflète la présence des bandes caractéristiques des groupements C=N et N-H du noyau thiadiazolique.



**Fig. 1 :** (a) Spectre IR<sub>exp</sub> et (b) spectre IR<sub>the</sub> de NPHACT.

### Conclusion

Les résultats montrent que le composé NPHACT est le plus stable. Nous pouvons dire que ce composé a un site actif et une bonne activité biologique optimale. De plus, les fréquences infrarouges théoriques concordent bien avec celles obtenues expérimentalement.

### Références

- [1] N. Demirbas, Synthesis and Characterization of New Triheterocyclic Compounds Consisting of 1,2,4-Triazol-3-one, 1,3,4-Thiadiazole and 1,3,4-Oxadiazole Rings, Turk. J. Chem. 29, 125-133 (2005).
- [2] M. Amir, K. Shikha, Synthesis and anti-inflammatory, analgesic, ulcerogenic and lipid peroxidation activities of some new 2-[(2,6-dichloroanilino) phenyl]acetic acid derivatives, Eur. J. Med.Chem. 39(6), 535-545 (2004).

## P12 - JCTC12

## IN SILICO STUDY OF THE ANTIOXIDANT ACTIVITY OF 4-(5-CHLORO-2-HYDROXY-PHENYLAMINO)-4-OXOBUT-2-ENOIC ACID DERIVATIVES

T.A. Ardjani, S. M. Mekelleche\*

<sup>a</sup> Laboratory of Applied Thermodynamics and Molecular Modelling, Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Tlemcen, PB 119, Tlemcen, 13000, Algeria

\* [sidi\\_mekelleche@yahoo.fr](mailto:sidi_mekelleche@yahoo.fr)

**Abstract**

In the present work, the molecular structure and the antioxidant activity of 4-(5-chloro-2-hydroxyphenylamino)-4-oxobut-2-enoic acid (A) and its derivatives (B-E) have been studied at the B3LYP/6-31++G(2d,2p) computational level. The obtained results indicate that the hydrogen atom transfer (HAT mechanism) is thermodynamically more favored in gas phase; whereas, the sequential proton loss-electron transfer (SPLET mechanism) is more preferred in polar solvents. The antioxidant activity of compounds A-E is also analyzed by the calculation of atomic spin densities, chemical hardnesses, dipole moments, and lipophilicity indexes. It turns out that compound E (R = t-Bu) is predicted to be more antioxidant than ascorbic acid and other derivatives A-D in both gas phase and polar solvents. The high antioxidant activity of compound E compared to other derivatives A-D is also rationalized using the molecular docking technique.

**Keywords :** Antioxidant mechanisms; Carboxylic acids; DFT calculations; Molecular docking.

**Introduction**

Antioxidants are chemicals that offer up their own electrons to free radicals and thus prevent cellular damage. In recent years, many efforts have been devoted to find new high order antioxidants for their potential applications to scavenge free radicals. Several strategies being executed and the most effective strategy appears to continually modify the existing classes of antioxidant agents to provide new analogues.

Recently [1], a novel compound, 4-(5-chloro-2-hydroxyphenylamino)-4-oxobut-2-enoic acid (compound A) was synthesized and screened for various biological activities like antitumor and antioxidant activities. Our first aim in the present work is to give a deeper insight about the high antioxidant activity of compound A and to suggest other derivatives which may have more antioxidant power than compound A and ascorbic acid. The substituent effect in the ortho position (see Fig. 1) on the antioxidant power is also analyzed. Our second goal is to study the main scavenging mechanisms (HAT/SPLET/SET-PT) in gas phase and in solvents (EtOH, DMSO, H<sub>2</sub>O). For this purpose, we have calculated the more relevant quantum-chemistry antioxidant descriptors, namely, BDE, AIP, PDE, PA, and ETE. Aside from the antioxidant descriptors, we calculated other parameters, namely, the HOMO energy, the chemical hardness ( $\eta$ ), the dipole moment and the atomic spin density (ASD). The antioxidant activity of compounds A-E against ROS has also been analyzed using the molecular docking technique.

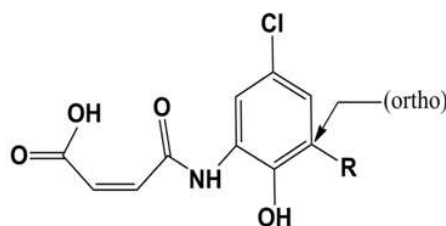


Figure 1. R= H (compound A), R= COH(compound B), R= Me(compound C), R= *i*-Pr (compound D), R= *t*-Bu(compound E).

Our second goal is to study the main scavenging mechanisms (HAT/SPLET/SET-PT) in gas phase and in solvents (EtOH, DMSO, H<sub>2</sub>O). For this purpose, we have calculated the more relevant quantum-chemistry antioxidant descriptors, namely, BDE, AIP, PDE, PA, and ETE. Aside from the antioxidant descriptors, we calculated other parameters, namely, the HOMO energy, the chemical hardness ( $\eta$ ), the dipole moment and the atomic spin density (ASD). The antioxidant activity of compounds A-E against ROS has also been analyzed using the molecular docking technique.

**Conclusion**

The obtained results indicate that compound E (R = t-Bu) is predicted to be more antioxidant than ascorbic acid and other derivatives A-D in both gas phase and polar solvents [2].

**References**

- [1] Sirajuddin M, Nooruddin S, Ali V, McKee S, Zeb K, Malook K, Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc, 134 (2015) pp 244–250.  
 [2] Ardjani A.T.E, Mekelleche S.M., J Mol Model 22 (2016) pp 302-312.

## P13 - JCTC12

## LUMINESCENT CYCLOMETALLATED ALKYNYL GOLD(III) COMPLEXES. A DFT STUDY

Hayat Ayache<sup>a,b</sup>, Dalila Hammoutène<sup>b</sup>, Aziz Elkechai<sup>a</sup>, Abdou Boucekkine<sup>c</sup>

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

<sup>b</sup> Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB, Alger, Algérie

<sup>c</sup> Laboratoire de Sciences Chimiques, UMR-CNRS 6226, Université de Rennes 1, Rennes, France

\* [ayache.22@hotmail.com](mailto:ayache.22@hotmail.com)

**Abstract**

Molecules based on gold (III) complexes have gained several significance owing to their potential applications in organic phosphorescent light emitting diodes (PHOLEDs)<sup>[1]</sup>.

This work focuses on the effect of the bis-cyclometallation ligand in both vacuum-deposited and solution, in order to understand the nature of the bis-cyclometallatedalkynyl gold (III) system, and investigate the effect of ligand on the luminescence properties of the resulting gold (III) complexes<sup>[2]</sup>.

Our complexes include a diphenyl-pyridine metallacycle with a terminal R1 group and an alkynyl ligand bearing a radical R2, namely  $[Au(HC^{\wedge}N(R1)^{\wedge}CH)(C\equiv CR2)]$ . Absorption and emission properties of our compounds were performed by density functional theory (DFT) and TD-DFT calculations, by using the hybrid functional PBE0 associated with a double zeta basis of atomic orbitals, in addition with the polarization functions LANL2DZ, as implemented in the Gaussian 09 package.

The nature of the ligands has been found to greatly influence the geometry and the molecular orbital borders. In addition, we estimated the phosphorescence wavelength of these complexes. These appear to be dependent on both the surrounding environment and the nature of the R1 and R2 end groups.

**Keywords** : PHOLEDs, DFT, TD-DFT, Luminescence.

**References**

- [1] (a) W. P. To, K. T. Chan, G. S. M. Tong, C. S. Ma, W. M. Kwok, X. G. Guan, K. H. Low, C. M. Che, *Angew. Chem.* 2013, 125, 6780– 6784; *Angew. Chem. Int. Ed.* 2013, 52, 6648 –6652; (b) W. P. To, T. Zou, R. W. Y. Sun, C. M. Che, *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A* 2013, 371, 20120126; (c) X. S. Xiao, W. L. Kwong, X. G. Guan, C. Yang, W. Lu, C. M. Che, *Chem. Eur. J.* 2013, 19, 9457 –9462.
- [2] Vonika Ka-Man Au, Daniel Ping-Kuen Tsang, Keith Man-Chung Wong, Mei-Yee Chan, Nianyong Zhu, and Vivian Wing-Wah Yam. *Inorg. Chem.* 2013, 52, 12713–12725.

## P14 - JCTC12

## DETERMINATION DES PROPRIÉTÉS STRUCTURALES DU COMPOSE ORGANIQUE: ETUDE DFT

N. Belkafouf\*, A. Chouaih\*, F. Hamzaoui\*

*Laboratoire Technologie et Propriétés du Solide (LTPS), Université Abdel Hamid Ibn Badis, Mostaganem, Algérie*\*[houda01991@live.fr](mailto:houda01991@live.fr)**Résumé**

Notre travail concerne l'étude structurale d'un nouveau composé organique de formule chimique  $C_{21}H_{18}O_2N_2S_3$  par modélisation moléculaire. Les calculs théoriques ont été effectués à l'aide de logiciel gaussian 09. Les distances interatomiques, les angles de valence ainsi que les angles dièdres sont déterminées par les deux méthodes. Les résultats obtenus par calcul théorique de chimie quantique sont comparés avec ceux de la diffraction des rayons X. Un bon accord est observé entre la structure optimisée et celle expérimentale. La structure retenue est utilisée pour déterminer d'autres propriétés moléculaires comme le transfert de charges au sein de la molécule.

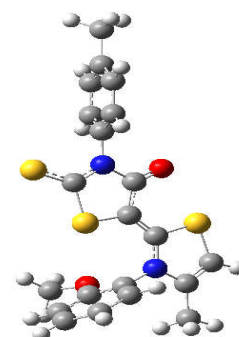
**Mots clés:** modélisation, gaussian, diffraction des rayons x sur poudre, propriétés structurales électroniques.

**Introduction**

De nos jours, la problématique énergétique se révèle être de plus en plus urgente. Notre société a besoin d'énergie peu dispendieuse. Dans ce contexte, la technologie à base de matériaux organiques aurait des chances de devenir une solution à notre problème [1,2]. Parmi ces matériaux organiques on a fait une étude structurale d'un nouveau composé organique fonctionnel de la famille de thiazolidinones, le  $C_{21}H_{18}O_2N_2S_3$ . La structure a été déterminée par calcul théorique de type ab initio en utilisant la méthode de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'étude théorique est réalisée à l'aide du package Gaussian 09. Ce travail s'achèvera par une étude comparative entre les résultats du calcul théorique et ceux de l'expérimentation.

**Propriétés structurales**

Les paramètres géométrique (longueurs de liaisons, angles de valence et angles dièdres) de la molécule ont été déterminés expérimentalement par la diffraction des rayons X, et méthode de la fonctionnelle de la densité (DFT) en utilisant la fonctionnelle B3LYP avec le jeu de bases 6-31G(d,p). Les résultats expérimentaux sont en bon accord avec ceux du calcul théorique. Ces résultats nous ont permis de déterminer la valeur et l'orientation du moment dipolaire de la molécule qui de plus nous a permis de déterminer la valeur et l'orientation du moment dipolaire de la molécule qui de plus nous a permis de déterminer la valeur et l'orientation du moment dipolaire de la molécule. La représentation des orbitales frontières ainsi que le calcul des énergies des orbitales frontières [3] nous permettront de déterminer les pements donneurs et accepteurs d'électrons.

**Conclusion**

Les résultats théoriques et expérimentaux des différents paramètres géométriques caractérisant la molécule étudiée sont en bon accord avec les calculs ab initio basés sur la DFT et sont comparables à des molécules similaires trouvées dans la littérature [4]. Le calcul réalisé nous a permis de déterminer : les niveaux des énergies des orbitales frontières, le moment dipolaire et le potentiel électrostatique.

**Références**

- [1] Moliton, Andre, Electronique et optoélectronique organique, Springer, 2011.
- [2] Adachi, Wolfgang Brutting and Chihaya, Physics of organic, Wiley-VCH, 2012.
- [3] Uday Das, Basab Chattopadhyay, Monika Mukherjee, A.K. Mukherjee, Chemical physics letters, volume 501, 2010.
- [4] M. Boulakoud, K. Toubal, S. Yahiaoui, A. Chouaih, G. Chita, A. Djafri, and F. Hamzaoui. Structural Chemistry, volume 56, 2015.

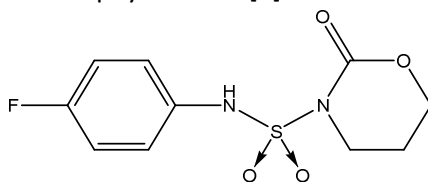
## P15 - JCTC12

## IN SILICO ANALYSIS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITIES OF A SERIES OF SULFADRUGS AND THE N-[P-FLUOROPHENYL] N'-SULFAMOYL PERHYDROOXAZINONE]

Besma Bendif<sup>a</sup>, Nadja Bensouilah<sup>b</sup>, Mohamed Abdaoui<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de chimie appliquée, Université de Guelma, BP 401, 24000 Guelma, Algérie.<sup>b</sup>Laboratoire de chimie organique appliquée (LCOA), USTHB, BP 32, El-Alia, 16111 Bab-Ezzouar, Algeria[besma.bendif@gmail.com](mailto:besma.bendif@gmail.com)**Abstract**

The growing problem of antibiotic-resistant bacteria is a major threat to human health. Paradoxically, new antibiotic discovery is declining, with most of the recently approved antibiotics corresponding to new uses for old antibiotics or structurally similar derivatives of known antibiotics.

We have designed and synthesized a series of a sulfonamide derivatives as antimicrobial agents mimicking the structure of pABA (p-amino benzoic acid) [1]. pABA is a substrate of dihydropteroate synthase (DHPS) in the biosynthesis of 7,8-dihydropteroate, which is very important in folic acid biosynthesis needed for cell proliferation. The rationale of the design was that the synthesized compounds could act as a competitive inhibitor of pABA. In this work we report the study of intermolecular interactions with a docking experiment between the (N-(4-fluorophenyl)-2-oxo-1,3-oxazinane-3-sulfonamide) and dihydropteroate synthase (DHPS) of *Escherichia coli* and *Staphylococcus* [2].



N-[p-fluorophenyl] N'-sulfamoyl perhydrooxazinone

**Key words:** Sulfa Drug, Antibiotic, Molecular Docking, DHPS, Folic acid, Dihydropteroate synthase.

**Introduction:**

Dihydropteroate synthase (DHPS) is the target of the sulfonamide class of antibiotics and has been a validated antibacterial drug target for nearly 70 years. The sulfonamides target the p-aminobenzoic acid (pABA) binding site of DHPS and interfere with folate biosynthesis and ultimately prevent bacterial replication. However, widespread bacterial resistance to these drugs has severely limited their effectiveness. This study explores the second and more highly conserved pterin binding site of DHPS as an alternative approach to test the potential antibacterial ability of N-[p-fluorophenyl] N'-sulfamoyl perhydrooxazinone. In this study, the 3 three-dimensional (3D) structures of our compound, the pABA and 6 Sulfa Drugs were established by using surflex-dock software, the antibacterial effects of 7 chemicals compounds were investigated by the scoring function after molecular docking was completed. By comparing the scoring result of the synthesized compound with 5 compared components.

**Conclusion:**

The tested compounds showed high similarity interaction with hydroxymethylpterin pyrophosphate (natural substrate of DHPS) in building intermolecular interactions even the activity was equal to some sulfadugs used as positive controls. In addition, it showed a good potential to be used as a wide spectrum antimicrobial agent. The in silico experiment showed that N-[p-fluorophenyl] N'-sulfamoyl perhydrooxazinone had a strong antibacterial effect.

**References:**

- [1] Mounir, N.; Abdaoui, M.; Djahoudi, A.; Kaddri, M; Winum, J-Y. synthesis of substituted N-aryl-N'-Sulfamoyloxazolidin-2-ones with potentiel antibacterial activity. Recent patents on anti-infective drug discovery, 2007, 2, 131-139.
- [2] Mounir, N.; Djahoudi, A.; Seridi, A.; Akkari, H.; Aouf, N-E.; Daran, J-C.; Abdaoui, M. Synthesis, crystal structure and antibacterial Evaluation of n-substituted perhydro-1,3-oxazin-2-ones Containing n-phenylsulfonamide. Heterocycles. 2011, vol. 83, no. 5.



## P16 - JCTC12

## DFT AND TDDFT STUDY OF PHOTOCROMIC PROPERTIES OF DTE PLATINUM COMPLEXES DERIVATIVES

Mohamed Ali Benmensour<sup>a,b\*</sup>, Sema Djennane<sup>a</sup>, Julien Boixel<sup>c</sup>, Hubert Le Bozec<sup>c</sup>, Véronique Guerchais<sup>c</sup>, Abdou Boucekkine<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de thermodynamique et modélisation moléculaire, USTHB, Alger, Algérie

<sup>b</sup> Département de chimie, UMMTO, Tizi-Ouzou, Algérie.

<sup>c</sup> UMR 6226 CNRS, Université de Rennes 1, Rennes, France

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

## Abstract

In our study, we are interested in a new series of dithienylethene (DTE) complexes based on Platinum(II), in their open and closed forms (Fig.1). We disclose two unprecedented complexes built with a central dithienylethene photochrome connecting two cyclometalated Pt(II) moieties either on the reactive carbon atoms (**Pt-B**) or on the lateral nonreactive carbon atoms (**Pt-A**) of the photochrome. The two systems show vastly different properties that are rationalised thanks to quantumchemical calculations.

**Keywords :** DTE; platinum complexes

According to the investigators, for **Pt-B** complex, only the tail conformation mononuclear complex allow cyclization under the action of UV light, and therefore the passage from an open form to a closed form. Then the opening of the formed ring is accompanied by emitting light with a wavelength above 550 nm; that which it procure a photochromic activity [1], this phenomenon is not observed for the dinuclear complex, but for the other complex **Pt-B**, there is no problem for the cyclization, trying to find the explanation for this phenomenon, but also to meet a number of questions, we used the theoretical mixed method PBE0 with LANL2DZP basis set, to perform the full geometry optimization and a check of the ground state by calculating frequencies. Recalling that during the optimization of the open form we took as initial geometry, the structure resulting of the X-ray analysis. The simulation of UV-visible absorption spectra is performed by using the theoretical TD-DFT method.

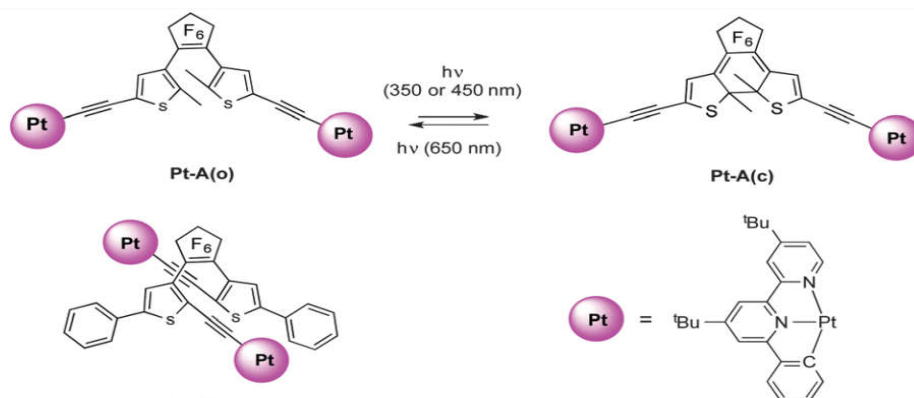


Fig.1 : scheme of Pt-A and Pt-B complexes.

**References:** [1] Y. Lin, C. Jiang, F. Hu, J. Yin, G-A. Yu, S. H. Liu, *Dyes and Pigments*, 99 (2013) 995-1003.



## P17 - JCTC12

## ETUDE THEORIQUE DE L'EFFET DE LA CONJUGAISON SUR LA STRUCTURE ET LES PROPRIETES SPECTRALES DU COLORANT SENSIBILISATEUR N3 A BASE DE SELENOPHENE

Zahia Ben Mesbah<sup>a\*</sup>, Nouara Massout<sup>a</sup>, Maâmar Rekhis<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Chimie Théorique Computationnelle et Photonique (LCTCP), Faculté de Chimie, USTHB, Bab Ezzouar, Alger.\* [benmesbah\\_zahia@hotmail.fr](mailto:benmesbah_zahia@hotmail.fr)**Résumé**

La cellule solaire de type Grätzel ou cellule solaire sensibilisée par colorant est une nouvelle technologie photovoltaïque, dont la fabrication est beaucoup moins coûteuse et plus propre pour l'environnement. Des rendements de conversion de plus de 11% ont été mesurés et certifiés suite à d'intenses recherches ces quinze dernières années. Ce type de cellules repose sur un oxyde semi-conducteur à large bande interdite sensibilisée par un colorant.

Les géométries, les structures électroniques et les propriétés d'absorption des deux complexes de ruthénium pour les cellules solaires sensibilisées par colorant, y compris : [Ru (2,2'-bipyridine)(4,4'-bis(5-hexylselenophene-2-yl)2,2'-bipyridine)(COOH)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub>] et [Ru(2,2'-bipyridine)(4,4'-bis(5-hexylbiselenophene-2yl)2,2'bipyridine) (COOH)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub>] ont été étudiés en utilisant la DFT et la TD-DFT.

**Mots clés:** DFT, Colorant N3 à base de selenophene, Spectre d'absorption.

**Introduction :**

Dans le contexte mondial de développement d'énergies renouvelables, la conversion photovoltaïque se positionne comme la meilleure alternative aux énergies fossiles. Dans ce domaine, la cellule photoélectrochimique à colorant ou cellule de troisième génération constitue une nouvelle technologie prometteuse pour la conversion de l'énergie solaire.

**Détails calculatoires :**

Tous les calculs ont été effectués à l'aide du logiciel GAUSSIAN. Une approche hybride HF/DFT, désignée par PBE1PBE, a été choisie. C'est la base double- $\zeta$  de Hay et Wadt qui a été choisie.

Les spectres d'absorption ont été calculés en TDDFT, comme excitations verticales à partir des minima obtenus en DFT, avec les mêmes fonctionnelles et bases citées ci-dessus, afin de couvrir l'ensemble du domaine spectral UV-Visible. De ces calculs, deux grandeurs reliées directement aux spectres peuvent être tirées : l'énergie des transitions électroniques et la force de l'oscillateur ( $f$ ) correspondante.

**Conclusion :**

Les géométries et les structures électroniques de deux sensibilisateurs de ruthénium dans les cellules solaires sensibilisées par colorant, y compris Ru-Sef1 et Ru-Sef2, sont étudiées en utilisant la DFT. Les propriétés d'absorption électronique ont été calculées via la TDDFT.

Les résultats TDDFT avec la base LANL2DZ donnent un maximum d'absorptions différentes, ainsi que des propriétés de transition différentes. Ceci souligne l'importance de sélectionner la fonctionnelle DFT pour obtenir les résultats fiables des propriétés d'état excité.

**Références**

- [1] B.O'Regan, M.Grätzel, *Nature*, 353, 737 (1991).  
 [2] N. Hirata, J.-J. Lagref, E. J. Palomars, J. R. Durrant, M. K. Nazeeruddin, M. Grätzel et D. Di Censo, *Chem. Eur. J.* 10 595 (2004).

## P18 - JCTC12

STUDY OF PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF THE I-C<sub>4</sub>H and c-C<sub>4</sub>H IN THE INTERSTELLAR ENVIRONMENTSara Chérifa Bennedjai<sup>a</sup>, Dalila Hammoutène<sup>a</sup>, M. Luisa Senent Diez<sup>b</sup><sup>a</sup> *Laboratory of Thermodynamics and Molecular Modeling, Faculty of Chemistry, USTHB, BP32, El Alia, 16111 Bab Ezzouar, Algiers, Algeria.*<sup>b</sup> *Instituto de Estructura de la Materia del Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Madrid.*\* [besmela.sara@yahoo.fr](mailto:besmela.sara@yahoo.fr)**Abstract**

To determine structural, spectroscopic, electronic and energetic properties for the C<sub>4</sub>H hydrocarbon (l-C<sub>4</sub>H and c-C<sub>4</sub>H) method such as DFT, implemented in the Gaussian 09 package, was used at the B3LYP/6-311G+dp level of theory. Single-point calculations will then be performed, with open shell Coupled Cluster theory (RCCSD), using the MOLPRO suite of programs, in order to reach more accurate energies.

**Keywords :** Electronic structure, Spectroscopy, Interstellar molecules, C<sub>4</sub>H radical, Astrochemistry

**Introduction:**

Carbon chain molecules play an important role in astrochemical processes of cold interstellar clouds and shells of late type carbon stars [1, 2]. Hydrocarbons form the backbone of the interstellar chemistry, in gas phase, and involved in the combustion process and in the atmospheric compositions of the planets as well as their satellites and comets.

Hydrocarbon radicals C<sub>n</sub>H, have been observed in a variety of situations: Diffuse interstellar clouds [3], Dense regions of photodissociation and Circumstellar envelopes.

**Computational details:**

The optimized geometries for l-C<sub>4</sub>H and c-C<sub>4</sub>H by the DFT B3LYP/6-311G+dp method are showing in Fig1. Spectroscopic parameters corresponding to the electronic ground state have been calculated using classical perturbation theory and the code FIT-ESPEC [3]; the excited states are calculated by using TD-SCF/DFT B3LYP/ 6-311G+dp.

**Conclusion:**

The overall results would serve, among other database. Our calculations have also shown that this is the linear isomer which has greater energy stability. Its characterization, theoretically, generated data that would be useful for the detection of such molecular species in the Interstellar Medium MIS.

**References**

- [1] J. Cernicharo, J.R. Goicoechea, E. Caux, *Astrophys. J.* 534 (2000) L199.
- [2] T.F. Giesen, A.O. Van Orden, J.D. Cruzan, R.A. Provencal, R.J. Saykally, R. Gendriesch, F. Lewen, G. Winnewisser, *Astrophys. J.* 551 ( L81).
- [3] M. L. Senent, FIT-ESPEC, a Fortran code for calculating spectroscopic parameters from a force field in internal coordinates, 2007.

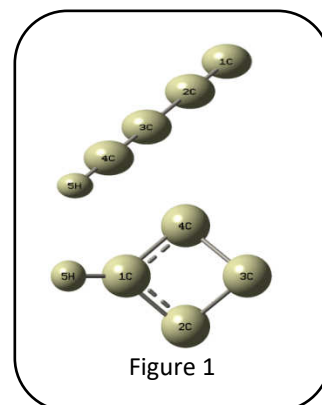


Figure 1

## P19 - JCTC12

STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF CsPbX<sub>3</sub> AND CsSnX<sub>3</sub>  
PRINCIPLES CALCULATIONS

(X: Cl, Br, I): FIRST-

R. Bensadok<sup>a</sup>, H. Djani<sup>a</sup>, D. Hammoutène<sup>a</sup><sup>a</sup> *Laboratory of Theoretical Chemistry, Faculty of Chemistry, USTHB, Algiers.*  
[raouiaben91@gmail.com](mailto:raouiaben91@gmail.com)**Abstract**

Every element of the periodic table, with the exception of the noble gases, can be found in perovskite structure with ABX<sub>3</sub> formula [1]. Halide perovskites (X= Cl, Br, I), have been demonstrated to be a promising class of materials for optoelectronic applications, including high efficiency photovoltaic cells, light emitting diodes, lasers, and photodetectors [2].

In this work, we are interested in CsPbX<sub>3</sub> and CsSnX<sub>3</sub> compounds. These materials show an increasing popularity for technological applications: CsPbX<sub>3</sub> nanocrystals appeal for optoelectronic applications, particularly for blue and green spectral regions (410-530 nm) [3], while the CsSnI<sub>3</sub> compound has a strong luminescence at a band gap close to that of Si. Strong absorption at shorter wavelengths makes CsSnI<sub>3</sub>, also, attractive as a solar luminescent concentrator material or as a solar cell absorber [4].

Here, we report First Principles calculations of structural and electronic properties of the cubic phase of CsPbX<sub>3</sub> and CsSnX<sub>3</sub> (X= Cl, Br, I) using the ABINIT package [5].

The calculated lattice parameters are in good agreement with the available experimental ones and as expected the lattice parameters increase with the increase of cations and anions size (ie. Cl < Br < I and Sn < Pb). Our Six components CsBX<sub>3</sub> display almost similar energy bands structure with a direct band gap at R (1/2, 1/2, 1/2) of the Brillouin zone. The calculated band gap are underestimated comparing to experimental but the GGA-PBE functional are closer to the experimental than the LDA. Moreover, we notice that the energy band gap increases when B varies from Sn to Pb and decreases when X varies from Cl to Br and then to I. This behaviour indicates that, in perovskites, the band gap increases with the size of B cations and decreases with the size of X anion and that could be related to the decrease electronegativity difference between metal cation and anion.

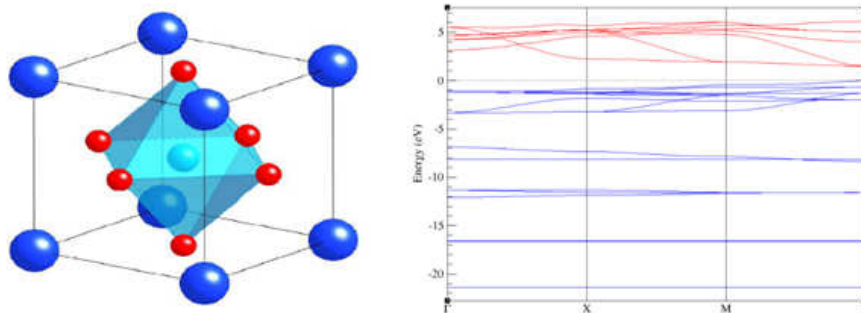


Figure 1: from left to right: schematic view of the perovskite structure ABX<sub>3</sub> (A: big blue balls; B: medium green ball; X: small red balls), Energy bands structure of CsPbI<sub>3</sub>.

**References:**

- [1] Christopher J. Howard, Harold T. Stokes, Acta Cryst Section A(2004).
- [2] Dandan Zhang, Samuel W. Eaton, Yi Yu, Letian Dou, and Peidong Yang JACS (2015).
- [3] Loredana P, Sergii Y, Maryna B, Franziska K, Riccarda C, Christopher H. Ruo Xi, Y, Aron W, Maksym K, NANO LETTER(2015)
- [4] Ling-yi Huang and Walter R. L. Lambrecht, Phys Rev. B (2013).
- [5] <http://www.abinit.org>.

## P20 - JCTC12

## DFT STUDIES OF A NEW TERNARY RUTHENIUM (III) COMPLEX WITH 1, 3 BIS (SALICYLIDENEAMINO) PROPAN-2-OL AND 3-PICOLYLAMINE.

Nour El Houda Bensiradj<sup>a,b\*</sup>, Achour Terbouche<sup>c</sup>, Chafia Terbouche<sup>c</sup> and Amar Saal<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Chimie Théorique Computationnelle et Photonique (LCTCP)

Faculté de chimie, USTHB BP32, 16111 El Alia, Alger, Algérie

<sup>b</sup> Ecole Normale Supérieure Kouba, Alger, Algérie.

<sup>c</sup> Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyses Physico-chimiques (CRAPC), 16004 Alger, Algérie.

\* [nourelhouda.bensiradj@yahoo.fr](mailto:nourelhouda.bensiradj@yahoo.fr)

### Abstract

The Ru(III) complex was synthesized using 1,3-bis(salicylideneamino) propan-2-ol polydentate Schiff base (BSAP) and 3-Picolylamine (PLA), and was characterized by elemental analysis. The structure of the synthesized complex was optimized using density functional theory (DFT). The results showed that the ternary Ru(III)–BSAP–PLA complex was formed and the adapted structure was an tetrahedral geometry.

**Keywords:** Ruthenium (III) complex, DFT calculation

### Introduction

Geometry optimization and vibrational frequency analysis for the Ru(III) complex were performed using DFT approach with the M06 level [1] and relativistic effective core potential basis set of double zeta quality, Lanl2dz [2], as implemented in Gaussian03 program package [3]. This technique is the best method to predict the geometry of the metal transition complexes.

We optimized the geometry of the octahedral and tetrahedral forms of the ruthenium(III) complex [4]. Each geometry optimization was completed by a calculation of harmonic vibrational frequencies to confirm the most stable geometry. The studied forms of the Ru(III) complex were characterized as minima (no imaginary frequency) in their potential energy surface through harmonic frequency analysis. Selected bond distances, angles and dihedral angles for the three forms (RuO<sub>3</sub>N tetrahedral form: form(a)), RuN<sub>3</sub>O<sub>3</sub> octahedral form: form(b), N<sub>3</sub>O tetrahedral form: form(c) see in Fig 1). The optimized structures of for the three forms of studied complex (RuO<sub>3</sub>N tetrahedral form: form(a)), RuN<sub>3</sub>O<sub>3</sub> octahedral form: form(b), N<sub>3</sub>O tetrahedral form: form(c) see in Fig 1), show that the bond distances Ru1AN2 and Ru1AO6 increase in the order form(c) < form(a) < form(b).

The values of minimized energy of the three forms of the complex show that the form(c) (RuN<sub>3</sub>O) has a low energy, indicating that this structure is more stable compared to the other forms. The dipole moment differs from the zero. It increases while passing from the form(c) (6.2 D) to the form(b) (8.79 D) and the form(a) (8.85 D). The form(c) has a small dipole moment, confirming the stability of this structure compared to the other molecular geometry forms.

The gap energy values (form RuN<sub>3</sub>O<sub>3</sub>: 0.48 eV; form RuO<sub>3</sub>N: 0.40 eV; form RuN<sub>3</sub>O: 0.54 eV) show that the form RuN<sub>3</sub>O has largest gap compared to the other forms, indicating the most stable structure.

### Conclusion

Our structural and energetic results show that the form c is the most stable with respect to the two other forms. DFT study suggests an tetrahedral environment around the ruthenium(III).

### References

- [1] Y. Zhao, D.G. Truhlar, Theor. Chem. Acc. 120 (2008) 215–241.
- [2] P.J. Hay, W.R. Wadt, J. Chem. Phys. 82 (1985) 270–283.
- [3] M.J. Frisch, and al Gaussian 03, Revision A.1, Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2003.
- [4] A. Terbouche, C. Ait-Ramdane-Terbouche, S. Djebbar, D. Guerniche, R. Bagtache, N. E. H. Bensiradj, A. Saal, D. Hauchard Journal of Molecular Structure 1076 (2014) 501–511

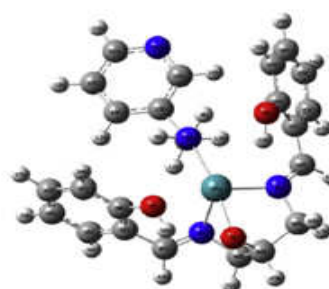


Fig. 1 : RuN<sub>3</sub>O tetrahedral form.

## P21 - JCTC12

TD-DFT CALCULATIONS AND NBO ANALYSIS OF CTC BASED ON SUBSTITUTED IMINES WITH  $\pi$ -ELECTRON ACCEPTORS

Nadjia Bensouilah<sup>b,c</sup>, Besma Bendif<sup>a</sup>, Nadjet Mohamdi<sup>a</sup>, Hassina Fisli<sup>a</sup>, Baya Boutemour<sup>b</sup>, Mohamed Abdaoui<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratory of applied chemistry (LAC), University of May 8th, 1945, BP 401, 24000 Guelma, Algeria

<sup>b</sup>laboratory of applied organic chemistry, faculty of chemistry (LAOC), University of Sciences and Technology Houari Boumediene, USTHB, BP 32, El-Alia, 16111 Bab-Ezzouar, Algiers, Algeria

<sup>c</sup>Ecole préparatoire des sciences et techniques d'Alger EPSTA, ALGER

\* [bensouilah2002@yahoo.fr](mailto:bensouilah2002@yahoo.fr)

### Abstract

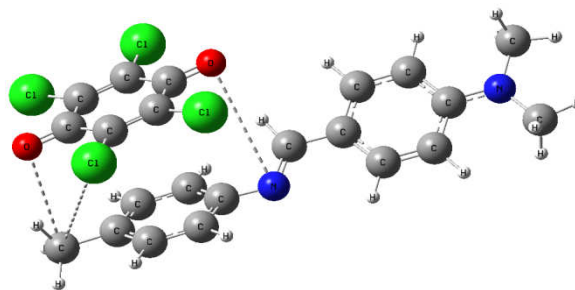
The formation of the intermolecular charge transfer complexes CTC between substituted imines and acceptors such as the bromanil, the chloranil and DDQ have been theoretically investigated with DFT methods. Spectral characteristics study of different selected complexes has been performed by TD-DFT calculations at CAM-B3LYP/6-31G (d) level of theory. Stability of the optimized structures has been analyzed using natural bond orbital analysis. The theoretically computed results have been compared with experimentally reported values.

**Key words:** Charge –Transfer- Complex, electron acceptors, shiff base, TD-DFT.

### Introduction

The term charge-transfer complex (CTC) which involves a formation of weak bonds was first introduced by Mulliken and coworkers. The study of charge-transfer (CT)-interactions between  $\sigma$  and  $\pi$  electron acceptors and various electron donors containing nitrogen, oxygen or sulfur atoms have attracted increased interest over the last years. These considerations led us to study the CT interactions between Substituted imines (shiff bases) with the known acceptors.

The formation of the intermolecular charge transfer complexes CTC between specifying Substituted imines (selected in our study) as donors and different types of  $\pi$ -acceptors has been experimentally confirmed in liquid as well as in solid state at room temperature. The aim of the present work is to make a theoretical study of the interaction of formed CTC using various theoretical techniques like CAM-B3LYP/6-31G, TD-DFT and NBO investigation.



**Figure 1:** Optimized structure of D/Chloranil complex at CAM-B3LYP/6-31G (d) in water

### Conclusion

The structural study of six complexes has been performed by density functional theory DFT method. Computational chemical analysis based on electronic excitation energies is determined using the CAM-B3LYP/6-31G (d) Coulomb-attenuated functional; time-dependent density functional theory (TD-DFT) using PCM solvation model and stabilization energies  $E^2$  have been calculated by natural bonding orbitals (NBO) analysis. The natural population analysis (NPA), vibrational frequencies calculations are also investigated.

### References

- [1] F. A, Adel Mostafa, HS. Shahada L, J Mol Struct 973:9–17, 2010.
- [2] H. Duymus, M. Arslan, K. Oglu, M. Zengin, J Spectrochim Acta A 65:1120–1124, 2006.
- [3] I.M. Khan, A. Ahmad. Journal of Molecular Structure, 2010, 975, 381.
- [4] M. Abdaoui, D. Messadi, G. Dewinter. Bull. Soc. Chim. Belg. 1995, Vol. 104, 06.
- [5] M. Dulski, M. Kempa, P. Kozub, J. Wojcik, M. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2013, 104, 315.

## P22 - JCTC12

## SPECTROPHOTOMETRIC DETERMINATION OF KINETIC CONSTANTS OF Fe (III)-AMINES's CHARGE TRANSFER COMPLEXES

Kamel Bentayeb\*, Oualid Oukil , Nouredine Tchouar

Laboratoire de Modélisation et Optimisation des Systèmes Industriels,  
 Université des Sciences et Technologies d'Oran (USTO) 31000, Algérie.

\* [k\\_bentayeb@yahoo.fr](mailto:k_bentayeb@yahoo.fr)

**Abstract**

Using UV-visible spectrophotometric data of (1:1), electron donor-acceptor complexes ( $AD_1$ ,  $AD_2$  and  $AD_3$ ) have been investigated. The complexes concerned are n-butyl amine ( $D_1$ ) and cyclohexyl amine ( $D_2$ ) and phenyl hydrazine ( $D_3$ ) as electron donors with iron (III) ion as an electron acceptor (A) in methanol at 25°C. The values of formation constant ( $K^{AD}$ ), molar extinction coefficient ( $\epsilon^{AD}$ ), and absorption band energy of complexes were estimated. The ionization potential of the donors  $I^D$ , were calculated from the complex band energies. The kinetics of the above association and reverse reactions were studied and some kinetic parameters have been estimated.

**Keywords:** UV-Visible spectroscopy, charge transfer complex, Benesi-Hildebrand, Scott and Foster-Hammick-Wardley equations, formation constant, molar extinction coefficient.

**Introduction**

Many electronic spectrophotometric studies have been reported in the coordination chemistry field on complexes [1.2]. Generally, these complexes were obtained by using different electron donors with various organic [3.4], or metallic electron acceptors [5] in polar and non-polar solvents.

**Methods**

In this work, the formation of complexes were discussed and different parameters concerning their behaviour in methanol solution at 25°C were calculated. Usually the formation constants ( $\epsilon^{AD}$ ) and molar extinction coefficients ( $\epsilon^{AD}$ ) of complex were calculated using the equations of Benesi-Hildebrand, Scott and Foster-Hammick-Wardley14-16 (equations 1, 2 and 3) respectively by using the obtained experimental data:

$$[A_0] / A = 1 / K^{AD} \epsilon^{AD} [D_0] + 1 / \epsilon^{AD} \quad (1)$$

$$[D_0] [A_0] / A = [D_0] / \epsilon^{AD} + 1 / \epsilon^{AD} K^{AD} \quad (2)$$

$$A / [D_0] = - K^{AD} A + K^{AD} \epsilon^{AD} [A_0] \quad (3)$$

**Table 3:**

Values of formation constant ( $K^{AD}$ ), molar extinction coefficient ( $\epsilon^{AD}$ ), energy of the absorption band (E) and free energy change ( $\Delta G$ ) of the complex reaction in methanol at 25°C

	Complex $AD_1$	Complex $AD_2$	Complex $AD_3$
$K^{AD}$ (l/mol)	709.06	473	4246
$\epsilon^{AD}$ (l/mol.cm)	2150.70	693.02	2488
E (ev)	3.6483	3.0552	3.435
$\Delta E$ (ev)	$5.36 \times 10^{-3}$	$3.762 \times 10^{-3}$	$4.765 \times 10^{-3}$
$-\Delta G$ (kJ/mol)	16.37	15.56	20.53

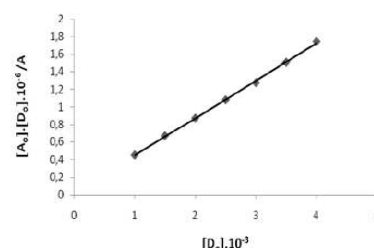


Fig. 1: Scott plots of charge transfer complex of phenylhydrazine with Fe(III) in methanol at 25 °C



**Table 4:** Results of the kinetic studies

Symbol	Complex	Order of reaction	Rate* constant $k_1 \cdot 10^3$	Rate* Constant $k_1 \cdot 10^6$	$t_{1/2}$ (min)
AD <sub>1</sub>	n-Buthylamine-Fe	0	2.70	3.81	5330
AD <sub>2</sub>	Cyclohexamine-Fe	1	4.03	8.52	1720
AD <sub>3</sub>	Phenylhydrazine-Fe	2	0,97	0.23	206

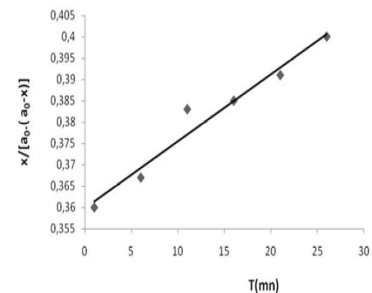


Fig. 2: Plot of second order reaction of phenylhydrazine-Fe complex

### Results

In this work, we investigated the kinetics of the equilibrium between n-butyl amine, cyclohexyl amine, phenylhydrazine and Ferric chloride and their complexes in methanol at 25°C.

For phenylhydrazine-Fe complex it is observed that equation (2) give the better straight line ( $R^2 = 0.999$ ) when  $[D_0].[A_0]/A$  was plotted against  $[D_0]$  with support the formation of charge transfer complex (Figure 1).

In this plot the slop and intercept equals  $1/\epsilon^{AD}$  and  $1/\epsilon^{AD} K^{AD}$  respectively. The formation constant and molar coefficients of the AD complex were calculated and shower in Table 3. The others coefficients are calculated from equation (1).

Table 3 gives the values of  $\epsilon^{AD}$  and  $K^{AD}$ , absorption band energy (E) and free energy ( $\Delta G$ ) of the complex reaction in methanol at different donor concentrations at 25°C. When equation (2) is used and plotted, the value  $K^{AD}$  and  $\epsilon^{AD}$  for the complex phenylhydrazine-Fe (AD<sub>3</sub>) complex obtained as shown in figure 1 and table 3.

The reaction of phenylhydrazine as an example with ferric ion is estimated to be a second order reaction as in Figure 2 and Table 4.

### Conclusion

Charge transfer complex (AD) was obtained and the colored reaction of phenylhydrazine with iron (III) was studied using Scott equation and the spectrometric UV-visible data. The obtained results indicate the formation of 1:1 charge transfer complex. Phenylhydrazine is one of the sensitive spectrophotometric reagents for iron. The molar absorptivity of the complex reaches  $2488 \text{ L.cm}^{-1}.\text{mol}^{-1}$ . The determination of some complexation parameters shows that the reaction is instantaneous. The association constant Fe (III)-phenylhydrazine and Gibbs free energy are  $4246 \text{ L.mol}^{-1}$  and  $-20.53 \text{ kJ.mol}^{-1}$ , respectively.

### Acknowledgments

This paper is dedicated to the memory of the late Professor Ali Hassoun Al-Taiar.

### References

- [1] Gopala Krishna D.; Devi C.K. World J.Pharmacy and Pharmaceutical Sci. 3 (2014) pp 1260-1266
- [2] Cano-Guzmán C.F.; et al. J Textile Sci Eng, 12 (2014) pp 2165-8064
- [3] Dehghani H.; Sahba R.; Afrooz M.; Mollaei H. Journal of the Chinese Chemical Society, 13 (2010) pp 690-695
- [4] Ishaad M.K.; Ahmad A.; Oves M. Spectrochim. Acta Part A, 8 (2010) pp 1059-1064
- [5] Sajid H.; Guzar J.; Qin Han I. J. appl. Sc, 6 (2008) pp 2480- 2485



## P23 - JCTC12

THEORETICAL INSIGHTS INTO THE FORMATION OF ASPIRIN / $\beta$ -CYCLODEXTRIN INCLUSION COMPLEX

Belgacem Bezzina<sup>a,b,\*</sup>, Djameleddine Khatmi<sup>a,c</sup>, Stephane Humbel<sup>c</sup>, Yanick Carisson<sup>c</sup>, Mohamed Tayeb Abed Ghars<sup>b</sup>, Toufik Chouchane<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, Department of Material Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics, and Material Sciences, University of 08 May 1945 Guelma, Algeria

<sup>b</sup>Research Centre In Industrial Technology (CRTI), P.O.BOX 64, Cheraga 16014, Algiers, Algeria

<sup>c</sup>Aix-Marseille Université, Centrale Marseille CNRS, iSm2 UMR 7313, 13397, Marseille, France.

\* [b.bezzina@crti.dz](mailto:b.bezzina@crti.dz), [bezzinabelgacem@yahoo.fr](mailto:bezzinabelgacem@yahoo.fr)

### Abstract

Intermolecular interactions strength in 1:1 inclusion complex of aspirin/ $\beta$ -cyclodextrin are quantified using Bader's quantum theory of atoms in molecules (QAIM) and NBO analysis with the hybrid functional B3LYP method at ccpv-dz basis sets. The QAIM analysis reveals the existence of three moderate O-H...O H-bonds in primary rim of  $\beta$ -cyclodextrin and several weak C-H...O intermolecular interactions in the general complex. These results were in line with those obtained by NBO method, where in two cases, B-cd plays a proton donor role, and in one case an acceptor role. Where these interactions contribute significantly to their stability.

**Keywords:** inclusion complex, QAIM analysis, NBO analysis, H-bonds.

### Introduction

The inclusion complex is one of the most commonly method tested and used for reduction of gastrointestinal irritation of aspirin [1-2]. This system is constituted of two molecules forming a single entity in which the molecule called "guest" is trapped in the cavity of another, called "host"; and the system is stabilized only by the non-covalent interactions [3]. A computational study on the complexation process between aspirin and  $\beta$ -cyclodextrin was used, involving AIM and NBO analysis in order to get a detailed insight into the nature and strength of this interactions.

### NBO and AIM calculations

The stabilization energy  $E^{(2)}$  related to the delocalization trend of electrons from a donor to acceptor orbitals, is calculated using the NBO method. However, by means of AIM2000 software, a topological analysis of electron density with Bader's theory of atoms in molecules (QAIM) is applied on the most stable complex obtained with B3LYP/ccpv-dz method.

### Conclusion

The lowest energy minimum structure obtained with quantum mechanics shows a deep inclusion in aspirin/ $\beta$ -CD complex. However, NBO analysis predicts the moderate H-bond interactions; the AIM method confirms this and it also visualizes clearly the formation of these H-bonds as well. They are one of the main driving forces leading to the actual inclusion complex.

### References

- [1] T. Loftsson, B.J. Olafsdottir, H. Fridriksdottir, S. Jonsdottir. Cyclodextrin complexations of NSAIDs: physicochemical characteristics. *Eur J Pharm Sci.* 1 (1993), pp 95–101.
- [2] T. Fukahori, M. Kondo, S. Nishikawa. Dynamic study of interaction between  $\beta$ -Cyclodextrin and aspirin by the ultrasonic relaxation method, *J. Phys. Chem. B.* 110 (2006), pp 4487-4491.
- [3] Dodziuk, H. *Cyclodextrins and their complexes: chemistry, analytical methods, applications.* John Wiley & Sons (2006).

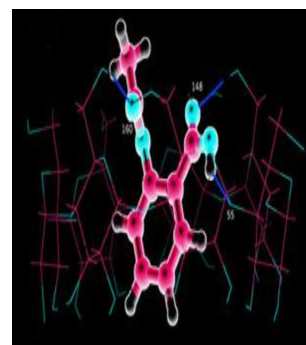


Fig.1: Most stable aspirin/ $\beta$ -CD complex

## P24 - JCTC12

## ETUDE DFT RELATIVISTE DES PROPRIETES MAGNETIQUES DE COMPLEXES BIMETALLIQUES DE L'URANIUM

Seddik Boucenina, Samir Meskaldji et Lotfi Belkhiri

URCHEMS, Département de Chimie, Université des Frères Mentouri - Constantine 1  
[seddikboucenina@gmail.com](mailto:seddikboucenina@gmail.com)

**Résumé**

Les matériaux moléculaires ayant des propriétés magnétiques et/ou optiques, suscitent un intérêt de plus en plus croissant tant au niveau expérimental que théorique. A l'échelle moléculaire, des complexes organo-polymétalliques d'éléments f, d'actinides par exemple, associés à des ligands fonctionnalisés pontant des centres paramagnétiques, se caractérisent par des super-échanges magnétiques de type Ferro ou antiferromagnétique. Ce concept de super-échange magnétique révélé par O. Kahn,<sup>1a</sup> a été l'un des précurseurs pour l'élaboration et la synthèse de nombreux matériaux moléculaires magnétiques qui sont devenus par la suite, à la base de la découverte des aimants moléculaires singuliers ou communément appelés SMM (Single Molecular Magnets).<sup>1b</sup>

L'étude théorique du comportement magnétique de tels systèmes est laborieuse, mais grâce au développement de la puissance informatique et des méthodes quantiques basés sur la DFT et l'approche *broken symmetry* (DFT-BS) de Noodleman et al.,<sup>2</sup> de nombreux travaux consacrés aux composés magnétiques diuranium essentiellement<sup>3</sup>, ont permis d'élucider et de rationaliser leur comportement ferro- ou antiferromagnétique. Ce comportement dépend du ligand pontant et de l'environnement structural régnant autour des centres métalliques.

Nos travaux portent justement sur l'étude théorique des propriétés magnétiques d'une série de complexes moléculaires d'éléments f pontés par des ligands fonctionnalisés tels que le kétimide<sup>4</sup>. Il est aussi intéressant de calculer les propriétés ESR/EPR et de déterminer le tenseur  $g_{e-e}$  et du  $\Delta g$ .

Les calculs réalisés au moyen de la méthode relativiste DFT/ZORA/TZP utilisant la fonctionnelle hybride B3LYP, moyennant le code ADF2014.02, ont révélé qu'au niveau méthodologique, la méthode DFT/ZORA/B3LYP/BS, reproduit correctement le comportement magnétique des composés étudiés. Nous avons pu mettre en évidence le rôle crucial des orbitales 5f dans les interactions métal-ligand et dans la communication électronique U(5f)-L-U(5f), à la base de l'échange magnétique. L'approche BS nous a permis de confirmer, à titre d'exemple, le caractère antiferromagnétique de l'interaction entre les deux centres  $U^V-U^V$  pour le complexe bis(kétimide), en accord avec l'expérience.

**Références**

- [1] Kahn, O., *Molecular Magnetism*, VCH, New York, 1993 (b) Mills D.P.; Moro F.; McMaster J.; van Slageren J.; Lewis W.; Blake, A.J.; Liddle, S.T., *Nat. Chem.* 2011, 2, 454-460.  
 [2] (a) Noodleman, L.J., *J. Chem. Phys.* 1981, 74, 5737-5743. (b) Noodleman, L.J.; Davidson E.R., *Chem. Phys.* 1986, 109, 131-143.  
 [3] (a) Lukens, W.W.; Walter, M. D., *Inorg. Chem.* 2010, 49, 4458-4465. (b) Rinehart, J.D.; Harris, T.D.; Kozimor, S.A.; Bartlett, B.M.; Long, J.R., *Inorg. Chem.* 2009, 48, 3382-3395.  
 [4] (a) S. Meskaldji, A. Belkhiri, L. Belkhiri, A. Boucekkine, M. Ephritikhine, *C. R. Chimie* 15 (2012) 184-191. (b) B. Teyar, L. Belkhiri, K. Costuas, A. Boucekkine, K. Meyer, *Inorg. Chem.* 2016, 55, 2870-2881.

## P25 - JCTC12

## ETUDE THEORIQUE DU MODE DE COORDINATION DES LIGANDS CHELATANTS DANS LES LANTHANIDES

Saad Bouchekioua<sup>a\*</sup>, Nadia Ouddai<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Chimie des Matériaux et des Vivants : Activité & Réactivité, Université Echahid Hamma Lakhdar El Oued, El oued, Algérie<sup>b</sup> Laboratoire de Chimie des Matériaux et des Vivants : Activité & Réactivité, Université Batna 1, Batna, Algérie\* [bouchekiouasaad@yahoo.com](mailto:bouchekiouasaad@yahoo.com)**Résumé**

Ce manuscrit est consacré à l'étude de mode de coordination, des propriétés électroniques et structurales, des propriétés catalytiques des complexes 'Amidinate Lanthanide'; l'influence des ligands entourant le métal sur la liaison métal-ligand a été abordée. Une étude comparative effectuée aux moyens de calculs quantiques en méthode DFT a été entreprise sur une série de complexes de terres rares. L'étude des structures électroniques et des propriétés catalytiques d'une famille originale de catalyseurs a permis d'identifier un bon catalyseur.

**Mots clés :** mode de coordination, Lanthanide, Amidinate, DFT,

**Introduction :**

La chimie des lanthanides s'est développée rapidement, ces dernières années. La compréhension de la liaison entre le lanthanide et les ligands est importante pour mieux comprendre la structure, les propriétés et la réactivité chimique des composés lanthanides [1,2]. Le développement de nouvelles méthodes théoriques a amélioré la recherche dans ce domaine. Ces méthodes peuvent être utilisées pour une meilleure compréhension des systèmes étudiés. Elles fournissent donc un lien précieux entre plusieurs concepts utilisés par les expérimentateurs. En raison des avantages au niveau des ressources informatiques, la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) s'est imposée comme une méthode de choix pour étudier la structure électronique des complexes de lanthanides.

**Systèmes étudiés :**

Les composés étudiés, dans le cadre de ce travail, comportent plus d'une centaine d'atomes, nécessitant le choix d'une méthode capable de traiter des systèmes de taille importante avec précision. De plus, il sera nécessaire, non seulement d'accéder à l'énergie d'un complexe, mais également de pouvoir optimiser sa géométrie sans contrainte de symétrie et calculer son spectre vibrationnel. C'est pourquoi nous avons opté pour la DFT, méthode largement validée pour l'étude des complexes de Lanthanides [3,4].

**Conclusion :**

Dans ce travail, nous avons présenté les résultats des calculs DFT sur une série de complexes d'organolanthanides amidinates de type  $\text{Ln}(\text{tBuNC}(\text{CH}_3)\text{NtBu})_3$ , Ln= La, Y et Lu.

L'étude des paramètres structuraux a montré que la longueur de la liaison métal-azote calculée est toujours surestimée par rapport aux valeurs expérimentales, pour les trois complexes.

**Références**

- [1] Frank T Edelman. Chem. Soc. Rev., 2009.  
 [2] Trifonov A A, Fedorova E A, Fukin G K, Bochkarev M N. J. Inorg. Chem., 2004, 7, 4396.  
 [3] Abraham F. Jalbouta, Mohammed Solimannejad. Journal of Molecular Structure (Theochem) , 2003, 640, 21.  
 [4] Ouddai .N, Bencharif.M, Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, 2004, 709, 109.

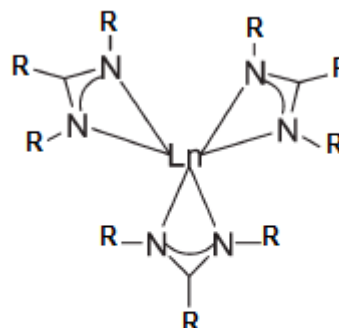


Fig. 1 : schéma représentatif des systèmes étudiés.

**P26 - JCTC12**  
**ETUDE DFT RELATIVISTE DE LA SPECIATION LANTHANIDES(III)/ACTINIDES(III)**

Amine Boudersa<sup>\*a</sup>, Lotfi Belkhiri<sup>a</sup> et Abdou Boucekkine<sup>c</sup>

<sup>a</sup> URCHEMS, Département de Chimie, Université des Frères Mentouri - Constantine 1

<sup>c</sup> Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS - Université de Rennes 1, 35042 Rennes Cedex, France  
[s.aboudersa27@yahoo.fr](mailto:s.aboudersa27@yahoo.fr)

### Résumé

L'objectif de notre travail est l'étude de systèmes moléculaires connus ou inconnus renfermant des ions lanthanides et actinides. Ceci nous permettra de développer de nouvelles techniques de calculs quantiques et d'analyser la différenciation Lanthanide(III)/Actinide(III), en tenant compte des effets physico-chimiques complexes. Nous avons mis en œuvre la méthode DFT/ZORA relativiste implémentée dans le logiciel ADF (Amsterdam Density Functional), technique qui s'est avérée depuis plusieurs années bien adaptée pour le traitement de gros systèmes de métaux lourds, tels les complexes f. Les calculs entrepris nous permettront de mieux comprendre la nature covalente et/ou ionique des liaisons métal-ligand mises en jeu et le rôle que peuvent jouer les orbitales 5f d'actinides.

**Mots clés** : Complexes f, différenciation Ln(III)/An(III), DFT/ZORA, effet solvant, COSMO

L'étude de la différenciation Lanthanide(III)/Actinide(III) constitue un enjeu important pour l'industrie nucléaire puisque l'objectif, est de comprendre les mécanismes régissant les interactions entre les ions trivalents f et les ligands sélectifs utilisés. En effet, le traitement des déchets nucléaires est continuellement confronté au problème majeur de la séparation des radioéléments. En dépit des progrès accomplis dans la description de leur structure électronique et la nature des liaisons métal-ligand, il faut admettre que la compréhension théorique des systèmes moléculaires d'élément f lourds, est encore très insuffisante. Le rôle que peut jouer les orbitales f dans la covalence des complexes d'actinides notamment, pose encore des questions.

### Références

- [1] Boucekkine A. and Belkhiri L. *f-Element Complexes*. In: Jan Reedijk and Kenneth Poepelmeier, editors. *Compre. Inorg. Chem. II, Vol 9*. Oxford: Elsevier; 2013. p. 277-319.
- [2] A. Hervé, Y. Bouzidi, J.-C. Berthet, L. Belkhiri, P. Thuéry, A. Boucekkine, and M. Ephritikhine, *Inorg. Chem.*, 2014, 53, 6995–7013
- [3] A. Hervé, Y. Bouzidi, J.-C. Berthet, L. Belkhiri, P. Thuéry, A. Boucekkine, and M. Ephritikhine, *Inorg. Chem.*, 2015, 54, 2474–2490.

## P27 - JCTC12

ETUDE PAR MODELISATION MOLECULAIRE DU COMPLEXE D'INCLUSION ISOTHIOCYANATE DE BENZYLE AVEC LA  $\beta$ -CYCLODEXTRINEAbdelaziz Bouhadiba<sup>a\*</sup>, Mouhamed Rahim, Imene Djilani, Leila Nouar

Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructures, université 08 mai 1945 Guelma

\*[bouhadibaaziz@yahoo.fr](mailto:bouhadibaaziz@yahoo.fr)**Résumé**

La complexation d'isothiocyanate de benzyle (ITCB) par la  $\beta$ -cyclodextrine ( $\beta$ -CD) a été analysée en utilisant la méthode PM6 et plusieurs combinaisons des calculs hybrides d'ONIOM2. L'objectif était d'élucider la structure électronique, les forces et les changements énergétiques qui accompagnent la complexation. Les énergies de complexation et d'interaction, les paramètres thermodynamiques, la réactivité chimique et la sélectivité des systèmes moléculaires ont été étudiés. Les résultats montrent que le processus d'inclusion est exothermique.

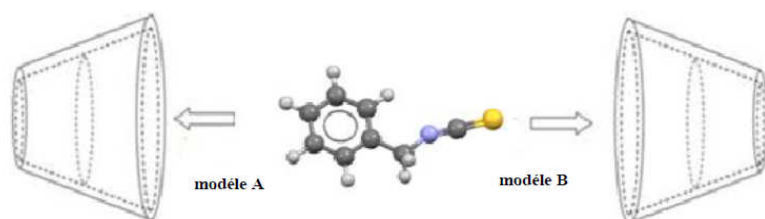
**Mots clés:**  $\beta$ -Cyclodextrine, isothiocyanate de benzyle (ITCB), PM6, DFT (méthode ONIOM).

**Introduction**

L'objectif de cette investigation est d'étudier la stabilité du complexe d'inclusion entre isothiocyanate de benzyle (ITCB) et la  $\beta$ -cyclodextrine.

**Construction des molécules**

Nous avons envisagé deux modèles d'inclusion pour s'introduire dans la cavité de la  $\beta$ -CD (**Figure 1**)



**Figure.1.** Système de coordonnées utilisé pour définir le processus d'inclusion de l'isothiocyanate de benzyle dans la  $\beta$ -CD (modèles A et B)

**Conclusion**

Au cours de ce travail, nous avons utilisé les méthodes de la chimie quantique pour modéliser des complexes d'inclusion. La méthodologie adoptée à travers les approches PM6, ONIOM2 nous a permis de rationaliser la structure électronique et la géométrie des complexes ITCB/ $\beta$ -CD.

Les résultats confirment que l'énergie de complexation de modèle A est nettement plus favorable que celle de modèle B.

**Références**

- [1] Wenzhao Li, Xiaoyu Liu, Qingfeng Yang, Ning Zhang, Yideng Du, Huaping Zhu Food Chemistry 184 (2015) 99–104.
- [2] Liu, L., Guo, Q.-X.: Use of quantum chemical methods to study cyclodextrin chemistry. J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem. 50, 95–103 (2004).
- [3] Barbiric, D.J.; Castro, E.A.; de Rossi, R.H.; J. Mol. Struct. (Theochem) (2000) 532-171.
- [4] Karelson, M., Lobanov, V.S., Katritzky, R. Chem Rev 96, 1027–1043 (1996).

## P28- JCTC12

## SPECTROSCOPIE INFRAROUGE ET RAMAN, STRUCTURE CRISTALLINE DU BIS(4-ACETYLPHENYL) SELENIDE: CONFRONTATION EXPERIENCE(DIFFRACTION RX) - THEORIE (DFT)

H. Bouraoui<sup>a\*</sup>, A. Boudjada<sup>a</sup>, J. Meinel<sup>b</sup><sup>a</sup> *Laboratoire de Cristallographie, Université Mentouri, Constantine, Algérie.*<sup>b</sup> *Institut de chimie, université de Rennes 1, LCSIM UMR 6511, 35042 Rennes, France*[lehazem@yahoo.fr](mailto:lehazem@yahoo.fr)**Résumé**

Ce travail concerne une étude comparative de la géométrie moléculaire de composés polycycliques, organosélénés établies à partir de l'expérience (diffraction des rayons X) dans notre cas il sera question du Bis(4-acetylphenyl) selenide  $C_{16}H_{14}O_2Se$ , et celle calculée par la mécanique quantique en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

La structure cristalline du Bis(4-acetylphenyl) sélénide  $C_{16}H_{14}O_2Se$  a été déterminée par la diffraction des rayons X à la température ambiante. Ce composé cristallise dans le système monoclinique ( $P2_1/c$ ,  $Z=4$ ). L'empilement moléculaire suivant l'axe cristallographique  $a$  est dicté par les forces d'interaction du type Car-Car...O.

La conformation moléculaire du Bis(4-acetylphenyl) sélénide a été ainsi calculée par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dans le cas de la molécule isolée avec les fonctionnelles MPW1PW91 et B3LYP et des bases suffisamment étendues (6-311G, 6-31G, 6-311G(d), 6-31G(d,p), 6-311G(d,p) et Lanl2DZ pour les molécules organiques en s'aidant de la chaîne de programmes GAUSSIAN03. Le calcul de la conformation géométrique optimisée donne un bon accord pour les angles de liaison de l'ordre de 0.79% pour chacune des deux fonctionnelles (MPW1PW91 et B3LYP) avec des bases suffisamment étendues Lanl2DZ et 6-311G avec les résultats expérimentaux. Un écart assez significatif de l'ordre de 4.3% dans les longueurs de liaison est observé entre les résultats des calculs théoriques et de la diffraction des rayons X.

Dans ce travail il est présenté aussi une étude des modes internes de Bis(4-acetylphenyl) selenide en comparant les résultats expérimentaux spectroscopiques infrarouge et Raman avec les calculs de la chimie quantique (DFT).

**Mots clés :** Spectroscopie infrarouge et Raman, Structure Cristalline, diffraction RX, DFT.

## P29 - JCTC12

## DFT STUDIES OF COMPLEXES OF COPPER(II), MANGANESE(II), AND NICKEL(II) WITH DERIVED BENZOXAZOLE LIGANDS

Assia Bourouina<sup>a</sup>, Afaf Bouchoucha<sup>b</sup>, Safia Djebbar<sup>b</sup>, Maâmmar Rekhis<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Theoretical Chemistry and computational photonics Laboratory, Faculty of Chemistry, Houari Boumediene Sciences and Technology University, BP 32 El Alia, 16111 Algiers, Algeria

<sup>b</sup>Hydrometallurgy and Molecular Inorganic Chemistry Laboratory, Faculty of Chemistry, Houari Boumediene Sciences and Technology University, BP 32 El Alia, 16111 Algiers, Algeria.

[bourouinaassia@gmail.com](mailto:bourouinaassia@gmail.com)

### Abstract

The family of the benzoxazole and its derivatives are ligands of great interest within the area of biological and pharmacological activities involving antibacterial, antifungal and anticancer activities. These mixed ligands possess heteroatoms (N, O) and present an enough rich cavity of electrons which could accept metallic ions.

**Keywords:** DFT, Derived benzoxazole ligand, Metal complexes

### Introduction

Most of the studies recently described in the literature for this type of chelates are intended for pharmaceutical uses and have been addressed for the complexation with bivalent metal ions ( $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ .....). However, increased activities have been described for some benzoxazole metal-chelates and have an important effect on the antimicrobial and antitumor activities. In these area new derived benzoxazole ligands and their transition metal complexes with manganese (II), nickel (II) and copper (II) have been synthesized and characterized. The functional density theory (DFT) calculations were performed in order to study the geometry of the most stable ground state, correlate the theoretical and experimental results.

### Conclusion

The total energy, the bond length, bond angle and charges on the atoms have been calculated and confirmed the distorted octahedral geometry of the investigated complexes.

### References

Afaf Bouchoucha, Achour Terbouche, Assia Bourouina and Safia Djebbar *Journal of Inorganica Chimica Acta*. doi:org/10.1016/j.ica.2014.04.016



**P30 - JCTC12**  
**THEORETICAL INVESTIGATION OF SQUARE PLANAR NICKEL (II) THIOSEMICARBAZONES COMPLEXES**

Wahiba Boussebbat<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, Batna, Algérie

\* [boussebbat.wahiba@gmail.com](mailto:boussebbat.wahiba@gmail.com)

### Abstract

Our theoretical study by using DFT calculations at PBE/TZP level on nickel (II) complexes with thiosemicarbazone derivatives:  $[Ni(btsc)_2]$ ,  $[Ni(Ph\ btsc)_2]$ ,  $[Ni(Ph\ p\text{-}Clbtsc)_2]$  has been performed with the aim to evaluate the effects of the substitution; at N1 position (-Ph) or on the benzene ring (-p-Cl); on quantum-chemical descriptors. The results indicate that the unsubstituted complex  $[Ni(btsc)_2]$  is harder and less reactive than the two other complexes. The  $[Ni(Ph\ p\text{-}Clbtsc)_2]$  complex is the most reactive and present a higher capacity to attract electrons.

**Keywords:** Thiosemicarbazone, Ni (II) complexes, DFT

### Introduction

Thiosemicarbazones(tsc) and their metal complexes have been the subject of great interest for several years due to their beneficial applications in the chemistry and biology [1,2]. Our theoretical study at DFT/PBE/TZP level on the nickel (II) complexes with thiosemicarbazone derivatives:  $[Ni(btsc)_2]$ ,  $[Ni(Ph\ btsc)_2]$ ,  $[Ni(Ph\ p\text{-}Clbtsc)_2]$ ; *b*=benzaldehyde, *Ph*=phenyl; has been performed in order to analyze the effects of the substitution on the quantum-chemical descriptors: global hardness ( $\eta$ ), chemical potential ( $\mu$ ) and electrophilicity index ( $\omega$ ).

### DFT global chemical reactivity descriptors

Theoretical properties are computed as follows:

$$\eta = (HOMO - LUMO) / 2, \quad \mu = (HOMO + LUMO) / 2, \quad \omega = \mu^2 / 2\eta \quad (1)$$

$\eta$ : global hardness,  $\mu$ : chemical potential,  $\omega$ : electrophilicity

All complexes present a significant gap ( $>1\text{eV}$ ) which considered as a good criterion of stability. The results indicate that the unsubstituted complex  $[Ni(btsc)_2]$  is harder and less reactive than the two other complexes:  $\eta = 0.71, 0.68, 0.68\text{ eV}$  respectively. The  $[Ni(Ph\ p\text{-}Clbtsc)_2]$  complex is the most reactive and present a higher capacity to attract electrons  $\omega = 11.73, 10.65, 9.70\text{ eV}$  respectively.

### Conclusion

The substitution by *-Ph* and/or *-p-Cl* modified slightly the global reactivity properties.

### Acknowledgments

Authors thank the Calculation Center(Central Library) of the University Hadj Lakhdar-Batna1.

### References

- [1] S. Anitha, J. Karthikeyan, A.N. Shetty, Indian Journal of Chemistry, 52A (2013) pp 45-50.
- [2] F. Bisceglie, G.D. Monte, P. Tarasconi, G. Pelosi, Inorg. Chim. Acta, 434 (2015) pp 143-149.



Fig. 1 : Optimized structures of tsc complexes.

## P31 - JCTC12

## RELAXED ENERGETIC MAPS OF SUCROSE: A AM1 STUDY

A. Boutasta<sup>a</sup>, A. Benosman<sup>a</sup>, N. Bekhti<sup>b</sup> et M. Sekkal<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de physique théorique LPT, Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen, Algérie<sup>b</sup> Laboratoire L2MSM -B.P 89 SBA 22000, Algérie.\* [aboutasta@gmail.com](mailto:aboutasta@gmail.com)**Résumé**

Les glucides constituent l'un des types de biomolécules les plus abondants, ils sont très fréquents en toute matière vivante. Leur intérêt se caractérise dans leurs propriétés structurales et leurs capacités de stockage d'énergie. Les méthodes de la chimie computationnelle sont devenues extrêmement importantes dans l'analyse conformationnelle des molécules organiques et notamment des glucides complexes. Ces deux dernières décennies, de nombreux travaux de recherche concernant l'étude conformationnelle des glucides ont fait leur apparition, la plupart d'entre eux utilisaient les méthodes classiques pour explorer la structure des saccharides, comme la mécanique moléculaire. L'objectif consiste principalement à la réalisation des cartes conformationnelles et l'exploration de l'espace énergétique du sucrose.

**Mots clés:** Sucrose, cartes conformationnelles, Hartree Fock.

**Méthode et modèle**

Les paramètres géométriques les plus importants pour définir la structure tridimensionnelle du disaccharide sont les angles dièdres de la liaison glycosidique :  $\Phi$  et  $\Psi$  [1,2]. Cette étude s'inscrit dans le cadre d'une prospection structurale et énergétique afin de caractériser et de déterminer toutes les conformations possibles et d'en déterminer celles de plus basse énergie. Les deux angles de torsion glycosidiques qui définissent la géométrie de la liaison sont illustrés dans la figure 01.

Les cartes énergétiques conformationnelles ont été construites, comme suggéré par French et al.[3], par interpolation d'un ensemble de données comprenant 144 valeurs énergétiques, ces dernières ont été générées en faisant varier chaque angle dièdre par un pas de 30 degrés. Une fois l'ensemble des deux valeurs spécifiques des angles  $\Phi$  et  $\Psi$  fixés, ils sont conservés, tout en optimisant l'ensemble des autres paramètres géométriques.

Dans ce travail, on a fait les calculs AM1 en deux parties, dans le formalisme RHF (Restricted Hartree-Fock) et UHF [4] ou ROHF (Unrestricted Hartree-Fock) [5]. Ces calculs ont été effectués, en utilisant le programme Gaussian 03 (version 6.0, révision B.03) [6], et les résultats ont été examinés à l'aide du logiciel Gaussview. Les cartes ont été réalisées à l'aide du logiciel Surfer [7].

**Références**

- [1] Auteurs, journal, volume (année) pp xx-xx.
- [2] Auteurs, *Titre du livre*, Éditeur, année.
- [1] Lii J.H.; Ma B.Y.; Allinger N.L. J. Comput. Chem. (1999), 20, 1593.
- [2] Tran V.; Bulèon A.; Imbert A.; Pérez S. Biopolymers (1989), 28, 679.
- [3] French A. D.; Dowd M. K. J. Mol. Struct. (Theochem) (1993), 286, 183.
- [4] R. McWeeny and G. Dierksen. J. Chem. Phys.(1968), 49 :4852 .
- [5] A. Pople and R. K. Nesbet. J. Chem. Phys. (1954), 22 :571 .
- [6] M. J. Frisch et al.; (Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003).
- [7] Surface mapping system, copyright 1993-2002, Golden Software, Inc.

**P32 - JCTC12****DFT STUDIES ON VIBRATIONAL SPECTRA, HOMO–LUMO AND NBO OF TETRODOTOXINE**A. Boutasta<sup>a</sup> A. Benosman<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de physique théorique LPT, Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen, Algérie*  
\* [aboutasta@gmail.com](mailto:aboutasta@gmail.com)

**Abstract**

In the present study, the FT-IR spectra of tetrodotoxine have been recorded in the region 4000–450 cm<sup>-1</sup>. The fundamental modes of vibrational frequencies of tetrodotoxine are assigned. Theoretical information on the optimized geometry, harmonic vibrational frequencies, infrared and Raman intensities were obtained by means of ab initio Hartree–Fock (HF) and density functional theory (DFT) gradient calculations with complete relaxation in the potential energy surface using 6-31G(d,p) basis set. The vibrational frequencies which were determined experimentally from the spectral data are compared with those obtained theoretically from ab initio and DFT calculations. A close agreement was achieved between the observed and calculated frequencies by refinement of the scale factors. The infrared and Raman spectra were also predicted from the calculated intensities. The calculated HOMO–LUMO energy gap reveals that charge transfer occurs within the molecule. Stability of the molecule arising from hyper conjugative interactions, charge delocalization have been analyzed using natural bond orbitals (NBO) analysis. Unambiguous vibrational assignment of all the fundamentals was made using the total energy distribution (TED).

**Keywords :** Tetrodotoxine, HUMO, LUMO, Hartree Fock, DFT and FT-IR.

## P33 - JCTC12

ETUDE THÉORIQUE PAR LES MÉTHODES QUANTIQUES PM7 et ONIOM2 DU COMPLEXE D'INCLUSION N-NITROSO-N-(2-CHLOROETHYL)-N'-SULFAMOYLPROLinate/ $\beta$ -CDAmel Bouzitouna<sup>a\*</sup>, Ouassila Attoui Yahia<sup>b</sup>, Djameleddine Khatmi<sup>c</sup><sup>a</sup> Université Badji-Mokhtar Annaba, Algeria<sup>b</sup> Laboratoire de Chimie organique appliquée, Université Badji-Mokhtar Annaba, Algeria<sup>c</sup> Laboratoire de Chimie Computationnelle et Nanostructure LCCN, Université 8 Mai 1945 Guelma, Algérie\* [am.bouzitouna@gmail.com](mailto:am.bouzitouna@gmail.com)**Résumé**

En nous basant sur des résultats expérimentaux qui montrent une inclusion de stoechiométrie 1 :1, nous avons fait l'étude computationnelle du processus d'inclusion de N-Nitroso-N-(2-chloroethyl)-N'-sulfamoylprolinate dans la  $\beta$ -cyclodextrine en utilisant la méthode PM7 et plusieurs combinaisons des calculs hybrides d'ONIOM2.

L'objectif était d'élucider la structure électronique, les forces et les changements énergétiques qui accompagnent la complexation. Les résultats obtenus, avec les différentes approches, confirment que l'orientation la plus favorable correspond à celle où la molécule invitée est totalement séquestrée dans la cavité du macrocycle du modèle A avec la formation de trois liaisons hydrogènes.

**Mots clés :**  $\beta$ -Cyclodextrine , ONIOM, PM7.

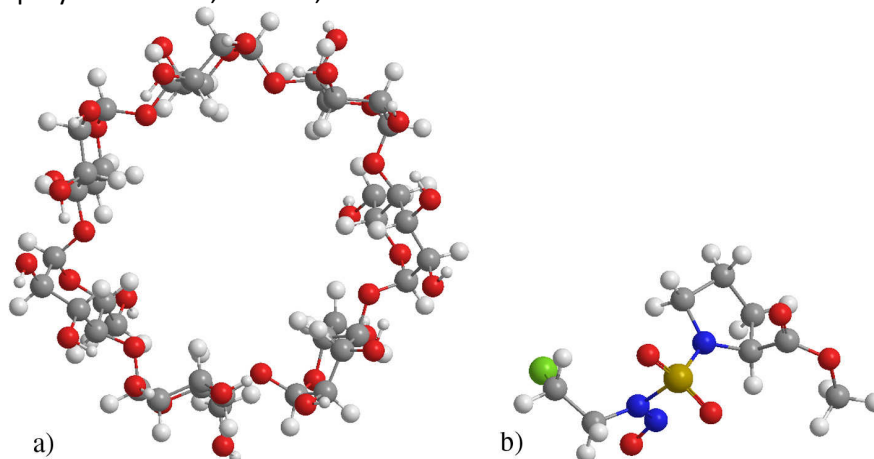


Fig.1 : Structures géométriques de a)  $\beta$ -cyclodextrine, b) du N-Nitroso-N-(2-chloroethyl)-N'-sulfamoylprolinate, optimisées par la méthode B3LYP 6-31G(d)

**Références**

- [1] N. Dhaoui, M. Fatfat, M. Abdaoui, V. Barragan-Montero, *Lett. Org. Chem.* 6 (2009) 37–40.  
 [2] M. Kadri, N. Dhaoui, M. Abdaoui, J.Y. Winum, J.L. Montero, *Eur. J. Med. Chem.* 39 (2004) 79–84.  
 [3] M. Arivazhagan, D.A. Rexalin, *Spectrochim. Acta. A. Mol. Biomol. Spectrosc.* 104 (2013) 451–460.

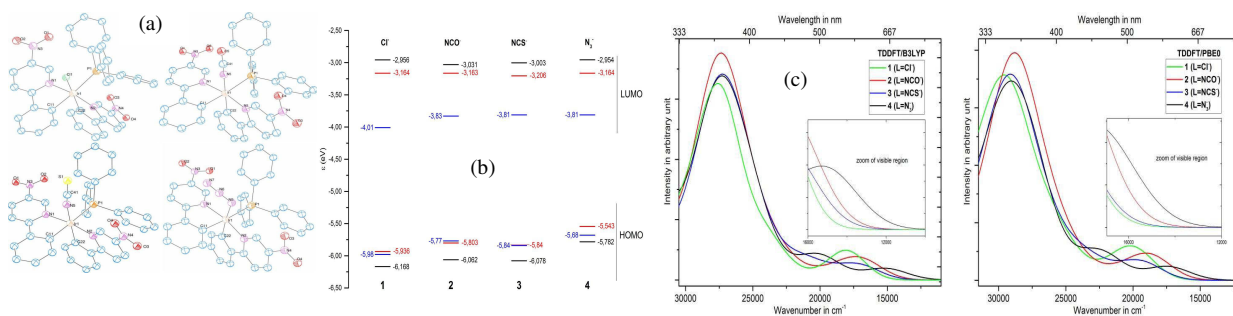
## P34 - JCTC12

## THEORETICAL STUDY OF GEOMETRIC STRUCTURES AND ELECTRONIC ABSORPTION SPECTRA OF IRIIDIUM(III) COMPLEXES BASED ON 2-PHENYL-5-NITROPYRIDYL WITH DIFFERENT ANCILLARY LIGANDS

Houari Brahim<sup>a</sup>, Boumediene Haddad<sup>a</sup>, Mohamed Boukabene<sup>a</sup>, Safia Brahim<sup>a,b</sup>, Berkane Ariche<sup>a</sup><sup>a</sup>Department of Chemistry, DrMoulayTahar University of Saida, Saida, 20000, Algeria<sup>b</sup>Laboratoire de modélisation et de méthodes de calcul, Université de Saida, Saida, 20000, Algeria

## Abstract

In this work, the influence of different ancillary ligands on geometric structures, frontier molecular orbitals character, gap energy and electronic absorption spectra of  $[\text{Ir}(5\text{-NO}_2\text{-ppy})_2(\text{PPh}_3)(\text{L})]$  ( $\text{L} = \text{Cl}^-$  (1),  $\text{NCO}^-$  (2),  $\text{NCS}^-$  (3) and  $\text{N}_3^-$  (4)) has been theoretically studied by density functional theory and time-dependent density functional theory calculations with B3LYP and PBE0 hybrid functionals. Calculated geometric parameters of studied complexes are in good agreement with the available experimental values. The theoretical absorption spectra reproduce the main properties of the experimental spectra. Both energy gaps and absorption spectra depend on the composition of HOMO Orbital,  $\pi$ -donor orbitals reduce the energy gaps and red shift the absorption spectra while  $\pi$ -acceptor orbitals increase the energy gaps and blue shift the absorption spectra. All the spectra are characterized by mixed MLCT/LLCT states in the visible energy domain.



**Scheme 1.** Optimized structures of studied complexes (**1-4**)<sup>(a)</sup>, HOMO and LUMO energy levels<sup>(b)</sup> and The superposition of **1-4** calculated absorption spectra with zoom of the visible region in inset<sup>(c)</sup>.

## Conclusion

The shape of the theoretical spectra of **1-4** is similar to the experimental one. The PBE0 blue shifts the spectra giving a better agreement with the experimental data than B3LYP.

The substitution does not substantially affect the UV-visible spectra; the theoretical absorption spectra of **1-4** are almost similar in ultraviolet region and slightly different in the visible region. The complex **4** with HOMO composed mainly of  $\pi$ -donor orbital, red shifts the spectra while the complex **1** with HOMO dominated by  $\pi$ -acceptor orbitals shifts it to the blue. The four iridium complexes begin to absorb according to the energy gaps order. The studied complexes are characterized by low-lying singlet and triplet states of mixed character mainly dominated by MLCT and LLCT character. The first low-lying triplet states of mixed character MLCT/LLCT should give to the system the phosphorescent properties. For more interpretation, advanced calculations and a detailed investigation on the structural and electronic properties of the low-lying spin-orbit states is necessary. This will be the subject of a future project.

**Keywords:** Iridium complex; Absorption spectra; Excited state; Ancillary ligands; TD-DFT

## References

- [1] [16] H. Brahim, C. Daniel, Computational and Theoretical Chemistry, 1040-1041 (2014) 219-229.  
 [2] H. Brahim, B. Haddad, M. Boukabene, S. Brahim, B. Ariche, Computational and Theoretical Chemistry, In Press, Accepted Manuscript <http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2016.12.016>.

## P35 - JCTC12

## ETUDE THEORIQUE DES STRUCTURES, DES PROPRIETES ELECTRONIQUES ET DU SPECTRE D'ABSORPTION ELECTRONIQUE DU COMPLEXE DE CUIVRE AVEC DES LIGANDS TRIPODES : EFFETS DU COUPLAGE SPIN-ORBITE

Houari Brahim<sup>a,\*</sup>, Safia Brahim<sup>b</sup>

<sup>a,b</sup>Département de chimie, Université Dr Tahar Moulay, Saida, Algérie.

\* [brahim.h@outlook.com](mailto:brahim.h@outlook.com)

### Résumé

Les structures géométriques, les orbitales frontières et les spectres d'absorption électronique d'une série de complexes de cuivre Cu(I) avec des ligands tripodes (Fig. 1) ont été étudiés avec les méthodes DFT et TD-DFT. Les principaux paramètres géométriques calculés agrément avec les données expérimentales. L'orbitales occupées sont composées majoritairement des orbitales (dCu + nI) tandis que les orbitales LUMOs sont délocalisées principalement sur les pyridines. L'allure du spectre d'absorption est similaire à celle du spectre expérimental. Les bandes observées ont été assignées sur la base des états excités 'spin-orbite'. L'interprétation a été effectuée sur la base de la composition des états spin-orbite à partir de l'éclatement des états excités triplets les plus bas.

**Mots clés:** Cuivre, complexe, spectre d'absorption, spin-orbite, TD-DFT, UV-visible.

### Introduction

Récemment une nouvelle classe de complexe de cuivre Cu(I) avec des ligands tripodes a été synthétisée et caractérisée [1]. L'objectif de ce travail est l'étude des structures géométriques, des orbitales frontières et des spectres d'absorption électroniques en introduisant les effets du couplage spin-orbite avec les méthodes DFT et TD-DFT. Les résultats obtenus ont été comparés avec l'expérience.

### Méthodes de calculs & principaux résultats

Les structures géométriques ont été optimisées au niveau DFT/PBE0 et DFT/B3LYP avec la base TZP avec contrainte de symétrie  $C_{3v}$ . Les effets relativistes ont été introduits avec l'approximation ZORA. Le couplage spin-orbite a été pris en compte avec une méthode « perturbative ». Tous les calculs ont été réalisés avec ADF. Les paramètres géométriques calculés avec B3LYP et PBE0 sont proches des valeurs structures X, particulièrement ceux obtenus avec PBE0. L'orbitale HOMO est composée des orbitales dxz, yz du cuivre et de l'orbitale P de l'iode. L'orbitale LUMO est délocalisée sur les trois pyridines. Le spectre d'absorption calculé avec PBE0 reproduit les principales caractéristiques du spectre expérimental. La fonctionnelle B3LYP décale le spectre PBE0 vers le rouge. La bande faible observée dans le visible a été assignée à l'absorption de  $Cu + nI \rightarrow \pi_{py3}^*$  de caractère MLCT. Le premier état SO calculé à  $20130 \text{ cm}^{-1}$  correspond à un état excité triplet  $A_1(96\% a^3A_2)$  avec une force d'oscillateur moyenne de  $f=0.0003$ . Le premier état SO de symétrie E, avec un grand degré de mixité entre états excités singulets et triplets, a été calculé à  $26950 \text{ cm}^{-1}$ , correspondant à E (81%  $c^3E$ , 8%  $c^1E$ ) avec  $f=0.0016$ . La bande intense observée dans la région UV a été assignée à un état LLCT pur, qui correspond à la transition  $\pi_{py3} \rightarrow \pi_{py3}^*$ .

### Références

[1] Timo Gneuß, Markus J. Leitzl, Lars H. Finger, Nicholas Rau, aHartmut Yersin, Dalton Transactions, 44 (2015) 8506–8520.

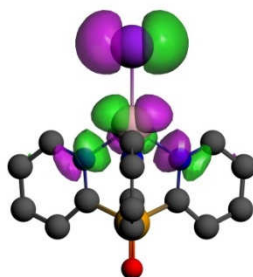


Fig. 1 : Structure géométrique du complexe de cuivre.



## P36 - JCTC12

## ETUDE THEORIQUE DES SPECTRES D'ABSORPTION ELECTRONIQUE DES COMPLEXES DE PALLADIUM (II)

Safia Brahim<sup>a\*</sup>, Houari Brahim<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de modélisation et méthodes de calculs, Tahar Moulay, Saida, Algérie.\* [safi\\_mah@hotmail.fr](mailto:safi_mah@hotmail.fr)**Résumé**

Parmi les méthodes capables de décrire les états excités des molécules, la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TDDFT) est très probablement celle la plus utilisée actuellement pour l'étude des molécules de tailles moyenne et grande. Nous nous limitons ici à l'application de la TDDFT pour l'étude des spectres d'absorption électronique des complexes de métaux de transition. La modélisation concerne les propriétés photophysique et photochimique des complexes de Palladium de forme  $[Pd(dppf)L]$  dppf = 1,1'-bis(diphénylphosphino)ferrocène, L= p- $XC_6H_4SO_2NCS_2$  (X=CH<sub>3</sub>, Cl et Br), dont l'intérêt vient notamment de leur utilisation comme pigments photosensibles dans les cellules photovoltaïques de Grätzel [1]. Les résultats obtenus montrent que les calculs, au niveau TD-DFT/PBE1PBE/6-31G(d,p), reproduisent les résultats expérimentaux mieux que ceux obtenus avec CAM-B3LYP. L'analyse des spectres calculés indique que la nature des transitions électroniques est caractérisée par un caractère mixte MC/MLCT/LMCT/LLCT entre 220-350nm.

**Mots clés:** Palladium, TD-DFT, métaux de transition

**Introduction**

Le développement de sources d'énergie renouvelables suscite l'attention croissante de la communauté scientifique et industrielle. Afin d'arriver à synthétiser des cellules photovoltaïques avec un coefficient de conversion d'énergie important et un bon rendement [2], les complexes de métaux de transition ont fait l'objet de plusieurs investigations expérimentales. En se basant sur les anciens travaux effectués [3,4], Singh et al ont synthétisé et caractérisé les complexes de forme Pd(dppf)L par la spectroscopie IR, 1H, 13C, 31P NMR et UV-Vis, voltampérométrie cyclique et RX [1].

**Détails de calculs**

L'objectif de ce travail est l'étude théorique de la spectroscopie électronique des complexes de métaux de transition (le Palladium dans notre cas). Avant d'entamer l'étude du spectre théorique, nous avons effectué des calculs d'optimisation géométrique au niveau DFT/CAM-B3LYP/PBE1PBE et les bases 6-31G(d,p) et LANL2DZ. Les structures géométriques optimisées, la nature des orbitales frontières de ces structures ont été analysées et comparées aux structures expérimentales. Afin d'étudier les spectres d'absorption électronique, nous avons utilisé la méthode TD-DFT. Nous avons étudié les états excités les plus bas de ces trois complexes. L'intensité des transitions électroniques permises ont été calculées à travers les forces d'oscillateurs correspondantes.

**Conclusion**

La structure géométriques, les orbitales moléculaires frontières et les spectres d'absorption des complexes 1-3 ont été calculés en utilisant la DFT et la TD-DFT. Les valeurs des paramètres structuraux calculés sont proches de l'expérience. La PBE0 donne de meilleurs résultats comparée à CAM-B3LYP.

**Références**

- [1] S. K. Singh, R. Chauhan, K. Diwan, M. G. B. Drew, L. Bahadur, N. Singh, *Org. Chem.*, 745(2013), 190-200.
- [2] Gratzel, M. *Nature*. 414(2001), 338-344.
- [3] E. Geary, L. Yellowlees, L. Jack, I. Oswald, S. Parsons, N. Hirata, J. Durrant, N. Robertson, *Inorg. Chem.*, 44(2005), 242-250.
- [4] A. Islam, H. Sugihara, K. Hara, L. Singh, R. Katoh, M. Yanagida, Y. Takahashi, S. Murata, *Photochem. Photobiol.*, 145(2001), 135-141.

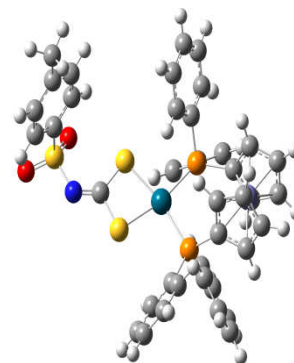


Fig.1 Structure du complexe 1



## P37 - JCTC12

**ETUDE THEORIQUE EN PHASE GAZEUSE ET EN SOLVANT PAR LA METHODE D.F.T/B3LYP  
6-31G DE LA REGIO ET STEREO-SELECTIVITE DE LA  
REACTION DE CYCLOADDITION INTERMOLECULAIRE [3+2]**

Fouad Chafaa<sup>a</sup>, Djamila Hellala<sup>a</sup>, Nacereddine Abdelmalek Khorief<sup>a,b</sup>, Abdelhafid Djerourou<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Synthèse Organique et Biocatalyse, Department de Chimie, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar Annaba, BP 12 23000, Annaba, Algérie

<sup>b</sup> Département de Physique et Chimie, école Normal Supérieur d'éducation technologique, Azzaba-Skikda Algérie

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

### Résumé

Dans ce travail consacré à la chimie organique computationnelle, nous avons présenté une étude théorique approfondie sur les réactions de cycloaddition 1, 3-dipolaire entre une nitrone et un alcène, pour comprendre la stéréosélectivité et la régiosélectivité observée expérimentalement dans ces réactions. L'étude théorique a été menée à l'aide des approches quantiques suivantes : théorie de l'état de transition (TST)- Théorie des orbitales moléculaires frontières (FMO)- Indices de réactivité dérivant de la DFT conceptuelle. Les calculs ont été effectués avec le programme Gaussian 09W en utilisant la méthode B3LYP/6-31G(d) . Les résultats obtenus sont en accord avec les constatations expérimentales.

**Mots clés :** calculs DFT, nitrones, isoxazolidines, stéréosélectivité, régiosélectivité.

### Introduction

La chimie organique théorique a connu un développement important au cours des dernières années au niveau des méthodes de calcul quantiques utilisées. Par conséquent, l'utilisation des théories quantiques [1] dans l'étude des réactions chimiques, et plus particulièrement, dans la synthèse d'hétérocycles par les réactions de cycloaddition, est considérée comme l'un des thèmes les plus étudiés par les chercheurs en utilisant des méthodes de plus en plus avancées pour l'obtention de modèles qui puissent prédire et comprendre le processus réactionnel. Dans ce contexte, on propose une étude théorique de la régio et stéréo-sélectivité de la réaction de cycloaddition 1, 3-dipolaire (CD-1, 3) entre la *N*-méthyl-*C*-diéthoxyphosphorylnitronne et la *N*-arylacrylamide [2] en utilisant la méthode DFT [3] avec la fonctionnelle B3LYP et la base 6-31G(d).

### Conclusion

L'analyse des énergies d'activation indique que le produit issu de l'approche ortho-endo est favorisé cinétiquement. L'exothermicité élevée de la réaction montre qu'elle est seulement sous contrôle cinétique. Les résultats obtenus sont en accord avec les données expérimentales. L'inclusion de l'effet du solvant ne change pas les résultats de l'étude obtenus en phase gazeuse, mais on note une légère augmentation des énergies d'activation à cause de la solvation élevée des réactifs par rapport aux états de transition et aux produits.

### Références

- [1] I. Fleming, J. Wiley & Sons, New York, 1975.  
 [2] K. Kamil, J. Balzarini, D. G. Piotrowska, *Bio. Org. Med. Chem*, 21 (2013) 1097–1108.  
 [3] R. G. Pearson. *Inorg. Chem*, 27 (1988)734.

## P38 - JCTC12

## ANALYSE THEORIQUE DE LA REGIO-SELECTIVITE DE LA CYCLOADDITION DIPOLAIRE 1,3-DES NITRONES AVEC 3,3-METHYLENE-5,5-DIMETHYL 2-PYRROLIDINONE. UNE ETUDE BASEE SUR LES INDICES DE REACTIVITE DERIVES DE LA DFT CONCEPTUELLE

Imad Eddine Charif<sup>a</sup>, Wafaa Benchouk<sup>a</sup>, Sidi Mohamed Mekelleche<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Thermodynamique Appliquée et Modélisation Moléculaire, Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université de Tlemcen, BP 119, 13000, Tlemcen, Algeria.[i\\_charif@yahoo.fr](mailto:i_charif@yahoo.fr)

## Résumé

La régiosélectivité de la cycloaddition dipolaire-1,3 (13DC) [1,2] des diaryles nitrones **1** avec le dipolaophile 3,3-méthylène-5,5-diméthyl 2-pyrrolidinone **2** (figure 1) a été étudiée et rationalisée en utilisant les indices électrophilie/nucléophilie dérivés de la DFT conceptuelle [3,4].

L'électrophilie  $\omega$  et nucléophilie N globale des réactifs montre que cette réaction 13DC présente un caractère polaire important. L'analyse des indices de réactivité locaux ( $\omega_k$  et  $N_k$ ) montre que l'interaction la plus favorisée aura lieu entre l'atome **C1'** des nitrones (possédant la plus grande valeur de l'électrophilie local  $\omega_k$ ) et l'atome **C6** du 3,3-méthylène-5,5-diméthyl 2-pyrrolidinone (possédant plus haute valeur de nucléophilie local  $N_k$ ).

Les calculs ont été effectués au niveau B3LYP/6-31G(d) en utilisant le programme Gaussian 09W. Les indices de réactivité ont été déterminés par le calcul des charges de population naturelle (NPA) et les charges électrostatiques MK (Merz-Singh-Kollman) et chelpG (Breneman et Wiberg). Les résultats obtenus sont en accord avec les données expérimentales [5].

**Mots clés :** cycloaddition 1,3-dipolaires, régiosélectivité, nitrones, DFT-conceptuelle.

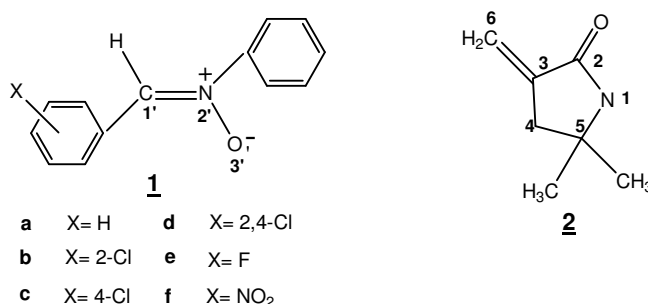
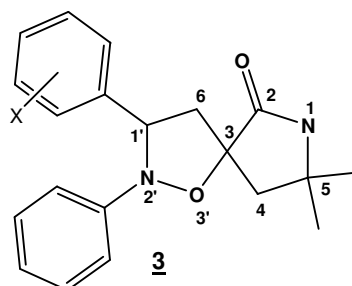


figure1



## Références

- [1] Yakura T., Nakazawa M., Takino T., Ikeda M. *Chem. Pharm. Bull.*, 40, pp 2014 (1992)
- [2] Nguyen L. T., De Proft F., Dao V. L., Nguyen M. T., Geerlings P., *J. Phys. Org. Chem.*, 16 (2003) pp 615.
- [3] Pérez, P.; Domingo, L. R.; Aizman, A.; Contreras, R. In *Theoretical Aspects of Chemical Reactivity*; Toro-Labbé, T., Ed.; Elsevier Science: New York, 2006; Vol. 19, pp 167.
- [4] Barański A., Jasiński R. *Wiad. Chem.*, 56 pp 829-854 (2002)
- [5] Oravec P., Fiserá L., I. Goljer, P. Ertl, *Monatshefte für Chemie* 122, pp977 (1991).

**P39 - JCTC12**  
**ETUDE THEORIQUE DES COMPLEXES ORGANOMETALLIQUES**  
**[COT (M(CO)<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] (M: Cr, Fe, Co) EN DFT/BP**

F. Chekkal,<sup>a</sup> B. Zouchoune<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Université 20 août 1955 Skikda

<sup>b</sup> Laboratoire de Chimie Appliquée et Technologie des Matériaux, Université Larbi Ben M'hidi, (04000) Oum-El-Bouaghi, Algérie

\* [f.chekkal@univ-skikda.dz](mailto:f.chekkal@univ-skikda.dz) et [f.chekkal@yahoo.fr](mailto:f.chekkal@yahoo.fr)

### Résumé

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés au traitement des complexes présentant des ligands cycliques aromatiques riches en électrons  $\pi$ , qui jouent un rôle très important dans la stabilisation des complexes étudiés [1]. Le but de cette investigation consiste à la détermination d'une relation structure/compte électronique, le mode de coordination et les propriétés électroniques des complexes organométalliques, la détermination de leurs stabilités en fonction de la variation du ligand d'une part et l'atome métallique de l'autre part.

Nous avons proposé l'étude en méthode de la fonctionnelle de la densité (DFT) à l'aide du programme ADF [2] et la méthode hybride B3LYP une série de complexes de formule COT (M(CO)<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (M = métal de transition et COT = cyclooctatriène) pour différents comptes électroniques et différents état de spin [3].

**Mots clés :** DFT, COT, état de spin, structure électronique.

### Références

[1] Owen T. Summerscales†, Simon C. Jones, F. Geoffrey N. Cloke and Peter B. Hitchcock, *Organometallics* 2009, 28, 5896-5908.

[2] ADF 2012.01, theoretical chemistry, Vrije University: Amsterdam, the Netherlands, SCM. [www.scm.com](http://www.scm.com)

[3] Xiuming Zhai, Guoliang Li, Qian-shu Li, Yaoming Xie, R. Bruce King, and Henry F. Schaefer, *Journal of organometallic chemistry* 689 (2004) 3920-3938

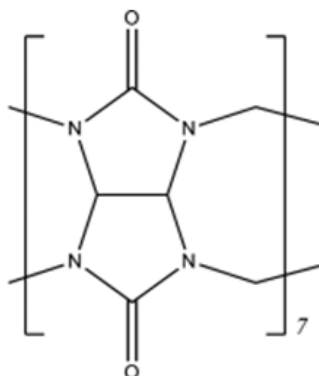
## P40 - JCTC12

DENSITY FUNCTIONAL STUDY OF INCLUSION COMPLEX OF PYRAZINAMIDE/CUCURBIT[7]URIL:  
STRUCTURE, ELECTRONIC PROPERTIES, NBO, GIAO AND TD-DFT ANALYSISMouna Cheriet<sup>a\*</sup>, Fatiha Madi<sup>b</sup>, Leila Nouar<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratory of chemistry applied, Department of material sciences, University 08May 1945, Guelma, Algeria<sup>b</sup> Laboratory of computational chemistry and nanostructures, University 08May 1945, Guelma, Algeria\* [mouna.cheriet@mail.com](mailto:mouna.cheriet@mail.com)**Abstract**

The potential use of cucurbit [7]uril (CB[7]) as an excipient in oral formulations for improved drug physical stability or for improved drug delivery was examined with the antituberculosis drug pyrazinamide. We simulated the docking of pyrazinamide (PZA) in cucurbit [7]uril (CB[7]) considered in this study complexes formed by 1:1 host-guest stoichiometry in vacuo and in aqueous phase, using B3LYP, M06-2X and wB97x-D calculations.

Energetic analysis indicates that the formed complexes are stable. Electronic properties given by TD-DFT calculation clearly demonstrate that a charge transfer was occurred between PZA and CB [7] molecules.

**Keywords** : cucurbit [7]uril, pyrazinamide , TD-DFT



**Figure** The chemical structure of cucurbit [7]uril (CB[7])

**References**

- [1] Merabet N, Madi F, Nouar L et al ;Journal of Molecular Liquids ;211 , 2015, 40-47  
 [2] Madi F, Bounfla F, kirati I et al ;Journal of the Taiwan institute of chemical engineers ;50 , 2015, 37-42

## P41 - JCTC12

## EFFET DE LA STRUCTURE MOLECULAIRE SUR LES ENERGIES D INTERACTION DE DIMERES DE HAP

Siham Naima Derrar<sup>a,b\*</sup>, Mostéfa Belhakem<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Structure, Elaboration et Application des Matériaux Moléculaires, Université de Mostaganem, Algérie<sup>b</sup> Département de Pharmacie, Faculté de Médecine, Université de Sidi Bel Abbès, Algérie\* [derrarsiham@yahoo.fr](mailto:derrarsiham@yahoo.fr)**Résumé**

Les molécules de suie représentent un lourd facteur de risque tant sur la santé publique que sur l'environnement. L'étude minutieuse de leur structure et de leur composition devient de mise pour gérer leur impact sur l'écologie. Dans ce travail, une étude théorique a été menée sur les dimères des hydrocarbures aromatiques polycycliques qui composeraient ces nanoparticules de suie. Pour ce faire, des séries de dimères de Fluoranthène et de Benzo-[a], [b], [j] et [k]-fluoranthène ont été analysées. Les paramètres structuraux, les énergies de liaisons ainsi que les distances d'équilibre intermoléculaires ont été étudiées. Le recouvrement des liaisons  $\pi$ - $\pi$  a été élaboré selon différentes manières au sein des dimères parallèlement disposés. Les résultats trouvés indiquent que la structure du dimère aurait un lien étroit avec les interactions de dispersion.

**Mots clés :** Suie, Nanoparticule, Dimère, Dispersion**Introduction**

Les molécules de suie ont depuis des décennies suscité l'intérêt des chercheurs vu l'impact important qu'ils ont sur la santé et l'environnement [1-2]. Leur formation est, cependant, associée à la dimérisation, la trimérisation, voire plus, d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP). Dans ce présent travail, les HAP Fluoranthène ainsi que Benzo-[a], [b], [j] et [k]-fluoranthène ont été choisis afin de modéliser la dimérisation des nanoparticules de suie. La disposition de ces dimères a été tout d'abord établie comme entièrement parallèle (Full Parallel Sandwich –FPS-) puis partiellement parallèle (Partial Parallel Sandwich –PPS-). Des calculs ont été effectués au niveau B97D/cc-pVTZ, et des potentiels de Morses ont été tracés afin de déterminer les énergies de liaisons de ces nanostructures.

**Résultats**

Les distances d'équilibre intermoléculaires ont été trouvées de l'ordre de 3.7 Å pour tous les HAP dont la structure est FPS et variant entre 3.4 et 3.6 Å pour les PPS. Les énergies de liaisons intermoléculaires avoisinent -11 kcal/mol pour les dérivés des Benzo-fluoranthène FPS et varie de -5 à -11 kcal/mol pour les structures PPS. Ces énergies seraient indépendantes du nombre de cycles benzéniques interagissant dans ces différents dimères. Par ailleurs, les paramètres structuraux tels que la dimension des dimères optimisés jouerait un rôle dans la liaison intermoléculaire de ces structures dimériques.

**Conclusion**

Le recouvrement intermoléculaire dans des dimères de Fluoranthène et de Benzo-fluoranthène a été élaboré selon différentes manières. La nature des interactions au sein de ces dimères serait dispersive. Les résultats obtenus à travers les calculs permettent de tirer un lien entre les énergies d'équilibre et la structure du dimère et ce indépendamment du nombre de cycles benzéniques qui interagissent.

**Références**

- [1] C. A. Pope, R. T. Burnett, M. J. Thun, E. E. Calle, D. Krewski, K. Ito, G. D. Thurston, J. Am. Med. Assoc. 287 (2002) 1132-1141.
- [2] M. Martins, P. M. Costa, A. M. Ferreira, M. H. Costa, Aquat. Toxicol. 142-143 (2013) 85-95.

## P42 - JCTC12

## A THEORETICAL STUDY OF ANTIOXIDANT PROPERTIES OF SOME NEW 2-STYRYLCHROMONES

Anes El-Hadj Said and Sidi Mohamed Mekelleche

Laboratory of Applied Thermodynamics and Molecular Modelling, Department of Chemistry,  
Faculty of Science, University of Tlemcen, PB 119, Tlemcen, 13000, Algeria.

[elhadjsaidanes@gmail.com](mailto:elhadjsaidanes@gmail.com)

**Abstract**

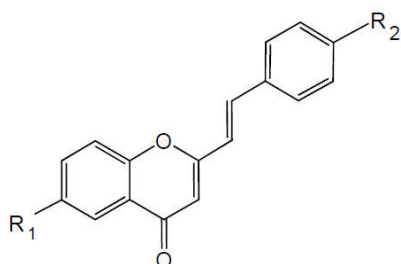
Free radicals are molecules or atoms which have an unpaired electron. So, they are very unstable systems and they tend to bond with other species for increasing their stability. Reactive oxygen species (ROS), known as the famous free radicals, destruct and damage the proteins, lipids, and DNA biomolecules. Natural and synthetic antioxidants are substances that prevent the free radical formation in cells.

2-Styrylchromones are a new class of flavonoids which exhibit various (antimicrobial, anticancer, antioxidant) biological activities. Recently, some new 2-styrylchromones (A, B and C) (*See Scheme 1*) have been the subject of radical scavenging measurements and have proven their high antioxidant activity in comparison of the commercially available antioxidants such as vitamin C (IC<sub>50</sub>=852 μM) and vitamin E (IC<sub>50</sub>=726 μM) [1].

The aim of the present work is to rationalize the experimental findings using DFT calculations performed at the B3LYP/6-311++G (d, p) level of theory. Solvent effects were taken into account, implicitly, using the conductor-polarised continuum solvation model (C-PCM). Three mechanisms have been investigated, namely, HAT (hydrogen atom transfer), SET-PT (single electron transfer –proton transfer), and SPLET (sequential proton loss-electron transfer) [2]. The obtained results show that HAT is the most favored mechanism in gas phase while SPLET is the most favored process in ethanol. Moreover, the compound B is predicted to be more antioxidant than A and C as expected experimentally. The antioxidant properties of the studied compounds are also put in evidence using molecular docking simulations.

**Keywords :** 2-Styrylchromones ; antioxidants; Thermochemical descriptors; DFT calculations; Molecular Docking.

Scheme 1



Compound A : (R<sub>1</sub>=OH ; R<sub>2</sub>=OMe, IC<sub>50</sub>=268 μM)

Compound B : (R<sub>1</sub>=OH ; R<sub>2</sub>=OH, IC<sub>50</sub>=234 μM)

Compound C : (R<sub>1</sub>=OMe ; R<sub>2</sub>=OH, IC<sub>50</sub>=243 μM)

**References:**

- [1] V. Madhava Rao, B Ujwala., P. Priyadarshini and P. Krishna Murthy, *J. Der Pharma Chemica*, 2016, 8:1-6.  
[2] A. Ardjani and S. M. Mekelleche, *J. Mol. Mod.* 2016, 22:302.

## P43 - JCTC12

## INTERACTION OF IOTA -CARRABIOSE WITH LITHIUM CATION, STUDIED BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Amina Fezazi<sup>1</sup>, Mourad Zouaoui Rabah<sup>1</sup>, M. Sekkal-Rahal<sup>1</sup>, Zoulikha Hafsi<sup>a</sup> Laboratoire L2MSM, Université djilali liabés, sidi belabes, l'Algérie  
[fmouni-84@hotmail.fr](mailto:fmouni-84@hotmail.fr)**Abstract**

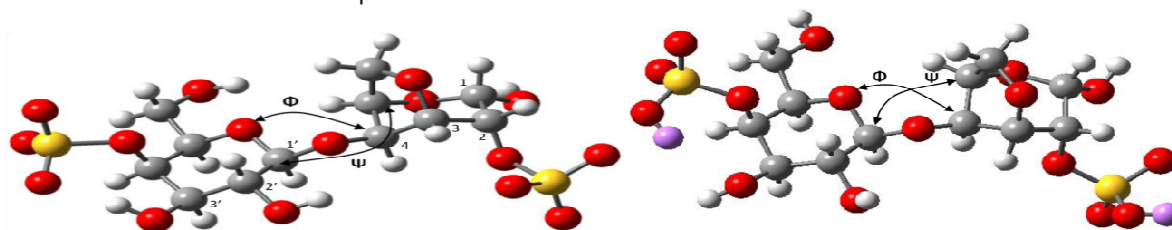
A review on the chemistry, physico-chemistry and some gel characteristics of major phycocolloids is presented. These concern mainly agar, gelling carrageenans from red seaweeds. Iota Carrageenan is a linear, negatively charged, sulfated galactan polysaccharide and is one of the three main fractions of the carrageenan family along with kappa ( $\kappa$ ) and lambda. The three fractions differ in their degree of sulfation and 3,6-anhydrogalactose content. I-carrageenan is abundantly used in food, chemical and pharmaceutical industries like texturing agent, this is due to its physical property to form thermo-reversible gels<sup>1</sup> that is related to its conformation. DFT optimization studies at B3LYP/6-31G\* level of theory have been carried out, using the Gaussian 03 program. The main goal is to study the structure and the energy in the whole conformational space of the disaccharide. For this aim, we have performed relaxed energetic contour maps in the gas phase of the charged form of I-carrabiose (charge = -2) and for the neutral form.

**Keywords** : I-carrageenan, DFT.**Introduction**

Quantum mechanical (QM) calculations were performed, energy calculations and geometry optimization were carried out using Gaussian 03, with standard basis sets, [1] and the results have been explored using Gaussview software. The initial geometry has been built by taking the repeating disaccharide from the structure of the Iota-carrageenan determined by X-ray diffraction [2].

To obtain the neutral form of this compound, we have simply added two lithium alkali metal ( $\text{Li}^+$ ) to the sulfate groups, especially on the oxygen's that present the lower negative charge. Here, again we have proceeded to a full optimization using B3LYP/6-31G(d) in the gas phase. The starting ( $\Phi, \Psi$ ) dihedral angles are (-86.73, 73.74) and (-85.88, 74.90) for charged and neutral forms, respectively.

The conformational contour maps were constructed for the 4-O-sulfated- $\beta$ -D-galactopyranosyl (1,4) 2-O-sulfated 3,6-anhydro- $\alpha$ -D-galactopyranose in gas phase for the charged and neutral form of the molecule. Mapping the conformational space for carbohydrates is generally monitored by the two dihedral angles  $\Phi$  and  $\Psi$  of the glycosidic linkage. These angles are the principal geometrical parameters to characterize the three-dimensional structure of disaccharides and are considered as to better define the orientation of mutual monosaccharide units in space.



**Figure 1:** (a) structure of Iota -carrabiose disaccharide (charged form (-2)), dihedral angles  $\Phi$  and  $\Psi$  around the glycosidic linkage, (b) : structure of Iota-carrabiose disaccharide (neutral form) dihedral angles  $\Phi$  and  $\Psi$  around the glycosidic linkage.

Following the recommendations and symbols proposed by the IUPAC, we have used in this work ( $\Phi, \Psi$ ) for the disaccharide, (such as  $\Phi = \text{O}5'-\text{C}1'-\text{O}1'-\text{C}4$  and  $\Psi = \text{C}1'-\text{O}1'-\text{C}4-\text{C}5$ ), The primes (in accordance with previously published works [3-4]) refer to atoms of the reducing sugar unit (see Figure 1(a)).



### Conclusion

In this work, conformational maps have been constructed for the dimer of iota-carrageenan: the charged and neutral forms at the b3lyp/6-31G(d) level in gas phase. For charged form we have obtained four minima and for neutral form we have obtained five minima. In both cases, the maps include one minimum very close to the initial fully optimized structure. An intra-molecular hydrogen bonding system arises and seems to contribute in the stabilization of the molecule. Furthermore, the region of high stability of the molecule seems to be changed for both charged and neutral forms.

The results of the gas phase DFT calculations allow us to conclude that a rigid conformational map in full agreement with the relaxed map, is able to predict the regions of the minima in the potential energy surface of i-carrageenan.

According to the results, we found that as expected, the higher the base is heard and enriched with polarization function, the results are accurate. In our calculations, the use of the base 6-311 + G (d) provides the best results. A comparison between HF and DFT quantum methods, we found that our system using the DFT method with these functional defeated, with bases increasingly widespread and with the addition of diffuse and polarized functions product an electron energy of increasingly lower and more stable conformation.

### References:

- [1]. Melberg, S.; Rasmussen, K. Carbohydr Res 1979, 27.
- [2]. Navarro, D. A.; Stortz, C. A. Carbohydr Res 2008, 343, 2292.
- [3]. Stortz, C. A. Carbohydr Res 2006, 341, 2531.
- [4]. Wang, Z. X.; Duan, Y. J Comput Chem 2004, 25, 1699.

## P44 - JCTC12

## ETUDE DFT DE LA STABILITE ET DE LA STRUCTURE DES TAUTOMERES DE 4-HYDROXY QUINAZOLINE

N. Guechtouli<sup>a,b</sup>, H. Grioua<sup>b</sup>, I. Soualah<sup>b</sup>, H. Meghezzi<sup>b</sup><sup>a</sup>Université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou (UMMTO),<sup>b</sup>Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire (LTMM), Faculté de chimie, USTHB, Alger, Algérie.**Résumé**

La famille des quinazolines suscite l'intérêt des chimistes organiciens tant pour ses propriétés physico-chimiques que pour ses propriétés biologiques [1-3]. En effet, ses dérivés sont des broncho-dilatateurs, des antiallergiques, des antihypertenseurs et des antidiabétiques. Ils font partie de la troisième génération des anti-inflammatoires. Ils présentent également un grand potentiel thérapeutique contre les tumeurs solides avancées, les métastases osseuses et les leucémies. Pour les deux dernières décennies, il y a eu un intérêt considérable dans l'étude de la tautomérie des composés hétérocycliques pour identifier l'influence de la tautomérie sur les propriétés chimiques et biologiques des molécules. Les études expérimentales sur la tautomérie sont encore un problème difficile dans la chimie et la biologie moléculaire. La plus part des tautomères ne sont pas observés expérimentalement à cause de leur faible concentration.

Une analyse détaillée de la structure et les changements dans les paramètres géométriques et énergétiques causés par la migration d'un atome d'hydrogène nous permettrait de comprendre les différentes propriétés des tautomères. La connaissance du rapport stabilité des formes tautomères des hétérocycles, ainsi que la conversion d'une forme à une autre est importante du point de vue de la chimie structurale. Les tautomères sont très sensibles aux effets environnementaux tels que la polarité du solvant.

Dans ce travail, on s'intéresse aux complexes dérivés pyrimidiques (quinazoliniques), principalement les composés dérivés de la quinazolin-4-ol. L'objectif de cette étude est de déterminer la structure optimale, c'est-à-dire de trouver le tautomère qui prédomine, à l'état isolé et en présence d'un solvant polaire (H<sub>2</sub>O). Dans le cadre de cette investigation, on a mis en œuvre la théorie de la fonctionnelle de la densité en utilisant la fonctionnelle hybride B3LYP (en méthode DFT/B3LYP/6-311++G<sup>\*\*</sup>); les calculs ont été effectués au moyen du logiciel Gaussian 09.

Les résultats de nos calculs DFT sur les propriétés étudiées sont en bon accord avec les données expérimentales disponibles.

**Mots clés :** Composés Quinazolines, DFT, tautomérie, stabilité.

**Références**

- [1]: P Zhichkin, E Kesicki, J.Treiberg, L Bourdon, M Ronsheim, H. C.Ooi, S. T.White, A.Judkins, D. Fairfax, *Org.Lett.* 9 (2007) 1415.
- [2]: J. P. Michael, *Nat. Prod. Rep.* 19 (2002) 742.
- [3]: (a) V. Alagarsamy, V. R.Solomonb, K. Dhanabala, *J.Bioorg. Med. Chem.* 15 (2007) 235-241. (b) V.Alagarsamy, V. R. Solomonb, M. Muruganc, *J.Bioorg. Med. Chem.* 15 (2007) 4009-4015. (c) P. M.Chandrika, T. Yakaiah, A. Raghu Ram Rao, B. Narsaiah, N. C.Reddy, V. Sridhar, J. V. Rao, *J.Bioorg.Med.Chem.* 43 (2008) 846-852. (d) V.Alagarsamy, U.S. Pathak, *J.Bioorg. Med. Chem.* 15 (2007) 3457-3462.

## P45 - JCTC12

## SYNTHESIS, EXPERIMENTAL AND THEORETICAL VIBRATIONAL STUDIES OF IMIDAZOLIUM AND PHOSPHONIUM BASED IONIC LIQUIDS, CASE OF THE HYDROGEN BONDING INTERACTIONS AND THEIR INFLUENCE ON THERMOPHYSICAL PROPERTIES

Boumediene Haddad<sup>a,b,c</sup>, Mokhtar Draï<sup>a,b</sup>, Johannes Kiefer<sup>d</sup>, Annalisa Paolone<sup>e</sup>, Houari Brahim<sup>a</sup>, El-habib Belarbi<sup>b</sup>, Didier Villemin<sup>c</sup>, Serge Bresson<sup>f</sup>, Mustapha Rahmouni<sup>b</sup>.

<sup>a</sup> Department of Chemistry, Dr Moulay Tahar University of Saida, Algeria.

<sup>b</sup> Synthesis and Catalysis Laboratory LSCT, Tiaret Univ Tiaret, Algeria

<sup>c</sup> LCMT, ENSICAEN, UMR 6507 CNRS, University of Caen, 6 bd Ml Juin, 14050 Caen, France.

<sup>d</sup> Technische Thermodynamik, Universität Bremen, Badgasteiner Str. 1, 28359 Bremen, Germany.

<sup>e</sup> CNR-ISC, U.O.S. La Sapienza, Piazzale A. Moro 5, 00185 Roma, Italy

<sup>f</sup> Laboratoire de Physique des Systèmes Complexes, Université Picardie Jules Verne, 33 rue St Leu 80039 Amiens cedex, France.

### Abstract

In this study, series of ionic liquids based on imidazolium and phosphonium cation combined with a large set of anions as, iodide [I<sup>-</sup>], tetrafluoroborate [BF<sub>4</sub><sup>-</sup>], hexafluorophosphate [PF<sub>6</sub><sup>-</sup>], and bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide [(CF<sub>3</sub>SO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>N<sup>-</sup>] were synthesized. The structures of these ionic liquids were identified by <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>19</sup>F and <sup>31</sup>P NMR spectroscopies as preliminary characterization.

To obtain information on the structure and hydrogen bonding interactions in these compounds', Vibrational spectroscopy properties were investigated by Fourier Transform-Infrared-Attenuated Total Reflectance, Fourier Transform Raman spectroscopy and Density Functional Theory calculations in the wave-number range 600-4000 cm<sup>-1</sup>, 45-3500 cm<sup>-1</sup> and 20 to 4000 cm<sup>-1</sup>, respectively. In order to ascertain whether cation conformers are present in our ILs, a computational study is performed using the density functional theory (B3LYP/6-31G\*\*). The comparison of the experimental data and the computed spectra shows that three conformers of the imidazolium ions are present in both ionic liquids.

Also, Their inter- and intramolecular interactions are discussed. In the second stage and for a better understanding of the obtained spectroscopic data, the relationship between the structure of these investigated ILs and their thermophysical properties, especially, density, viscosity and melting point was discussed in detail.

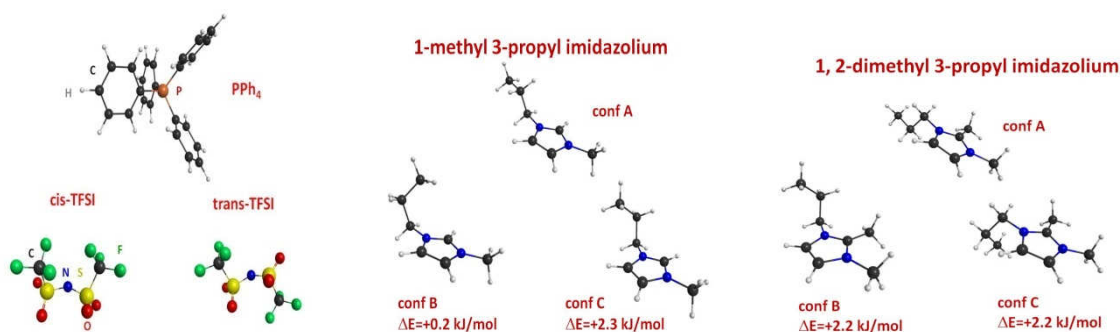


Figure 1. Schematic view of the ions composing the investigated ILs.

**Key words:** Ionic liquids; Density Functional Theory; B3LYP/6-31G\*\*, FT-Raman, FTIR/ATR, imidazolium, conformers.

### References

- [1] Haddad, B., Moumene, T., Villemin, D., Lohier, J. F., & Belarbi, e. H. (2016), *Bulletin of Materials Science*, 39, 3, 797–801
- [2] Moumene, T., Belarbi, E. H., Haddad, B., Villemin, D., Abbas, O., Khelifa, B., & Bresson, S. (2015). *Journal of Molecular Structure*, 1083, 179-186.
- [3] Moumene, T., Belarbi, E. H., Haddad, B., Villemin, D., Abbas, O., Khelifa, B., & Bresson, S. (2014). *Journal of Molecular Structure*, 1065, 86-92.
- [4] Moumene, T., Belarbi, E. H., Haddad, B., Villemin, D., Abbas, O., Khelifa, B., & Bresson, S. (2016). *Journal of Applied Spectroscopy*, 83(2), 165-171.

## P46 - JCTC12

## THE IONIC STRUCTURE AND THE SELF-DIFFUSION PROPERTIES OF LIQUID MERCURY

Ouiza Haddag<sup>a,\*</sup>, Nadra Harchaoui<sup>a</sup> and Slimane Hellal<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie  
\*haddagouiza@yahoo.fr**Abstract**

With an interionic pair potential issued from DFT-calculations and given in the literature [Y. Li, E. Blaisten-Barojas, and D. A. Papaconstantopoulos, Phys. Rev. B **57**, 15519 (1998); J.-M. Bomont and J.-L. Bretonnet; J. Chem. Phys. **124**, 054504 (2006)], we performed molecular dynamics (MD) simulations to calculate the ionic pair correlation function  $g(r)$  at temperature (-35 °C) just above the melting point (-39 °C). The theoretical results of the corresponding static structure factor  $S(q)$  obtained by Fourier transform are in overall agreement with the available experimental data (Y. Waseda, *The Structure of Non-Crystalline Material: Liquid and Amorphous Solids*, McGraw-Hill, New York, 1980 (see figure below). At the same temperature, the self-diffusion process is studied through the calculated velocity autocorrelation function (VACF). In order to accurately determine the self-diffusion coefficient of mercury, we used this VACF in the Green-Kubo-like equation. As we know this one is an expression of the fluctuation-dissipation theorem. So, the predicted self-diffusion coefficient is in close agreement with the experiment.

**Keywords** : liquid metals, mercury, pair potential, ionic structure, velocity autocorrelation function

**Introduction**

En mettant en œuvre la méthode de simulation numérique par dynamique moléculaire [1], nous avons mené l'investigation de quelques propriétés du mercure liquide à une température (-35° C) proche du point de fusion. Les interactions sont décrites par un potentiel effectif de paire dont l'expression paramétrée est donnée par l'équation [2, 3]:

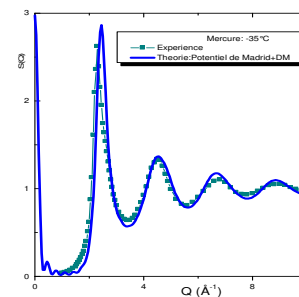
$$V_{\text{eff}}(r) = A_0 \exp(-\alpha r) - A_1 \exp\left[-\beta(r - R_0)^2\right], \quad (1)$$

Les paramètres du potentiel sont obtenus de manière optimale à partir des résultats de calculs LDA de l'énergie du mercure à l'état cristallin [2].

**Propriétés structurales et auto-diffusion dans le mercure liquide :**

Pour tester la validité du modèle de potentiel interionique (1), nous avons déterminé le facteur de structure statique  $S(q)$  (**Fig.1**) du mercure à partir des « expériences » de simulations numériques par la dynamique moléculaire. La comparaison avec les données expérimentales [4], montre que le modèle de potentiel ci-dessus décrit de manière satisfaisante les interactions interioniques dans le mercure liquide. Pour voir si le modèle de potentiel est encore apte à prédire les propriétés dynamiques, nous avons entrepris dans une seconde étape l'investigation d'une propriété liée au transport atomique telle que l'autodiffusion. Dans le formalisme de Green-Kubo [5, 6] qui est simplement le reflet du théorème de « fluctuation-dissipation », le coefficient d'auto-diffusion  $D$  s'exprime en termes de l'intégrale de la fonction d'auto-corrélation des vitesses (VACF) [7] :

$$Z(t) = \langle \vec{v}(t) \cdot \vec{v}(0) \rangle / 3 \quad (2)$$



**Fig.1** : Facteur de structure du mercure liquide calculé à -35 °C.

**Conclusion**

En conclusion, nous sommes en mesure de calculer de nombreuses propriétés des liquides simples : le facteur de structure statique  $s(q)$ , la compressibilité isotherme, la compressibilité adiabatique, le coefficient d'autodiffusion, les viscosités dynamique shear et de volume...

**Références**

- [1] M. P. Allen and D. J. Tildesley; *Computer Simulation of Liquid*, Oxford Science Publications, New York, 1987.
- [2] Y. Li, E. Blaisten-Barojas, and D. A. Papaconstantopoulos, *Phys. Rev. B* 57, 15519 (1998).
- [3] J.-M. Bomont and J.-L. Bretonnet; *J. Chem. Phys.* 124, 054504 (2006).
- [4] Y. Waseda, *The Structure of Non-Crystalline Material: Liquid and Amorphous Solids*, McGraw-Hill, New York, 1980.
- [5] M. S. Green; *J. Chem. Phys.* 19, 1036 (1951).
- [6] R. Kubo; *J. Phys. Soc. Japan* 12, 570 (1957).
- [7] J. P. Hansen and I. R. McDonald; *Theory of Simple Liquid*, Academic Press, London, 1986.

## P47 - JCTC12

## PERMEABILITE DES MOLECULES D'EAU DANS LA MEMBRANE PROTEIQUE (AQUAPORINE)

M'hamed Hadj Moussa<sup>a\*</sup>, Nourredine Redouane<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Didactique Biologique, école normale supérieure (ENS), Vieux-kouba, Algérie<sup>b</sup> Laboratoire de Didactique Biologique, école normale supérieure (ENS), Vieux-kouba, Algérie[Hadj2009@gmail.com](mailto:Hadj2009@gmail.com)**Résumé**

L'étude par modélisation moléculaire de la molécule d'aquaporine nous a permis de comprendre le phénomène du déplacement des molécules d'eau dans le canal protéique de la molécule d'aquaporine, la perméabilité de la molécule d'eau est réglée par les lois de la physique. L'intérêt de notre étude est la compréhension et la déduction d'un phénomène dynamique dans la matière vivante, ainsi que les symptômes liés à ce phénomène biologique. La molécule d'aquaporine a un rôle biologique régulé par des lois physiques, et a des symptômes liés médicalement à des maladies telles que l'hypertension artérielle, surtout chez les enfants, la diarrhée, la fièvre, la respiration instable, la migraine... etc.

**Mots clés:** modélisation moléculaire, Aquaporine, molécule d'eau, perméabilité, dynamique moléculaire. Electrostatique.

**Introduction**

L'utilisation des outils informatiques nous permet d'étudier les phénomènes biologiques de la matière vivante. Pour cela, nous utilisons les lois de la dynamique moléculaire et les logiciels d'étude du mouvement des molécules d'eau dans l'aquaporine (*Escherichia coli*), voir la références [1,2].

Cette étude biophysique nous permettra de connaître les paramètres physiques qui déterminent le mouvement des molécules d'eau dans le canal.

**L'énergie électrostatique**

L'énergie électrostatique entre nuage de charge est donnée par une série de termes d'interaction du type charge – charge, charge - dipôle et dipôle – dipôle ainsi que des termes d'ordre supérieure.

L'énergie électrostatique est donnée par la relation (1):

$$E_{coulomb} = \sum_i \sum_{j>i} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (1)$$

Le potentiel électrostatique est généralement représenté par charge-charge, dipôle-dipôle et la charge induite par les interactions dipole, voir la référence [3]:

$$V_{elec} = \sum_{i,j=1;i>j}^N \frac{1}{\epsilon} \left( \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + q_i \vec{\mu}_j \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} + \frac{\vec{\mu}_i \vec{\mu}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{\mu}_i \vec{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} + \dots \right) \quad (2)$$

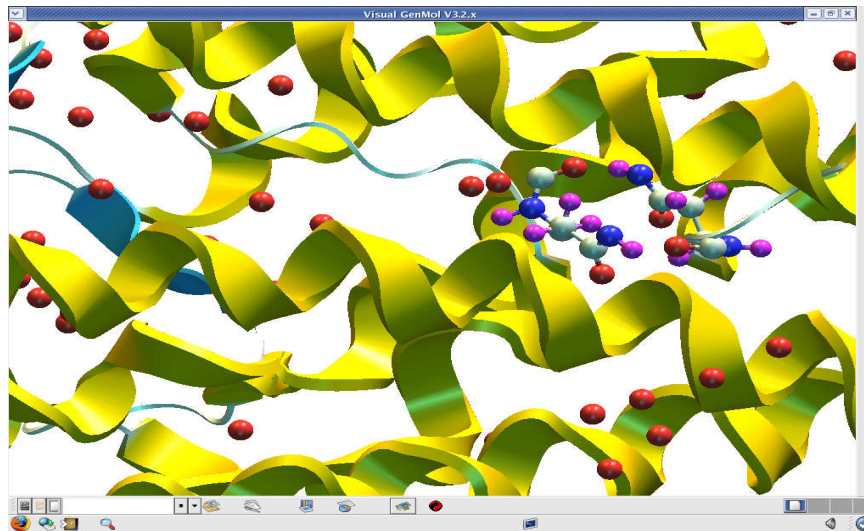


Figure 1 : Représentation de l'Aquaporine par logicielle GenMol

### Conclusion

Le déplacement des molécules d'eau dans le canal joue un rôle primordial. L'atome d'oxygène de la molécule d'eau crée des liaisons hydrogènes avec les atomes NH<sub>3</sub> des asparagines ASN(68) et ASN(203), ce qui fixera le dipôle de cette molécule, en plus le moment dipolaire doit être perpendiculaire sur l'axe du canal. Cette valeur du moment dipolaire de la molécule d'eau par le logiciel (VMD + NAMD) est  $\|\overrightarrow{\mu_{H_2O}}\| = 2,33 \text{ D}$ . L'augmentation de l'énergie est due à la saturation de l'atome d'oxygène par deux liaisons hydrogène, venant de ASN(68) et ASN(203) est 2,5 KJ.mol<sup>-1</sup>. Cette énergie engendre une réorientation spatiale des atomes d'hydrogènes de la molécule d'eau.

### Références

- [1] Morten Ø. Jensen, Emad Tajkhorshid, Klaus Schulten . Volume .9 (2001), 1083–1093.
- [2] Paolo Marracino, Micaela Liberti, Christian J. Burnham, Massimiliano Avena, José-Antonio Garate, Francesca Apollonio, Niall J. English, International Journal of Molecular Sciences (2016), 17, 1133.
- [3] Rerum. Naturalium, Thèse doctorat « protein-protein interaction: Einfluss des Lösungsmittels und. Effekte Von Fluorierung », der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Dresden, (2009).
- [4] Hanning et al. *Périodique2 Biophysical* Volume 46-60, (2007) 92(1).
- [5] Fu, D., Libson, A., Miercke, L.J., Weitzman, C., Nollert, P., Krucinski, J., Stroud, R.M. ; *Périodique1 Structure of a glycerol-conducting channel and the basis for its selectivity*. Volume 481-486 (2000) , Science 290.
- [6] Jean-claude Callen et Roland Perasso. ; *Biologie Cellulaire des molécules aux organismes* ; Dunod, Paris 2<sup>ème</sup> édition (2005).



## P48 - JCTC12

ETUDE THEORIQUE DU COMPLEXE D'INCLUSION ISONIAZIDE/ $\beta$ -CYCLODEXTRINESakina Haiahem<sup>a\*</sup>, Leila Nouar<sup>b</sup><sup>a</sup> LCCL, Université 08 mai 45, Guelma, Algérie<sup>b</sup> LCCL, Université 08 mai 45, Guelma, Algérie\* [sakinahaiahem@yahoo.fr](mailto:sakinahaiahem@yahoo.fr)**Résumé**

Dans le cadre d'une recherche d'ordre structurale, une étude théorique du processus d'inclusion de l'isoniazide dans la  $\beta$ -Cyclodextrine a été envisagée en utilisant les différentes méthodes de la mécanique quantique telle que : les méthodes semi empiriques PM3 et la méthode hybride ONIOM 2. Dans cette étude nous avons tenu compte seulement du stochiometry 1:1. Les résultats que nous avons obtenus avec la méthode PM3 prédisent la possibilité de formation du complexe 1:1 dans lequel la structure la plus stable présente une inclusion partielle de l'INH dans la cavité de la  $\beta$ -CD. Les calcul ONIOM confirment les résultats obtenus avec la méthode PM3.

**Mots clés :**  $\beta$ -cyclodextrine, complexe d'inclusion, PM3, méthode hybride ONIOM2.

**Introduction**

Les cyclodextrines sont des molécules cycliques naturelles constituées de sous-unités glucopyranose liées en  $\alpha$ -(1, 4). Elles possèdent une structure en tronc de cône, délimitant une cavité en leur centre. Grâce à cette cavité apolaire, les cyclodextrines sont capables de former des complexes d'inclusion en milieu aqueux avec une grande variété de molécules. Les cyclodextrines sont des molécules intéressantes pour la formulation de médicaments, elles assurent la protection des médicaments sensibles à la lumière, à la chaleur ou à l'air et améliorer la solubilité, la stabilité et la biocompatibilité de certains médicaments. [1]

**Energie de complexation**

L'énergie de complexation est définie comme la différence d'énergie entre le complexe optimisé et les énergies de l'hôte et l'invité isolées, sur leurs conformations optimisées du complexe. [2] :

$$\Delta E_{\text{Complexation}} = E_{\text{complexe}} - (E_{\text{INH libre}} + E_{\beta\text{-CD libre}}) \quad (1)$$

Niveau bas de théorie PM3

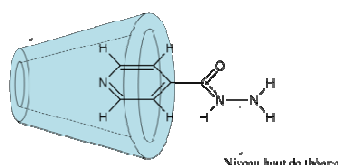


Fig. 1 : La partition ONIOM2 du complexe INH/ $\beta$ -CD.

**Conclusion**

Dans ce travail nous avons envisagé une étude théorique sur le processus d'inclusion d'une substance thérapeutique, l'isoniazide dans la cavité de la  $\beta$ -cyclodextrine. Les résultats obtenus montre que l'orientation chaîne (la pénétration du cycle aromatique à travers la cavité hydrophobique du la  $\beta$ -cyclodextrine) est le plus favorisée selon les énergies de complexation

Ensuite nous avons poursuivie l'étude en utilisant la méthode ONIOM2, afin de mieux expliquer la nature des interactions mutuelles établit dans les complexes les plus favorables et nous avons trouvé un résultat similaire à celui qui a été trouvé par la méthode semi empirique PM3.

**Références**

- [1] Yk.Uekama, « Desing and evaluation of cyclodextrin-based drug formation » Chemical and Pharmaceuti-cal Bulletin, 2004, page : 52,900-915.  
 [2] D J. Barbiric, E A. Castro, R H. de Rossi, J Mol Struct Theochem, 2000, page : 532, 171.

## P49 - JCTC12

## ETUDE EN THEORIE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITE DES PROPRIETES STRUCTURALES DU DURENE ET DE SES DERIVES

Noudjoud Hamdouni<sup>a\*</sup>, Ali Boudjada<sup>a</sup>, Ouarda Brihi<sup>a</sup>, Meriem Medjani<sup>a</sup> and Jean Meinel<sup>b</sup>

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

<sup>b</sup>Institut de chimie, université de Rennes 1, LCSIM UMR 6511, 35042 Rennes, France

\* [n\\_hamdouni@yahoo.fr](mailto:n_hamdouni@yahoo.fr)

### Résumé

Les benzènes substitués par des halogènes et des méthyles présentent un intérêt considérable pour leurs propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques. Dans nos calculs de chimie quantique (DFT), nous avons utilisé deux fonctionnelles d'échange corrélation MPW1PW91 et B3LYP dans la chaîne de programme GAUSSIAN03 et des bases suffisamment étendues pour déterminer les conformations moléculaires du durène (C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>) et quelques-uns de ces dérivés. Nous avons effectué l'optimisation de la géométrie, puis calculé le spectre IR et Raman afin de confirmer l'absence de fréquence(s) imaginaire(s). L'optimisation des géométries à l'aide de bases de fonctions telles que DGDZVP et des fonctionnelles d'échange corrélation « B3LYP » et « MPW1PW91 » a permis de faire une étude complète de l'influence du choix de la base sur les géométries et les fréquences de vibration. Les calculs théoriques de spectroscopie IR et Raman ont permis l'attribution des 66 modes internes de la molécule du durène et quelques-uns de ces dérivés. L'attribution des modes donne un très bon accord entre les fréquences calculées et celles observées à la fois pour les modes de vibration dans le plan et les modes de vibration hors du plan de ces composés.

**Mots clés:** Benzènes, DFT, Conformation, Spectroscopie, IR.

### Références

- [1] Gaussian 03 (Revision A.5), M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, V.G. Zakrzewski, J.A. Montgomery, R.E. Stratmann, J.C. Burant, S. Dapprich, J.M. Millam, A.D. Daniels, K.N. Kudin, M.C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G.A. Petersson, P.Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J. Cioslowski, J.V. Ortiz, B.B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B.G. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, J.L. Andres, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, and J.A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA (2003).
- [2] A.D. Becke, J. Chem. Phys. 98, 5648 (1993).
- [3] C. Lee, W. Yang, R.G. Parr, Phys. Rev. B 37, 785 (1998).

## P50 - JCTC12

## THREE DIMENSIONAL QUANTITATIVE STRUCTURE ACTIVITY RELATIONSHIPS OF EIGHTY-THREE FLAVONOÏDES DERIVATIVES BASED ON MOLECULAR INTERACTION FIELDS DESCRIPTORS

Sara Hammad <sup>a</sup> and Souhila Bouaziz-Terrachet<sup>b</sup><sup>a</sup> Département de Chimie, Université Mouloud Maamri, Tizi Ouzou (Algérie)<sup>b</sup> Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université Mohamed bouguerra, Boumerdes (Algérie)[hammadssara2013@hotmail.fr](mailto:hammadssara2013@hotmail.fr)**Abstract**

Quantitative Structure–Activity Relationships (QSAR) has been used to study the correlation between the molecular properties of a series of 83 flavonoides analogs and the Protein Casein Kinase 2 (CK2) inhibitory activities. The model, derived from the superposition of docked conformation and generated by Open3DQSAR [1], gives  $r_{cv}^2$  value of 0.75 and  $r_{ncv}^2$  of 0.70. In addition, this model was validated by an external set of twenty compounds. The statistical results, predicted correlation coefficient  $r_{pred}^2 = 0.62$ .

**Keywords** : CK2, flavonoïdes, Inhibitors, Cancer, Doking, Auto Dock 4, 3D QSAR , MLR, PCR, PLS.

**Introduction**

Quantitative structure-activity relationships (**QSAR**) are one of the most important methodologies for rational drug design. 3D-QSAR is mathematical models that attempt to relate the information of three dimensional molecular structure of a compound to its biological activity. This method provides a rational approach for the development of new potential compounds. Flavonoids are phytonutrients in plant-based food products that often contribute to the color of the foods. They provide antioxidant activity which may help to prevent against diseases such as cancer. Protein kinase (**CK2**) is a ubiquitous protein present in the nucleus and cytoplasm. This protein is involved in the control of cell division and in signal transduction. Recently, it has been established as one of the most attractive targets for molecularly targeted cancer therapy.

**3D-QSAR Modeling**

Flavonoids derivatives, selected from literature [2], were energy minimized using semi-empirical Hamiltonian AM1. Resulted geometries were docked in the CK2 active site using the AutoDock4 program [3]. Compound that has the most activity was used as a template and all of other compounds were aligned on the basis of the common structure (Fig.1). Then, the obtained actives conformations were divided into two set, 63 in the training set to generate the models and the remaining twenty in the test set to evaluate the predictive ability of the resulting model. The next step to generate a 3D-QSAR model was gathering molecular interaction fields (MIFs) information for all analyzed compounds. For this, we computed a steric and an electrostatic field, using the MMFF94 force field. The predictive ability of the 3D-QSAR models is assessed by applying partial least squares (PLS) analysis as well as the leave-one-out (LOO) cross-validation method.

**Conclusion:** In this study, molecular docking and 3D-QSAR methods were performed on a series of flavonoids derivatives as CK2 inhibitors to explore the structure–activity relationship. The obtained results indicate that this model could be successfully used for predicting the CK2 bioactivities of new compounds.

**References**

- [1] Open 3D QSAR , Journal of Molecular Modeling , January 2011, Volume 17, Issue 1, pp 201–20  
 [2] Bioorganic & Medicinal Chemistry 21, 2013, 6681–6689  
 [3] Morris Garrett M, Goodsell David S and all. J Comput Chem, 1998, 19:1639–1662.

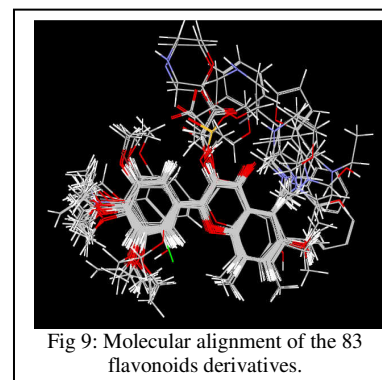


Fig 9: Molecular alignment of the 83 flavonoids derivatives.

## P51 - JCTC12

## A THEORETICAL STUDY OF REGIO- AND STEREOSELECTIVITIES OF THE ASYMMETRIC DESYMMETRIZATION OF MESO-CYCLIC IMIDES COMPOUNDS WITH CHIRAL BORANE

Djamila Hellel<sup>a,b</sup>, Fouad Chafaa<sup>a</sup>, Abdelmalek Khoreif Nacereddine<sup>a,c</sup>, Abdelhafid Djerourou<sup>a</sup><sup>a</sup> *Laboratoire de Synthèse Organique et Biocatalyse, Department de Chimie, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar Annaba, BP 12 23000, Annaba, Algérie*<sup>b</sup> *Ecole normale supérieure des enseignants, B.P. n°4033, poste de la gare rue des martyrs- Laghouat*<sup>c</sup> *Département de Physique et Chimie, école Normal Supérieur d'éducation technologique, Azzaba-Skikda Algérie*\* [hellel.djamila@gmail.com](mailto:hellel.djamila@gmail.com)**Abstract**

The desymmetrization of meso-cyclic compounds that have two asymmetric centers by an asymmetric reduction with chiral boron reagent lead to a hydroxylactams compounds with three stereocenters. A theoretical study of the regio- and stereoselectivities of the reduction of 2-benzylhexahydro-1H-isoindole-1,3(2H)-dione with the chiral borane reagent such as DIP-chloride were carried out at the b3LYP/6-31G level of theory, Potential energy surface analysis shows that the stereoselectivities of the hydroxylactam resulting is also controlled by the borane reagent conformations, with a good enantioselectivity. It means, the stereoselectivity of the reaction depends on the chirality of the catalyst, and the regioselectivity depend on the nature of the substrate used.

**Keywords:** Meso-cyclic imides, hydroxylactam, asymmetric desymmetrization, theoretical study.

**Introduction**

The asymmetric desymmetrization of prochiral molecules in symmetrical bifunctional compounds has proven to be a straight forward and powerful strategy in asymmetric synthesis. In particular, the asymmetric desymmetrization of meso-cyclic imides compounds by an enantioselective reduction of one of the two carbonyls led to hydroxylactams compounds with three stereocenters. Were these products form an interesting class of starting materials in the synthesis of natural products, especially in enantiopure form.

**Conclusion**

The theoretical study of the asymmetric desymmetrization of meso-cyclic compounds shows that the enantioselectivity of the hydroxylactam resulting is also controlled by the chirality of borane reagent, but the regioselectivity depend on the nature of the substrat used. Aside from the differences with the original model, the present interpretation of the origins of the stereoselectivity in these reductions recognizes the importance of the developing steric interactions during coordination expansion of the prostereogenic centers both in the nucleophilic borane reagent and in the electrophilic carbonyl substrate.

**References**

- [1] Tang-Lin Liu & *al Organic letters*, 15(2013), 1740-1743.
- [2] Mike D. Barker & *al Tetrahedron*, 62 (2006), 11663–11669.

## P52 - JCTC12

## ETUDE THEORIQUE DES PROPRIETES OPTIQUES LINEAIRES ET NON LINEAIRE (TPA) D'UNE SERIE DE CHROMOPHORES D'OLIGOTHIOPHENE

Fatima Ibersiene<sup>a\*</sup>, Odile Moutounet<sup>b</sup>, Abdou. Boucekkine<sup>b</sup>, J-F. Halet<sup>b</sup>, C. Katan<sup>b</sup> et T.B. Marder<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de thermodynamique et modélisation moléculaire, U.S.T.H.Bé, Alger, Algérie

<sup>b</sup> Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226, CNRS, Université de Rennes 1, France

<sup>c</sup> Institut für Anorganische Chemie Julius-Maximilians-Universität Würzburg Am Hubland, 97074, Würzburg, Germany

\* [fibersiene@usthb.dz](mailto:fibersiene@usthb.dz)

## Résumé

L'étude théorique présentée ici vise à rationaliser les constatations expérimentales observées sur des chromophores organiques contenant du bore tri-coordonné, elle s'appuie sur des calculs DFT pour les propriétés de l'état fondamental, comme les conformations, et TD-DFT pour les propriétés optiques linéaires et non linéaires. Une attention particulière a été portée sur l'effet de la substitution par le groupement EDOT. Un accord satisfaisant a été trouvé avec les valeurs expérimentales, cependant la substitution du thiophène central par un groupement EDOT n'apporte pas de modifications majeures aux propriétés d'absorption du composé comme il a pu être observé expérimentalement.

**Mots clés:** ONL, OPA, TPA, Oligothiophène, dimesitylboryl

L'absorption à deux photons (TPA) est un phénomène d'optique non linéaire du troisième ordre ayant un grand potentiel d'application dans des domaines aussi divers que la micro fabrication, l'imagerie médicale ou la thérapie photodynamique. De grands efforts de recherche sont ainsi déployés pour la synthèse de nouveaux chromophores ayant des réponses TPA élevées.

Dans ce contexte, une série de chromophores organiques contenant du bore tri-coordonné a été synthétisée par l'équipe de Todd Marder, à l'Université de Durham. Les propriétés d'absorption à un photon (OPA), de TPA et d'émission de ces composés ont été étudiées expérimentalement.

Le composé 5Ve (Figure 1), obtenu par la substitution du thiophène central du composé 5V par un groupement 3,4-éthylènedioxythiophène (EDOT) présente un comportement particulier caractérisé par une augmentation de la section efficace d'absorption à deux photons (2) aux grandes longueurs d'onde. Le calcul des propriétés ONL, en particulier les spectres OPA et TPA, la méthode développée par S. Tretiak, a été employée. Les résultats obtenus sont globalement en bon accord avec les données expérimentales disponibles autant pour les amplitudes que pour les positions spectrales. L'accord quantitatif est satisfaisant étant donné les approximations.

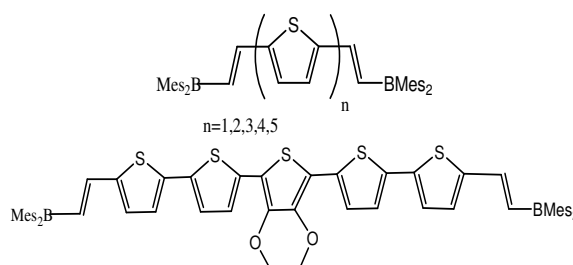


Figure 1. Chromophores à base de groupements dimésitylboryles et thiophènes : IV-V (haut) et analogue 5Ve (bas) obtenu par substitution du thiophène central par un éthylènedioxythiophène dans le dérivé 5V

## Références

L. Ji, R.M. Edkins, L.J. Sewell, A. Beeby, A..S. Batsanov, K.Fucke, M. Drafz, J. A. K. Howard, O. Moutounet, F. Ibersiene, A. Boucekkine, E. Furet, Z. Liu, J.F. Halet, C. Katan, and T. B. Marder, Chem. Eur. J., 20(2014), 13618 – 13635.

## P53 - JCTC12

## REACTION DE CYCLOADDITION AZOTURE-ALCYNE CATALYSEE PAR LES COMPLEXES TREN DE CUIVRE (I)

Djamila Ikhlef<sup>\*a</sup>, Jean Yves Saillard<sup>b</sup>, Samia Kahlal<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Gestion et Valorisation des Ressources Naturelles et Assurance Qualité, Université de Bouira, Bouira, Algérie<sup>b</sup> UMR-CNRS 6226 "Institut des Sciences Chimiques de Rennes", Université de Rennes 1, Rennes Cedex, France.<sup>\*</sup> [ikhlefdjimi@yahoo.fr](mailto:ikhlefdjimi@yahoo.fr)**Résumé**

La réaction de cycloaddition 1, 3 dipolaire entre un azoture organique et un alcyne terminal représente le chemin direct qui mène à la formation des composés cycliques et hétérocycliques à cinq chaînons, les 1, 2, 3-triazoles, ces derniers sont d'origine synthétique et constituent une classe importante des composés organiques en raison de leurs diverses applications très importante dans l'industrie pharmaceutique et l'industrie agricole. Les propriétés intéressantes des composés triazoles ont été à l'origine des différentes recherches sur le développement de nouvelles techniques de synthèse de ces composés.

La réaction de cycloaddition Azoture-Alcyne (AAC) catalysée par le cuivre (I) est parmi diverses réactions répondant aux exigences du concept de « chimie click » et la plus généralement utilisée, elle mène d'une manière sélective et rapide à la formation des composés 1,4-disubstitué 1, 2,3-triazoles.

Nous présentons dans ce travail nos résultats théoriques obtenus pour l'étude des deux chemins réactionnels proposés pour la réaction AAC catalysée par le complexe Tren du Cuivre (I) ( $[Cu(Tren)]^+$ ).

La réaction de cycloaddition 1,3 dipolaire entre un azoture organique et un alcyne terminal représente le chemin direct qui mène à la formation des composés cycliques et hétérocycliques à cinq chaînons, les 1, 2,3-triazoles, ces derniers sont d'origine synthétique et constituent une classe importante des composés organiques en raison de leurs diverses applications très importante dans l'industrie pharmaceutique et l'industrie agricole. Les propriétés intéressantes des composés triazoles ont été à l'origine de différentes recherches sur le développement de nouvelles techniques de synthèse de ces composés.

La réaction de cycloaddition Azoture-Alcyne (AAC) catalysée par le cuivre (I) est parmi diverses réactions répondant aux exigences du concept de « chimie click » et la plus généralement utilisée, elle mène d'une manière sélective et rapide à la formation des composés 1,4-disubstitué 1, 2,3-triazoles.

Nous présentons dans ce travail nos résultats théoriques obtenus pour l'étude des deux chemins réactionnels proposés pour la réaction AAC catalysée par le complexe Tren du Cuivre (I) ( $[Cu(Tren)]^+$ ).

**Mots clés:** Cycloaddition de Huisgen, Chimie Click, réaction CuAAC,

**Références**

- [1] C. W. Tornøe, C. Christensen, M. Meldal, *J. Org. Chem.*, 67 (2002) 3057–3062; V. V. Rostovtsev, L. G. Green, V. V. Fokin, K. B. Sharpless, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 41(2002) 2596-2599.
- [2] A. Padwa, *1, 3-Dipolar Cycloaddition Chemistry*, Ed. Wiley: New York, 1984; A. Padwa, W.H. Pearson, *Synthetic Applications of 1, 3 Dipolar Cycloaddition Chemistry toward Heterocycles and Natural Products*, Eds. Wiley: New York, 2002; A. Padwa, W. Lwowski, In *1, 3-Dipolar cycloaddition Chemistry*, Ed. Wiley: New York, 1984.
- [3] L. Zhang, X. Chen, P. Xue, H. H. Y. Sun, I. D. Williams, K. B. Sharpless; V. V Fokin, G. Jia, *J. Am. Chem. Soc.*, 127(2005) 15998-15999; B. C. Boren, S. Narayan, L. K. Rasmussen, L. Zhang, Zhao, H. Lin, Z.; Jia, G.; Fokin, V. V. *J. Am. Chem Soc.* 130 (2008).8923-8930; L. K. Rasmussen, B. C. Boren, V. V. Fokin, *Org. Lett.* 9(2007) 5337-5339.
- [4] V. V. Rostovtsev, L. G. Green, V. V. Fokin, K. B. Sharpless, *Angew. Chem., Int. Ed.* 41(2002) 2596-2599.



## P54 - JCTC12

## L'APPROCHE DFT/ZORA/COSMO: OUTIL DE CHOIX POUR L'ETUDE DU COMPORTEMENT REDOX DES COMPLEXES ORGANOMETALLIQUES D'ACTINIDES

Farida Kias<sup>a\*</sup>, Fatiha Talbi<sup>a</sup>, Aziz Elkechai<sup>a</sup>, Abdou Boucekkine<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri (UMMTO), Tizi-Ouzou, Algérie<sup>b</sup> Laboratoire de Sciences Chimiques, UMR-CNRS 6226, Université de Rennes 1, Rennes, France\* [faridakias@yahoo.fr](mailto:faridakias@yahoo.fr)**Résumé**

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dans son approximation réulière d'ordre zéro (ZORA) a été utilisée pour explorer les propriétés structurales et électroniques de complexes organométalliques de l'uranium (IV)  $\text{tmp}_2\text{U}(\text{BH}_4)_2$ ,  $\text{tmp}_2\text{U}(\text{CH}_3)_2$ ,  $\text{Cp}_2^*\text{U}(\text{CH}_3)_2$ ,  $\text{Cp}_2^*\text{U}(\text{BH}_4)_2$  et  $\text{Cp}^*_2\text{UF}_2\text{Py}$ . Les géométries moléculaires, issues des calculs d'optimisation, reproduisent correctement les données expérimentales obtenues par RX. Concernant le comportement redox, une très bonne corrélation linéaire ( $R^2 = 0.99$ ) a été obtenue entre les affinités électroniques calculées et les potentiels de demi-vague de réduction expérimentaux  $E_{1/2}$  obtenus par électrochimie. Cette étude a permis de mettre en évidence l'importance des effets du solvant et du couplage spin-orbite, dont la prise en compte est nécessaire afin de réaliser le bon accord théorie-expérience.

**Mots clés:** Uranium (IV), Complexes organométalliques, DFT (ZORA), Affinité électronique, couplage Spin-Orbite, Orbitales 5f.

**Introduction**

Les complexes d'uranium (IV) qui sont très répandus en chimie organométallique des actinides, méritent une attention spéciale. L'objectif principal de ce travail consiste à explorer les propriétés redox des complexes étudiés [1] en utilisant la DFT/ZORA/BP86/TZP.

**Principaux résultats**

Tout d'abord, on a constaté un bon accord entre les résultats obtenus à partir des optimisations de géométries et les données expérimentales disponibles, à savoir celles de  $\text{Cp}^*_2\text{U}(\text{BH}_4)_2$  et de  $\text{Cp}^*_2\text{U}(\text{Me})_2$ . En effet, les distances U...B et U-C (Me) de 2.529 et 2.429 Å sont très proches des valeurs expérimentales 2.58 et 2.42 Å respectivement.

L'étude du comportement redox a permis d'obtenir notamment une très bonne corrélation ( $R^2=0.99$ ) entre les affinités électroniques EA calculées par DFT et les potentiels de demi-vague de réduction expérimentaux  $E_{1/2}$ , mesurés par électrochimie.

Les analyses des charges de Hirshfeld et de Mulliken nous ont permis de montrer les principaux transferts des charges à l'intérieur des systèmes moléculaires étudiés. D'autre part, ce travail a mis en évidence le rôle crucial joué par les orbitales 5f de l'uranium dans la covalence et la stabilité des complexes étudiés.

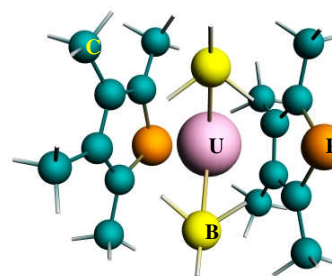


Fig. 1 : géométrie du complexe  $\text{tmp}_2\text{U}(\text{BH}_4)_2$

**Conclusion**

Cette étude confirme, de façon définitive, après les travaux antérieurs de l'équipe, la fiabilité et l'efficacité de la méthode quantique choisie DFT/ZORA/COSMO pour le traitement des propriétés redox des complexes organométalliques d'actinides, et plus particulièrement de l'uranium.

**Références**

[1] R.K. Thomson, C.R. Graves, B.L. Scott and J.L. Kiplinger, Dalton Trans, 39 (2010), 6826.



## P55 - JCTC12

## REDOX PROPERTIES OF A SERIES OF MIXED-SANDWICH URANIM (III) COMPLEXES. A RELATIVISTIC DFT INVESTIGATION

Farida Kias<sup>a</sup>, Fatiha Talbi<sup>a</sup>, Aziz Elkechai<sup>a</sup>, Abdou Boucekkine<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri (UMMTO), Tizi-Ouzou, Algérie<sup>b</sup> Laboratoire de Sciences Chimiques, UMR-CNRS 6226, Université de Rennes 1, Rennes, France\* [faridakias@yahoo.fr](mailto:faridakias@yahoo.fr)**Abstract**

The structural and electronic properties of a series of uranium (III) mixed-sandwich complexes  $[U(COT^{TIPS2})(Cp^{EMe4})]$  ( $Cp^{EMe4} = EC_4Me_4$ , E is N, P, or As, and  $COT^{TIPS2} = C_8H_6\{1,4-Si^iPr_3\}$ ) have been explored using density functional theory (DFT) in the framework of the relativistic zeroth order regular approximation (ZORA). The solvent effects are taken into account using the COSMO (Conductor Screening Model) solvation model. A good agreement has been achieved between the calculated geometrical parameters and the available experimental data<sup>1</sup>. The second step of our work is to investigate the redox behavior of these new mixed sandwich uranium (III) compounds which allows us to estimate their ionization energies (during the oxidation process). A very good linear correlation was found between the computed ionization energies at ZORA/BP86/TZP level and the experimental half-wave oxidation potentials  $E_{1/2}$  (see fig. 1).

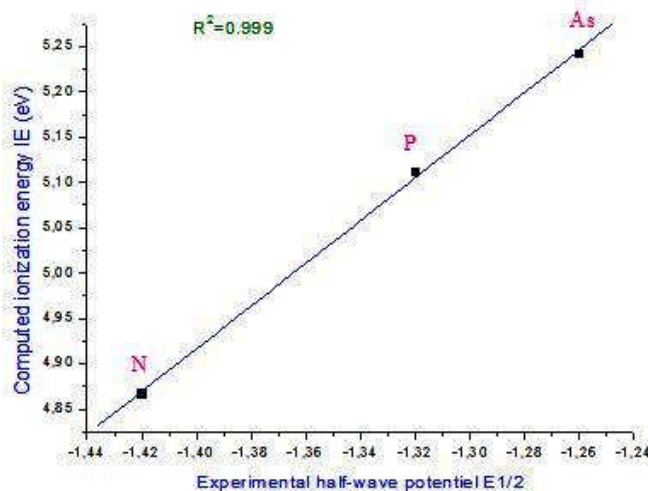


Fig. 1: Correlation between computed IE and  $E_{1/2}$

Our study brings to light the importance of spin-orbit coupling and solvent effect which must be taken into account in order to achieve the best agreement between theory and experiment. Also, the molecular orbital analysis underlines the crucial role played by the 5f orbitals of the central metal. An excellent correlation is found between the variations of the uranium Hirschfeld charges during the oxidation process and the experimental oxidation potential, result similar to that obtained in previous study<sup>2</sup>.

**Key Words :** DFT, Uranium complexes, 5f Orbital, COSMO model, Redox Properties

**References**

- [1] P. J. Kahan, F. Geoffrey, N. Clive, S. M. Roe, F. Nief, *New J. Chem.*, 39, 7602 (2015).  
 [2] A. Elkechai, F. Kias, F. Talbi, A. Boucekkine, *J Mol Model.*, 20 (2014).

## P56 - JCTC12

## THEORETICAL STUDY OF SOME LOWEST ELECTRONIC STATES OF CsO

S. Koudjeti<sup>a</sup>, K. Merabti<sup>a</sup>, S. Azizi<sup>a</sup>, B. Mehnen<sup>b</sup>, S. Ben Yaghlane<sup>b</sup>, N. E. Jaidane<sup>b</sup> and M. Hochlaf<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique Théorique, Université Abou Bekr Belkaïd, 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

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

**Abstract**

The electronic structure calculations were performed using the MOLPRO program[1]. We calculated the potential energies using highly correlated ab initio methods, namely the complete active space self-consistent field (CASSCF) approach [2] followed by the internally contracted multireference configuration interactions (MRCI) method [3]. In these calculations, different basis sets have been used for oxygen 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] and compared with literature values [5].

**Keywords** : CsO molecule, ab initio calculations, potential energy curves, spectroscopic constants.

**References**

- [1] MOLPRO is a package of ab initio programs written by H.J.Werner and P.J.Knowles.
- [2] P.J.Knowles and H.J.Werner, Chem.Phys.Lett.115,259,1985.
- [3] H.J.Werner and P.J.Knowles, J.Chem.Phys.89,5803,1988.
- [4] B. Numerov, Publs. observatoire central astrophys. Russ. 2, 188, 1933.
- [5] D.Kaen, M.Korek and S.N.Abdulal, Journal of Modern Physics, 2015, 6, 1889.

## P57 - JCTC12

# ADSORPTION MODEL FOR H<sub>2</sub> AND CO ON SINGLE CRYSTAL METAL SURFACE WITH MEAN FIELD THEORY AND (DFT) CALCULATION

L. Krim<sup>a\*</sup>, D. Hammoutène<sup>a</sup>, A. Bouferguene<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB BP32 El Alia 16111 Bab Ezzouar, Alger, Algeria.*

<sup>b</sup> *Faculty Saint Jean, University of Alberta, Edmonton, Alberta, Canada.*

\* [lamia\\_krim@yahoo.fr](mailto:lamia_krim@yahoo.fr)

## Abstract

In the vast literature that was devoted to the ZGB model [1], the adsorption of the reactants was always assumed to occur in the top configuration. The intent of this contribution is to investigate a more complicated two-step monomer/dimer model reaction, mimics the hydrogenation of CO into formaldehyde, in which the reacting species adsorb on distinct sites on the single crystal metal surfaces. It was found that the lack of correlation between surface concentrations leads to a dramatic breakdown of the site approximation which did not occur when only equivalent surface sites are used.

**Keywords:** ZGB model, Mean Field Theory, site adsorption

## Introduction

Catalytic steps contribute to approximately 90% of the production processes of industrial chemicals. In addition, catalysts are a key component in most approaches to the reduction of pollutants, such as those originating from combustion.

## Title:

The present work mimics the hydrogenation of CO into formaldehyde on Ni(100) surface:



In this context in addition to the top configuration, referred to as top(A)/top(B), we also consider based on experimental evidence [2] the cases labeled FFH(A)/BB(B) and FFH(A)/top(B) in which the species A (hydrogen) occupies four-fold Hollow (FFH) sites whereas B (CO) is top or Bridge-Bonded (BB) to the surface.

## Conclusion

The Mean Field Theory (MFT) simulation results are compared with those obtained from a (DFT) calculation.

## Acknowledgments

The authors would like to thank the Agence Thématique de Recherche en Sciences et Technologie-ATRST-DGRSDT-MESRS for their grant through Nour21 research program.

## References

- [1] W. Ahmad, Chin. Phys. Lett. 26, 036401 (2009).  
 [2] A. Grossmann, W. Erley, H. Ibach, Surf. Sci. 330, L646 (1995).

## P58 - JCTC12

ETUDE DE LA STRUCTURE ELECTRONIQUE DU COMPLEXE  $[(Cp^*)(dppe)M-(C\equiv C)_n-$   
 $M(dppe)(Cp^*)]^{0/+/+2}$  : M=Fe, Ru (n=2-6)

Abdelkader Ladjarafi<sup>a\*</sup>, Karine Costuas<sup>b</sup>, Hacène Meghezzi<sup>a</sup>, Jean-François Halet<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB, Alger, Algérie

<sup>b</sup> Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS - Université de Rennes 1, Rennes Cedex, France

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

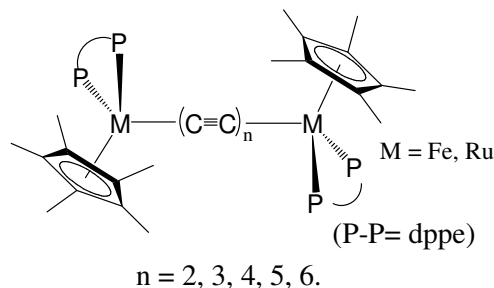
### Résumé

Afin d'améliorer ou de modifier les propriétés intrinsèques des "fils moléculaires", plusieurs possibilités s'offrent aux expérimentateurs; la première d'entre elles consiste à jouer sur la longueur de l'espaceur  $-(C\equiv C)_n-$ , dans le but d'accroître les interactions entre les centres métalliques. En changeant le nombre de carbones du pont, on modifie les propriétés du complexe ; cette étude qualitative a pour but de comprendre ce phénomène et d'interpréter l'influence de la longueur de la chaîne carbonée sur les propriétés électroniques de ce genre de composés. Des calculs DFT, avec le code Gaussian 09 et la méthode B3LYP/LANL2DZ, ont été effectués dans le but d'expliquer ce phénomène et de rationaliser les résultats obtenus expérimentalement.

**Mots clés:** complexes organométallique; oxydation; densité de spin; optique non linéaire; DFT.

### Introduction

Au cours des dernières années, les composés organométalliques avec des centres métalliques séparés par un pont organique conjugué, le plus souvent carboné [1], ont fait l'objet d'un très grand nombre d'études, du fait de leurs importantes propriétés magnétiques et de transfert électronique. Dans le domaine de l'électronique moléculaire, les complexes polynucléaires riches en carbone sont plus riches en électron et présentent des propriétés redox-active particulièrement intéressantes, notamment concernant le stockage et le traitement de l'information. Les complexes bimétalliques avec des ponts poly-acétylures,  $M-(C\equiv C)_n-M$  où M = Fe ou Ru, constituent la classe la plus fondamentale de fils moléculaires à base de carbone; ils ont été proposés pour la construction de dispositifs électroniques nanoscales. De plus, la chaîne carbonique possède une capacité fascinante d'obtenir, par médiation, l'interaction magnétique et de négocier l'action réciproque magnétique [2].



### Conclusion

L'influence de l'espaceur ou ponts poly-acétylures sur les propriétés électroniques des complexes  $M-(C\equiv C)_n-M$  où M = Fe ou Ru, a été étudiée lors des processus de première et seconde oxydation. La détermination théorique des potentiels d'ionisation et des énergies totales a montré que les complexes neutres sont plus stables que leurs congénères cationiques, le fer s'avérant plus stabilisant que le ruthénium. L'analyse des orbitales moléculaires a montré que les HOMO des complexes à base de ruthénium possèdent un caractère métallique plus fort que celles des complexes du fer.

### Références

- [1] M. I. Bruce, P. J. Low, *Adv. Organomet. Chem.*, 50 (2004) 179-444.  
 [2] V. Balzani, A. Credi, M. Venturi, *Molecular Devices and Machines*; Wiley-VCH, Weinheim, 2008.

## P59 - JCTC12

### BONDING INTERACTIONS IN GLDA COMPLEXES

Aicha Lakehal<sup>a,\*</sup>, Salima Lakehal<sup>b,c</sup>

<sup>a</sup> Department of Chemistry, Faculty of Sciences, University of Batna2 PB 05000 Batna, Algeria

<sup>b</sup> Laboratoire Chimie des matériaux et des vivants: Activité, Réactivité Université Batna1, 05000- Algérie,

<sup>c</sup> Département de sciences de la matière, faculté des sciences exactes, Université d'Oum el Bouaghi PB 04000 Algerie

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

#### Abstract

The structural and bonding characteristics of the L-glutamic acid N,Ndiacetic acid (GLDA) complexes of 8 metal ions ( $Al^{3+}$ ,  $Ga^{3+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Pb^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ,  $Hg^{2+}$ ) were investigated by means of density functional theory computations. The ionic vs. covalent contribution in the bonding was assessed by energy partitioning analysis and Atoms in molecule analysis, while the details of the donor–acceptor interactions were determined by natural bond orbital (NBO) analysis.

**Keywords :** DFT, AIM, GLDA, ETS, NBO

#### Introduction

Hydrometallurgical, electroplating, tanning, as well as dyeing, textile, electrochemical industries are considered to be one of the largest sources of heavy metals in waste water which are particularly dangerous for the environment and living organisms. Efficient removal and recovery of heavy metals from industrial wastewater streams is a major challenge. The combined use of complex agents such as Oxalic acid, malonic acid, glycine, citrate, nitrilotriacetic acid (NTA), iminodiacetic acid (IDA), diethylenetriamine pentaacetic acid (DTPA), and L-glutamic acid N,Ndiacetic acid tetrasodium salt (GLDA) with ion exchange membranes has received much attention [1]. It seems to be an effective technique not only for concentration of metal ions but also for their separation. In spite of the practical importance of these complexes, the exact nature of the bonding is not known.

In the present study the structural and bonding characteristics of the GLDA complexes of 8 metal ions ( $Al^{3+}$ ,  $Ga^{3+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Pb^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ,  $Hg^{2+}$ ) were investigated by means of density functional theory computations. The computed molecular geometries were compared to those in the crystal. We focus on the metal–ligand interactions and analyse the bonding using energy partitioning analysis, AIM method and NBO analysis.

#### Computational details

DFT calculations were carried out using the Amsterdam density functional (ADF) program developed by Baerends et al [3]. Electron correlation was treated within general gradient approximation with the Perdew, Burke, and Ernzerhof PBE functional [4]. Relativistic corrections were taken into account with the use of the relativistic scalar zero-order-regular approximation method. The bonding interactions have been analyzed by means of ETS-NOCV approach which is a combination of the extended transition state (ETS) [2] method with the natural orbitals for chemical valence (NOCV) scheme. The topological analyses were calculated with ADF and Dgrid using tape21 file exported from ADF.

#### Acknowledgments

We are very thankful to Pr. Henry chermette from the «Université Lyon 1 and CNRS UMR 5180 Sciences Analytiques; Laboratoire de Chimie Physique Théorique» for offering the computing facilities and helpful discussion.

#### References

- [1] Pinto, I. S. S.; Neto, I. E. E.; Soares, H. M. V. *Environ. Sci. Pollut. Res.* 2014, 21, 11893–11906. [2] T. Ziegler and A. Rauk, *Theoretica chimica acta*, 1977, 46, 1-10.  
 [3] E. J. Baerends, D. E. Ellis, P. Ros, *Chem. Phys.* 1973, 2, 41.  
 [4] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 1996, 77, 3865.

**P60 - JCTC12**  
**THEORETICAL INVESTIGATION ON HOMOLEPTIC YTTRIUM**  
**TRI-GUANIDINATES**

Salima Lakehal<sup>a,b\*</sup>, Nadia Ouddai<sup>a</sup>, Mohamed Bououdina<sup>c,d</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire Chimie des matériaux et des vivants, Activité, Réactivité Université Batna1, Algeria

<sup>b</sup> Department of Materials Sciences, Faculty of Sciences, University of Oum el Bouaghi, Algeria

<sup>c</sup> Nanotechnology Centre, University of Bahrain, P.O. Box 32038, Bahrain

<sup>d</sup> Department of Physics, College of Science, University of Bahrain, P.O. Box 32038, Bahrain

\* [lakehal.salima@yahoo.fr](mailto:lakehal.salima@yahoo.fr)

### Abstract

The electronic and molecular structures of the homoleptic Yttrium tris-guanidinate complexes  $Y[(NiPr)2CNR_1R_2]_3$ , [ $R_1 = R_2 =$  Me, Et and  $iPr$ ] have been investigated employing DFT calculations in order to understand the structures, bonding and energies of the interactions between Yttrium metal and guanidinate ligands. The effect of the substitution on nitrogen position of guanidinate in these complexes has been also investigated employing DFT and TDDFT calculations for six kinds of models obtained by alternative substitution of alkyl on nitrogen of the guanidinate ligands.

**Keywords :** DFT, TDDFT, guanidinate

### Introduction

In recent years guanidinate ligands, an isoelectronic alternative to cyclopentadienyl ligands, have attracted increasing attention as ancillary ligands in the coordination and organolanthanide chemistry, as well as providing tuneability in terms of steric and electronic properties by variation of the substituents R,  $R_1$  and  $R_2$  on the nitrogen atoms. The bidentate chelating effect of the guanidinate ligands is expected to enhance the thermal/chemical stability of the resulting metal complexes and thus make them suitable precursors for metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) and atomic laser deposition (ALD) (1). To date, a very few homoleptic tris-guanidinate rare-earth complexes have been reported in the literature (2). Very recently, Milanov et al. synthesized homoleptic rare-earth guanidinate complexes, and studied their structure and reactivity in order to evaluate them as precursors for MOCVD and ALD of rare-earth oxide films (3). In the present study, a systematic examination by relativistic density functional theory (DFT) and time-dependent DFT (TDDFT) of the electronic structures, ligand effects and optical properties of several Yttrium guanidinate complexes, with methyl, ethyl and isopropyl as guanidinate ligands was performed. The theoretical models were first presented and described in detail and then a new computational set up with the application of quantum relativistic DFT methods was presented. A summary of the new findings will be presented then compared with some experimental results and finally their possible impacts on the understanding of guanidinate bonding are discussed.

### Conclusion

The results reveal that the substitution position plays a crucial role in the geometric structure by affecting the torsion angle and the HOMO-LUMO transitions. The energy decomposition analysis indicates a majority of ionic bonding in all systems; the exception is in the  $M4(Y[(N_YR)_2CNCR_1R_2]_3; R = Et \text{ and } R_1=R_2=H)$  which present a significant degree of covalency.

### References

- [1] Milanov, A.P., Thiede, T.B., Devi, A., Fischer, R.A. J. Am.Chem. Soc. (2009) ,17062 .
- [2] Pang, X., Sun, H., Zhang, Y., Shen, Q., Zhang, H., Eur. J. Inorg.Chem. (2005), 1487.
- [3] Milanov, A.P., Fischer, R.A., Devi, A. Inorg. Chem. 2008, 11405.

## P61 - JCTC12

## THEORETICAL STUDY OF THE GROUPMENT METHYL TRANSFER REACTION IN THE IMIDATES N-ACYLATED

Rezika Larabi, Meziane Brahimi

*Laboratoire de Physico Chimie Théorique et de Chimie Informatique. Faculté de Chimie. USTHB. Alger. Algeria.*  
[razi\\_larabi@yahoo.fr](mailto:razi_larabi@yahoo.fr)

**Abstract**

Methyltransferase is a group of transferase that catalyzes the intermolecular transfer of a methyl group from donor to an acceptor. Derivatives of vitamin B12 are used in Methyl Group Transfer (MGT) in biological processes [1]. Several mechanisms have been proposed to describe the MGT in the DNA reparation and in some biological systems [2].

To understand the structure, the mechanism and the mode of transfer of the methyl group in the enzymes, we consider molecular models of small size which makes this type of transfer. On one hand, we consider one MGT and two MGT which occur by step or by concerted mechanism. MGT and Proton Transfer (PT) play important roles as the regeneration of the DNA and electronic transfers assisted by proton displacement, respectively in several biological mechanisms [3]. In this work, we purpose new MGT assisted by the PT in Small biological systems. The theoretical study was carried out at the DFT level with the 6-31G\* basis. All geometries were fully optimized without any constraints.

**Keywords:** Imidates NHMF, NMMF, Proton Transfer, methyl group Transfer, HF and DFT.

**References**

- [1] Yan kung, Nozomi Ando, Tzanko I. Doukov, Leah C. Blasiak, Günes Bender, Seravalli, Stephen W. Ragsdale and Catherine L. Drennan, *Nature*, (2012)
- [2] Polina Georgieva, Fahmi Himo, *Chemical Physics Letters*, 463 (2008) 214–218.
- [3] Larabi R., Abtouche S., Brahimi M, *J. Mol. Model* (2014) 20:2302.



## P62 - JCTC12

CALCULS MONTE-CARLO CINÉTIQUE DES COEFFICIENTS DE DIFFUSION DES DÉFAUTS PONCTUELS  
DANS LE NICKEL MASSIFKahina Lounis<sup>a\*</sup>, El Hocine Megchiche<sup>a</sup>, Hand Zenia<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ), Université Mouloud Mammeri, BP 17, 15 000 Tizi-Ouzou, Algérie<sup>b</sup> Laboratoire de Physique Théorique, Université Abderrahmane Mira, Campus de Targa Ouzemour, Dz-06000, Béjaïa, Algérie\* [louniskahina21@gmail.com](mailto:louniskahina21@gmail.com)**Résumé**

Les événements associés à la diffusion sont rares. Il est donc presque impossible de les simuler à l'aide de méthodes comme la dynamique moléculaire, et encore moins avec les méthodes dites de premiers principes. Dans les cas de diffusion simples (autodiffusion, diffusion interstitielle de l'oxygène dans le nickel) les coefficients de diffusion peuvent être obtenus par une formule analytique. Celle-ci requiert la connaissance de paramètres, tels que la barrière de diffusion et les fréquences d'attaque. Mais pour étudier des cas un peu plus complexes, tels que la diffusion de l'oxygène en présence de lacunes, il est alors nécessaire de recourir à la simulation. Et la méthode appropriée pour ce genre de simulation est la méthode Monte Carlo cinétique (MCC) [1]. A cet effet, nous avons implémenté la méthode à travers un code en C++. Avec ce type de langage de programmation, le programme se prête facilement pour une exploitation en parallèle sur des machines à multiprocesseurs en faisant appel à l'interface MPI (Message Passing Interface). Ceci nous permettra ainsi de traiter des boîtes de simulation assez grandes, et par conséquent, de reproduire plus fidèlement les trajectoires mises en jeu dans les expériences. L'implémentation de la méthode en série est achevée. Nous proposons de présenter, dans cette manifestation scientifique, les résultats obtenus concernant les coefficients de diffusion de la monolacune, d'une bilacune, d'un oxygène interstitiel, ainsi que la diffusion de l'oxygène en présence d'une monolacune. Les paramètres énergétiques utilisés sont ceux issus de l'étude *ab initio* effectué par Megchiche et al. [2, 3]. Concernant le coefficient de diffusion d'une monolacune, nous trouvons un bon accord avec les mesures expérimentales de Bakker [4] et Maier [5], avec un couple de paramètres qui tiennent compte des effets de la température, et ceci à travers l'expansion du réseau [3]. Les résultats de nos calculs, concernant le coefficient de diffusion des bilacunes, indiquent que la contribution de ce type de défauts dans le processus d'auto-diffusion, est négligeable (de l'ordre de  $10E-05$ ) comparativement aux contributions des monolacunes. En ce qui concerne la diffusion de l'oxygène par un mécanisme interstitiel ou en présence d'une monolacune, nous constatons un meilleur accord entre nos résultats et les données expérimentales, en tenant compte de l'expansion du réseau [6] et en utilisant la donnée expérimentale de l'énergie solubilité de l'oxygène dans le nickel [7].

**Mots clés / Keywords :** Nickel, lacunes, diffusion, oxygène, Monte-Carlo cinétique.**Références**

- [1] A. Bortz, M. Kalos, and J. Lebowitz, *Journal of Computational Physics*, vol. 17 (1975), pp 10-18.
- [2] E. H. Megchiche, Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier Toulouse III, (2007).
- [3] E. H. Megchiche, S. Pérusin, J. -C. Barthelat and C. Mijoule, *Physical Review B*, vol. 74 (2006), p 064111.
- [4] H. Bakker, *physica status solidi (b)*, vol. 28 (1968.), pp 569–576,
- [5] K. Maier, H. Mehrer, E. Lessmann, and W. Schüle, *physica status solidi (b)*, vol. 78 (1976), pp 689–698
- [6] E. H. Megchiche, M. Amarouche, and C. Mijoule, *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 19 (2007), p 296201.
- [7] J.-W. Park and C. J. Altstetter, *Metallurgical Transactions A*, vol. 18 (1987), pp. 43–50.

## P63 - JCTC12

## REDUCTION OF ALIPHATIC KETONES CATALYSED BY RU-PROLINE AMIDE: EXPERIMENTAL AND THEORETICAL APPROACH

Samira Maou<sup>a\*</sup>, Nadia Nebbache<sup>a</sup>, Yazid Meftah<sup>a</sup>, Françoise Delbecq<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de chimie appliquée, Université mohamed khider, Biskra, Algerie<sup>b</sup> Laboratoire de chimie, École normale supérieure, Lyon, France\* [s.maou@univ-biskra.dz](mailto:s.maou@univ-biskra.dz)**Abstract**

A highly efficient Ru catalyst based on an chiral, very simple, and inexpensive proline amide ligand has been developed for the asymmetric transfer hydrogenation (ATH) of aliphatic ketones. This complex is able to catalyze the ATH of aliphatic ketones by using isopropyl alcohol as the hydrogen source. The enantioselective reduction of aliphatic ketones, over short reaction times, with moderate enantiomerically enriched (ee up to > 65 %) . DFT mechanistic studies show that the hydrogen-transfer process is stepwise. Moreover, the origin of the enantio-selectivity has been rationalized.

**Keywords :** ATH, Aliphatic ketones, DFT, Ru.

**Introduction**

The asymmetric reduction of prochiral ketones using catalytic hydrogen-transfer conditions represents a mild and highly attractive route for the formation of enantiomerically enriched secondary alcohols [1]. In general, catalytic reductions of aliphatic ketones is less documented and in most cases are efficient for only a few substrates.

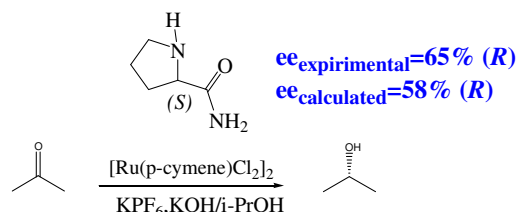
**ATH of aliphatic ketones**

Figure 1. Ru-catalyzed ATH of aliphatic ketones with [Ru (p-cymene)Cl<sub>2</sub>]<sub>2</sub> and (L) proline amide. ee is the enantiomeric excess

**Conclusion**

Our results show that a ruthenium complex bearing the chiral ligand proline amide is an excellent catalyst for the ATH of aliphatic ketones in isopropyl alcohol in short reaction times and with moderate enantioselectivities, Considering the reaction mechanism, the transfer hydrogenation of aliphatic ketones in isopropyl alcohol catalyzed by [Ru(para-cymene)L] (L=proline amide) was theoretically analyzed. The results show that the reaction takes place in two steps, in a similar manner to that described by Noyori et al. The remaining pathways were theoretically evaluated on the basis of the energy barriers for the rate-determining hydride-transfer step.

**References**

[1] Francisco Foubelo, Carmen Nájera, Miguel Yus, Tetrahedron: Asymmetry, 26 (2015) pp 796-790.

## P64 - JCTC12

## ETUDE THEORIQUE DE LA REACTION D'ABSTRACTION D'ATOME D'HYDROGENE DU METHANOL

Nouara Massout<sup>a\*</sup>, Z. Benmesbah<sup>a</sup>, O. Ouamerali<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Chimie Théorique Computationnelle et Photonique, (U.S.T.H.B), Alger, Algerie

\* [nouara.massout@hotmail.fr](mailto:nouara.massout@hotmail.fr)

### Résumé

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

Dans le cadre de cette étude nous avons évalué à quel niveau de qualité se situe les nouvelles fonctionnelles DFT: B3LYP, BMK et M05, en considérant la réaction d'abstraction d'atome d'hydrogène deux chemins: Le premier chemin réactionnel  $\text{CH}_3\text{OH}+\text{H}\rightarrow\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}_2$  et le deuxième chemin réactionnel  $\text{CH}_3\text{OH}+\text{H}\rightarrow\text{CH}_3\text{O}+\text{H}_2$  en phase gazeuse. Les réactions d'abstraction d'atomes d'hydrogène sont très importantes dans les processus de combustion, d'oxydation et de pyrolyse

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

### Introduction

Dans le cadre de nos travaux théoriques sur les radicaux libres nous avons étudié la réaction d'abstraction d'atome d'hydrogène du méthanol en phase gazeuse. Deux chemins réactionnel possible: Le premier chemin  $\text{CH}_3\text{OH}+\text{H}\rightarrow\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}_2$  et le deuxième chemin réactionnel  $\text{CH}_3\text{OH}+\text{H}\rightarrow\text{CH}_3\text{O}+\text{H}_2$ .

### Méthodologie

Les calculs théoriques, utilisant le programme GAUSSIAN(09), ont été effectués avec plusieurs fonctionnelle DFT: M05 et BMK. Nous avons aussi inclus la fonctionnelle B3LYP[1] la plus couramment utilisé à des fins de comparaison. Ces trois niveaux théoriques ont été combinés avec deux bases, double- $\xi$ , avec des fonctions de polarisation pour les atomes lourds et triple- $\xi$ , avec des fonctions de polarisation et fonction diffuse pour les atomes lourds et les atomes d'hydrogènes.

Les structures géométriques d'équilibre des réactifs, des états de transition et des produits sont obtenus par une optimisation globale et caractérisée par un calcul des fréquences de vibration.

Tous les états de transition ont été optimisés et caractérisés par une fréquence imaginaire (point selle d'ordre 1)[2,3].

### Conclusion

Nous avons évalué les performances des méthodes M05 et BMK pour la prévision précise des paramètres géométriques de la réaction d'abstraction d'un atome d'hydrogène. Les résultats obtenus nous encouragent à continuer l'investigation avec des réactions plus complexes pour une meilleure évaluation de ces nouvelles fonctionnelles DFT.

### Références

- [1] J: Becke, A. D.; *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 5648. Sousa, S. F.; Fernandes, P. A.; Ramos, M. J.; *J. Phys. Chem. A*, , 111 (2007) 10439.
- [2] Gonzalez C., Schiegel H. B., "An improved algorithm for réaction path following" *J. Chem-. Phys.* 90 (1989) 2154.
- [3] Gonzalez C., Schiegel H. B., *J. Phys. Chem.* 94 (1990) 5523.

**P65 - JCTC12**  
**ÉTUDE ONIOM ET DFT DES COMPLEXES D'INCLUSION DU FLURBIPROFENE AVEC LA  $\beta$ -CYCLODEXTRINE**

Faiza Meddour<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, Algeria

[faiza\\_meddour@yahoo.fr](mailto:faiza_meddour@yahoo.fr)

### Abstract

We theoretically investigated the inclusion complexes of Flurbiprofen with  $\beta$ -cyclodextrin in a molar ratio of 1:1. Two orientations A and B were investigated by semi empirical method PM3, hybrid method (ONIOM2) and DFT. We chose B3LYP, using 6-31G (d) basis set with semi-empirical PM3 as levels for ONIOM2 method. NBO calculations were performed to investigate host-guest interaction. At last we simulated electronic excitation spectra using TD-DFT approach, and NMR by mean GIAO-DFT.

**Keywords:**  $\beta$ -Cyclodextrin, Flurbiprofen, ONIOM2, NBO, GIAO.

### Introduction

Flurbiprofen, (2-(2-fluoro-4-biphenyl)) propionic acid, is an anti-inflammatory drug used to treat the inflammation and pain of arthritis [1], however it is a poorly water soluble drug. Its low solubility limits its therapeutic application [2]. The  $\beta$ -cyclodextrin is ideal for accommodating a large number of molecules due to the perfect cavity size, efficient drug complexation and loading, availability, and relatively low cost. Flurbiprofen can form stable inclusions complexes with  $\beta$ -cyclodextrin with a 1:1 stoichiometry.

### Conclusion

The inclusion complexes of Flurbiprofen with  $\beta$ -cyclodextrin are thermodynamically favored due to their negative energies. Orientation A is most favored. The NMR spectrum of the most stable structure allowed us to conclude that the theoretical results confirm the experimental ones.

### References

- [1] Fukuhara, A., Imai, T., Inoue, K., Otagiri, M.: Effect of oral multiple-dose administration of anti-inflammatory flurbiprofen chimera drug on gastric lesion, other toxicities and disposition kinetics. *Biol. Pharm. Bull.* 18, 140–147 (1995).
- [2] Otagiri, M., Imai, T., Matsuo, N., Uekama, K.: Improvements to some pharmaceutical properties of flurbiprofen by  $\beta$ - and  $\gamma$ -cyclodextrin complexations. *Acta Pharm. Suec.* 20, 1–10 (1983).

## P66 - JCTC12

## ETUDE QUANTITATIVE DES RELATIONS STRUCTURE-ACTIVITE(QSAR) DES DERIVES DE THIAZOLIDINE-2,4-DIONE

Sihem Medjahed<sup>\*</sup>, Nouredine Tchouar<sup>a</sup>, Fatima Soualmia<sup>a</sup>, Zoulikha Sebaa<sup>a</sup>, Salah Belaidi<sup>b</sup>, 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

\* [medjahed\\_sihem@hotmail.com](mailto:medjahed_sihem@hotmail.com)

### Résumé

La modélisation moléculaire et l'analyse QSAR ont été effectuées pour déterminer quantitativement l'effet de la structure moléculaire des composés étudiés sur leur activité biologique. Des modèles mathématiques ont été développés pour prédire l'activité anti-inflammatoire de dérivés de thiazolidine-2,4-dione. La validité des modèles obtenus ont été établie par la détermination des paramètres statistiques appropriés. Le modèle mis en place a été utilisé pour prédire l'activité biologique des thiazolidine-2,4-dione étudiés.

**Mots clés:** QSAR, activité biologique, thiazolidine-2,4-dione, modèles mathématiques, anti-inflammatoire, paramètres statistiques.

### Introduction

Une relation quantitative entre la structure et l'activité est le procédé par lequel une structure chimique est corrélé avec un effet bien déterminé comme l'activité biologique [1,2].

### Etude quantitative des relations structure-activité des dérivés de thiazolidine-2,4-dione

L'étude QSAR a été réalisée sur une série bioactives de dérivés de thiazolidine-2,4-dione. La nature des groupements qui se lient sur le noyau de base des molécules étudiées affecte sur leurs propriétés physicochimiques et par conséquence sur leurs propriétés pharmacologiques.

La figure (1) présente la corrélation entre les valeurs prédites et expérimentales pour l'activité biologiques anti-inflammatoire. Du point de vue des performances statistiques, ces modèles présentent des coefficients de corrélation  $R^2$  significatifs de valeur est égale à 0.968.

### Conclusion

Le pouvoir prédictif de modèle obtenu a été confirmé par la méthode de validation croisée. Une forte corrélation a été observée entre les valeurs expérimentales et prédites des activités biologiques, ce qui indique la validité et la qualité des modèles QSAR obtenus.

### Références

- [1] T. Salah, S. Belaidi, N. Melkmi and N. Tchouar, Rev. Theor. Sci, 3 (2015) pp 355-364.  
[2] K. Dermeche, N. Tchouar, S. Belaidi and T.salah, J. Bionosci, 9 (2015) 395-40.

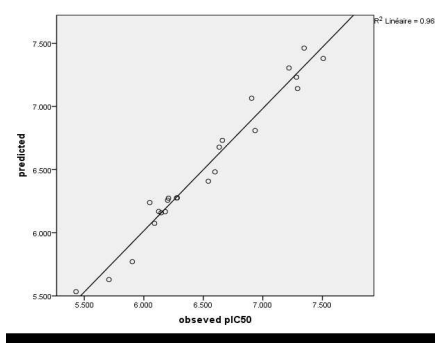


Fig. 1 : les valeurs prédites et résiduelles en fonction des valeurs expérimentales des dérivés de Thiazolidine-2.4-dione.

## P67 - JCTC12

## ETUDE THÉORIQUE DU DÉCLIN DE FLUORESCENCE DE LA YFP

Karim Merabti<sup>ab\*</sup>, Sihem Azizi<sup>a</sup>, Isabelle Demachy<sup>b</sup>, Bernard Lévy<sup>b</sup>, Jacqueline Ridard<sup>b</sup>

a Laboratoire de Physique Théorique, Université Abou Bekr Belkaid, Faculté des sciences, Tlemcen, Algérie

b Laboratoire de Chimie Physique, UMR8000, CNRS-Université Paris-Sud 11, 91405 Orsay Cedex, France

\* [hadj.merabti@gmail.com](mailto:hadj.merabti@gmail.com)

### Résumé

Il ya plus de 50 ans, la protéine fluorescente verte (GFP) était découverte dans la méduse *Aequorea Victoria* [1], elle a commencé à recueillir beaucoup d'attention après son clonage en 1992 [2] et la première démonstration de son utilité comme un marqueur fluorescent pour l'étiquetage *in vivo* a été faite en 1994 [3]. L'étude théorique, combinant des méthodes de dynamique moléculaire et de chimie quantique, des protéines fluorescentes permet de comprendre la dynamique dans les milieux protéiques et ainsi d'améliorer leurs propriétés physico-chimiques. De nombreuses études théoriques ont été menées sur les protéines de la famille GFP ces dernières années, citons, celle faite dans notre groupe, qui a permis d'étudier l'extinction de fluorescence dans la GFP et la YFP [4]. Pour la GFP, ils ont obtenu un temps moyen pour atteindre les géométries perpendiculaires où la désactivation non radiative peut avoir lieu en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Dans le cas de la YFP, ce temps moyen est environ trois fois plus petit que la valeur qu'on peut déduire des résultats.

Nous avons utilisé l'analyse des processus de changement d'état (radiatif ou non-radiatif) développée dans le groupe ThéoSim (LCP Orsay, Paris). Elle permet de prendre en compte les variations des probabilités de conversion radiative ou non-radiative en fonction des angles de torsion interne du chromophore. Appliqué au cas de la YFP sur la base de simulations moléculaires faites avec un champ de force de type AMBER, ce modèle de déclin de fluorescence par zone donne un rendement quantique et un temps de déclin de fluorescence en accord raisonnable avec les valeurs expérimentales.

### Références

- [1] Shimomura, Osamu ; Johnson, Frank H. ; Saiga, Yo : Extraction, purification and properties of aequorin, a bioluminescent protein from the luminous hydromedusan, *Aequorea*. In : *Journal of cellular and comparative physiology* 59 (1962), Nr. 3, S. 223–239.
- [2] Prasher, Douglas C. ; Eckenrode, Virginia K. ; Ward, William W. ; Prendergast, Frank G. ; Cormier, Milton J. : Primary structure of the *Aequorea victoria* green fluorescent protein. In : *Gene* 111 (1992), Nr. 2, S. 229–233.
- [3] Chalfie, Martin ; Tu, Yuan ; Euskirchen, Ghia ; Ward, William W. ; Prasher, Douglas C. : Green fluorescent protein as a marker for gene expression. In : *Science* 263 (1994), Nr. 5148, S. 802–805
- [4] Jonasson, Gabriella ; Teuler, Jean-Marie ; Vallverdu, Germain ; Merola, Fabienne ; Ridard, Jacqueline ; Levy, Bernard ; Demachy, Isabelle : Excited state dynamics of the green fluorescent protein on the nano-second time scale. In : *Journal of Chemical Theory and Computation* 7 (2011), Nr. 6, S. 1990–1997.

## P68 - JCTC12

## ETUDE DFT DE LA STRUCTURE ELECTRONIQUE ET DES PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES DE COMPLEXES ORGANOMETALLIQUES D'ELEMENTS f.

Samir Meskaldji<sup>ab</sup> Lotfi Belkhiri<sup>b</sup> et Abdou Boucekkine<sup>c</sup><sup>a</sup> Ecole Normale Supérieure d'Enseignement Technologique de Skikda<sup>b</sup> URCHEMS, Département de Chimie, Université des Frères Mentouri - Constantine 1<sup>c</sup> Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS - Université de Rennes 1, 35042 Rennes Cedex, France[samirmeskaldji@yahoo.fr](mailto:samirmeskaldji@yahoo.fr)**Résumé**

Nos travaux portent sur l'étude théorique des propriétés électroniques et structurales de complexes moléculaires d'éléments f. Les calculs réalisés au moyen de la méthode relativiste DFT/ZORA utilisant les fonctionnelles GGA BP86 et hybride B3LYP moyennant le code ADF2016.01, ont permis de reproduire correctement les résultats expérimentaux des composés étudiés. Nous avons démontré le rôle crucial des orbitales 5f dans les interactions covalentes métal-ligand.

**Mots clés :** Uranium, Complexes organométalliques, Propriétés électronique, Différentiations Ln(III)An(III), DFT/ZORA.

**Introduction**

La chimie des composés d'éléments f soulève actuellement un intérêt croissant tant au niveau expérimental<sup>1</sup> que théorique<sup>2</sup>. Parmi ces composés, ceux des complexes organométalliques d'uranium présentent des propriétés moléculaires intéressantes dont une grande flexibilité structurale et une réactivité unique de la liaison métal-ligand. Certains n'ont pas d'analogues avec les métaux de transition « nd ». De nombreux travaux théoriques ont attribué leur existence à la présence des orbitales f de valence et les effets relativistes<sup>3</sup>. Ces espèces nouvelles, tirent également profit de la stabilité relative des complexes d'actinides, souvent riches en électrons et suffisamment stables pour être isolés. Ceci leur confère des propriétés redox intéressantes qui permettent leur utilisation dans de nombreux processus de synthèse organométallique importants.

Le présent travail porte sur l'étude DFT des propriétés électronique de nouveaux complexes organométallique d'éléments « f » synthétisé récemment par Jaqueline L. Kiplinger et collaborateurs du Los Alamos National Laboratory<sup>5</sup>. Les systèmes étudiés sont des complexes potentiellement intéressants du point de vue industrielle et/ou environnementale. Les calculs ont été réalisés au moyen de la méthode relativiste DFT/ZORA/TZP utilisant des fonctionnelles de type GGA et hybride, moyennant le code ADF2016.

**Références**

- [1] David S. J. Arney, Carol J. Burns, *J. Am. Chem. Soc.* (1995) 117(37), 9448-60.  
 [2] (a) L. Belkhiri, R. Lissillour, A. Boucekkine, *Journal of Molecular Structure* (theochem) 757 (2005) 155–164; (b) S Meskaldji, A Belkhiri, L Belkhiri, ABoucekkine, M Ephritikhine. *C. R. Chimie* 15 (2012) 184–191. (c) S Meskaldji, A Zaiter, L Belkhiri, ABoucekkine. *Theor Chem Acc* (2012) 131:1151.  
 [3] (a) M. Roger, T. Arligué, P. Thuéry, M. Fourmigué, M. Ephritikhine, *Inorg. Chem.* (2005) 44, 584; (b) Meskaldji S, Belkhiri L, Arliguie T, Fourmigué M, Ephritikhine M, Boucekkine A. *Inorg Chem.* (2010) 49:3192-3200; (c) L. Belkhiri, A. Boucekkine, *J. Soc. Alger. Chim.* 15 (2005) 25-34.  
 [4] Justin K. Pagano, b, Karla A. Erickson, Brian L. Scotta, David E. Morrisa, , Rory Watermanb, , Jaqueline L. Kiplinger, *Journal of Organometallic Chemistry*. In presse (2016).



## P69 - JCTC12

## BINDING MODES STUDY BY MOLECULAR DOCKING AND DYNAMIC SIMULATIONS OF CURCUMIN AND ITS ANALOGUES

Meriem Meyar<sup>a\*</sup>, Zohra Bouakouk<sup>a</sup> and Safia Kellou<sup>a</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Physico chimie Théorique et chimie Informatique, USTHB, Alger, Algérie\*[meriemmeyar@gmail.com](mailto:meriemmeyar@gmail.com)**Abstract**

Twenty two analogs of curcumin were docked into the active site of each enzyme COX-1(1EQG.pdb) and COX-2 (3NT1.pdb). Then, molecular dynamics (MD) simulations were performed on the best docked compounds to validate the docking results. The results obtained from the docking can explain clearly the anti inflammatory activities of the different curcumin's derivatives. The MD simulations results confirm the binding modes of the studied curcuminoids and so validate the docking results. The analysis of the recognition modes through interactions with residues of each enzyme can predict which compound is the most active.

**KeyWords:** cyclooxygenase, curcuminoids, molecular docking, MD simulations

**Introduction**

Curcumin is used in the indian subcontinent not only for the preservation of food and in cooking, but for health care with no known side effects. Recently, it has been reported that curcumin exhibits anti oxidant, anti bacterian, anti cancer and anti inflammatory profiles [1, 2].

The anti inflammatory effect of curcumin involves the inhibition of an enzyme named cyclooxygenase: COX. This enzyme exists in two forms: COX-1 and COX-2 and catalyses the conversion of arachidonic acid to prostanoids. Many studies have reported that curcumin presents a preference towards COX-1 isoenzyme [1, 2]. Besides, it is reported that the derivatives of curcumin have higher inhibitory activities than curcumin itself and had a preference towards COX-1 too. Here, a molecular modeling study was performed on curcumin and some of its analogs in order to investigate the ligand-protein interactions.

**Material and Methods**

We have selected from the literature twenty two analogs of curcumin [1, 2] with available anti-inflammatory activities on the two forms of COX. Each curcuminoid was modeled using LigPrep [3] application of Schrödinger before simulation by the molecular docking in the enzyme. The three dimensional structure of COX-1 and COX-2 used here was downloaded from Protein Data B, coded 1EQG for COX-1 and 3NT1 for COX-2. Docking study was performed using Glide [3]. Then, molecular dynamics (MD) simulations were applied to validate the docking results using Desmond module of Schrödinger [3]. The stability of each system under simulation was evaluated using the RMSD, this indicates that each system has equilibrated towards the end of the simulation.

**Conclusion**

The results obtained from the docking can explain clearly the anti inflammatory activities of the different curcumin's derivatives. After performing MD simulations, all the complexes remained relatively stable during the simulation, so the binding modes of the studied curcuminoids can be confirmed.

**Acknowledgments**

The authors wish to thank the Ministry of Higher Education and Scientific Research for the purchase of Schrödinger software.

**References**

- [1] Norbert Handler, Walter Jaeger, Helmut Puschacher, Klaus Leisser and Thomas Erker, Chem. Pharm. Bull. 55(1) (2007) pp 64-71
- [2] Waqas Ahmad, Endang Kumolosasi, Ibrahim Jantan, Syed N. A. Bukhari and Malina Jasamai, Chem Biol Drug Des, 83 (2014) pp 670–681
- [3] Schrödinger-Software (2015-2), LLC, New York, NY.

## P70 - JCTC12

## PROFIL D'ABSORPTION DE RAIE DE LA VAPEUR DE CESIUM IMMERGE DANS UN BAIN DE GAZ D'HELIUM

A. Moussaoui<sup>1,2\*</sup>, K. Alioua<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Université Mohamed Chérif MESSAÏDIA, B.P. 1553, Souk-Ahras 41000, Algérie<sup>2</sup>Laboratoire de Physique de la Matière et du Rayonnement (LPMR), Université de Souk-Ahras, Algérie\* [a.moussaoui@univ-soukahras.dz](mailto:a.moussaoui@univ-soukahras.dz)**Résumé**

Calculs purement quantiques sont effectués afin de déterminer l'élargissement spectral dans les ailes lointaines des raies de césium  $D_1$  et  $D_2$  induites par les collisions avec les atomes perturbateurs d'hélium. Les courbes de potentiel des états moléculaires du dimère alcalin-gaz rare Cs-He, ainsi que les moments dipolaires de transition correspondants, sont déterminés théoriquement par un calcul *ab-initio* en se basant sur les méthodes : SA-CASSCF-MRCI, en incluant les effets des spin-orbite et les corrections de Davidson et de la BSSE. Les coefficients d'absorption sont ensuite déterminés dans le domaine des longueurs d'onde allant de 800 à 1000 nm et sur l'intervalle de température [500-3000] K. Les résultats obtenus sont comparés avec des travaux expérimentaux récents et théoriques antérieurs.

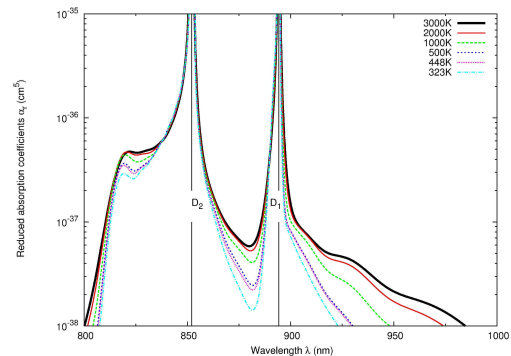
**Mots clés :** Courbes d'énergie potentielle, niveaux ro-vibrationnels, paramètres spectroscopiques, moments dipolaires de transition, spectres d'absorption, profile de raies, excimers.

**Introduction**

Ce travail a pour but la détermination des propriétés physico-chimique de l'atmosphère des naines brunes par le biais des spectres alcalin-gaz rare [1]. Ces derniers sont également utilisés dans l'élaboration de nouveau type de lasers alcalins à pompage optique (OPAL) [2] ou les lasers alcalins à pompage d'exciplexe (XPAL) [3].

**Spectres d'absorption**

Les spectres d'absorption sont dûs essentiellement aux transitions libre-libre et présentent un satellite dans l'aile bleu localisé à  $\lambda = 823$  nm indépendamment de la température. Des comparaisons avec d'autres méthodes théoriques [1] et résultats expérimentaux [4] montre un bon accord avec l'expérience.



Coefficients d'absorption réduits totale.

**Conclusion**

Nous avons localisé dans l'aile bleue un satellite au alentours de  $\lambda = 823$  nm dans le spectre total d'absorption dû aux transitions libre-libre de  $B \leftarrow X$ . Un bon accord est trouvé avec les résultats expérimentaux.

**Références**

- [1] N. F. Allard and F. Spiegelman, *A&A* . (2006) 452, 351.
- [2] A. Chattopadhyay, *J. Phys.* (2012) B 45, 035101.
- [3] J.D. Readle, C.J. Wagner, J.T. Verdeyen, T.M. Spinka, D.L. Carroll, and J.G. Eden, *Appl. Phys. Lett.* (2009) 94, 251112.
- [4] G. D. Hager, G. E. Lott, A. J. Archibald, L. Blank, D. Weeks, G. P. Perram, J. Q. S. R. T. (2014) 147, 261.

## P71 - JCTC12

**ETUDE THEORIQUE DES FORMES OXYDEES ET REDUITES  
DES HETEROPLYANIONS  $[\text{Cr}^{\text{III}}(\text{OH})_6\text{Mo}_{6-\text{N}}\text{W}_\text{N}\text{O}_{18}]^{3-}$**

Meriem Nassar<sup>a</sup>, Meriem Almi<sup>a</sup>, Lynda Merzoud,<sup>a,b</sup> Amar Saal<sup>a,b</sup> Ourida Ouameralli<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Chimie Théorique Computationnelle et Photonique, USTHB, Alger.

<sup>b</sup> Département de Chimie, UMMTO.

[meriem.nassar@gmail.com](mailto:meriem.nassar@gmail.com)

### Résumé

Les POMs sont constitués d'hétéropolyanions (HPA) et de contre-ions. Les POMs sont utilisés en catalyse parce qu'ils sont des oxydants très forts. Leur caractère oxydant est plus important que la majorité des oxydants usuels ( $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ...). De plus, les POMs sont des oxydants multiples et réversibles. Dans notre équipe, nous nous sommes proposés d'étudier au moyen des méthodes de la chimie computationnelle les formes oxydées et réduites des hétéropolyanions  $[\text{Cr}^{\text{III}}(\text{OH})_6\text{Mo}_{6-\text{N}}\text{W}_\text{N}\text{O}_{18}]^{3-}$  pour comparer leurs stabilités et leurs structures géométriques.

**Mots clés :** Hétéropolyanions, Oxocluster, Oxydoréduction, DFT

### Introduction

Les POMs sont constitués d'hétéropolyanions (HPA) et de contre-ions. Les POMs sont utilisés en catalyse<sup>1</sup> parce qu'ils sont des oxydants très forts. Leur caractère oxydant est plus important que la majorité des oxydants usuels ( $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ...). De plus, les POMs sont des oxydants multiples et réversibles.

### Etude des formes oxydées et réduites des HPAs $[\text{Cr}^{\text{III}}(\text{OH})_6\text{Mo}_{6-\text{N}}\text{W}_\text{N}\text{O}_{18}]^{3-}$

Les résultats obtenus ont montré que, thermodynamiquement les structures des HPAs sont plus stables que leurs formes oxydantes (HPAs (Ox) correspondantes qui sont à leur tour plus stables que les formes réduites HPAs (Réd). Les valeurs de l'énergie de réduction des HPAs étudiés,  $E^{\text{Réd}}$ , sont comprises entre 110 et 130 kcal/mol. Ces énergies sont élevées ; elles sont de l'ordre de l'énergie d'une liaison chimique ! Les valeurs de leurs énergies d'oxydation varient entre 17 et 28 kcal/mol.

L'analyse des structures géométriques de ces différents ions montre que les structures des HPAs à l'état réduit sont très distordues comparativement à celles des HPAs à l'état oxydé, figure 3. C'est ce qui explique d'ailleurs les valeurs des énergies élevées des HPAs dans leurs états réduits.



**Figure1.** Effet de l'oxydation et de la réduction sur la structure géométrique de l'HPA  $[\text{Cr}^{\text{III}}(\text{OH})_6\text{Mo}_4\text{W}_2\text{O}_{18}]^{3-}$  (*para*).

### Conclusion

Les résultats obtenus ont montrés aussi que les structures géométriques des formes des HPAs à l'état réduit sont très déformées comparativement à celles de l'état oxydé. C'est ce qui explique d'ailleurs les valeurs des énergies élevées des HPAs dans leurs états réduits.

### Références

[1] N. Mizuno, M. Misono, *Chem. Rev.* 98 (1998) 199.

## P72 - JCTC12

## ETUDE THEORIQUE DE L'INCLUSION DE LA TETRACAINE-HYDROCHLORIDE/BETACYCLODEXTRINE

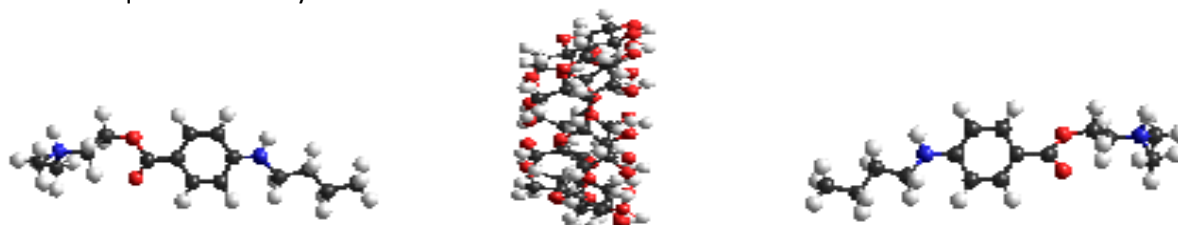
M. A. Nouairi<sup>a,\*</sup>, T. Fergoug, M. Azayez, H. Boujoures et Y. Bouhadda<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Chimie Physique des Macromolécule et Interfaces Biologiques, Faculté des Sciences, Département de Biologie, Université de Mascara, Mascara 29000, Algérie

<sup>a,\*</sup> [nouairimohammed@gmail.com](mailto:nouairimohammed@gmail.com)

### Résumé

Les cyclodextrines CDs sont des macromolécules en forme de tore capables d'encapsuler en leur structure plusieurs espèces chimiques dans un processus nommé inclusion de type Host-Guest. L'inclusion d'une molécule thérapeutique la tétracaine hydrochloride dans la  $\beta$ -CD fait l'objet de cette étude. Les résultats obtenus en utilisant des méthodes de la chimie quantique ont levé l'ambiguïté sur le mécanisme d'encapsulation. La méthode de calcul PM3 a montré que le complexe formé  $\beta$ -CD/ TCH<sup>+</sup> est thermodynamiquement plus stable quand le groupe amino de la tétracaine est inséré dans la cavité de la  $\beta$ -CD à travers la face secondaire. La formation du complexe est régie par l'effet d'ajustement de taille quand la cyclodextrine est maintenue rigide mais devient sous contrôle hydrophobe et d'interactions de type Wan-derWalls quand tout le système est libre.



**Mots clés :** Complexation, l'inclusion hôte-invité, Tétracaine hydrochloride,  $\beta$ -cyclodextrine, énergie potentielle de surface.

## P73 - JCTC12

## SAR AND QSAR MODELING OF KINASE INHIBITORS ACTIVITIES OF PYRAZOLES DERIVATIVES

Qualid Oukil<sup>a,b,\*</sup>, Toufik Salah<sup>b</sup>, Nouredine Tchouar<sup>a</sup>, Salah Belaidi<sup>b</sup>, Kamel Bentayeb<sup>a</sup>, Nabila Aoumeur<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratory of Modelling and Optimization of Industrial Systems, University of Science and Technology of Oran (USTO) 31036, Algeria

<sup>b</sup>Group of Computational and Pharmaceutical Chemistry, LMCE Laboratory, University of Biskra, BP 145 Biskra 07000, Algeria

\* [walid.oukil@outlook.fr](mailto:walid.oukil@outlook.fr)

### Abstract

QSAR studies have been performed on eighteen molecules of 1,2,3-thiadiazole pyrazolones derivatives. The compounds used are potent VEGFR-2/KDR kinase inhibitors activity. Qualitative approximations of the structure activity relationships were applied to this series of eighteen compounds to determine the role of several physicochemical properties which are used in QSAR modeling as independent variables. A multiple linear regression (MLR) procedure was used to envisage the relationships between molecular descriptors and the activity of pyrazolones derivatives. The predictivity of models was estimated by cross-validation with the leave-one-out method. Our results suggest QSAR models based of the following descriptors: HE, log P, Pol, MR and MW for the inhibitory activities of KDR kinase inhibitors. Results show high correlation between experimental and predicted activity values, indicating the validation and the good quality of the derived QSAR models.

**Keywords:** kinase inhibitors, pyrazolones Derivatives, MLR, SAR, QSAR

### Introduction

1,2,3-Thiadiazoles are heterocycles of great practical and theoretical interest. The first derivatives of 1,2,3-thiadiazole have already been prepared in the late nineteenth century but the interest in this heterocycle has been constant up to this day, and we propose that it will continue in the future. Derivatives of 1,2,3- thiadiazole are important in industry, medicine and agriculture. A lot of attention has been devoted to the thermal and photochemical decomposition reactions of the 1,2,3-thiadiazole ring because this system is the only thiadiazole isomer where loss of a nitrogen molecule can readily occur [1].

The structure-activity relationship (SAR) & Quantitative structure-activity relationship (QSAR) are among the most practical tool in computational chemistry. The fundamental idea of SAR and QSAR consists of the possibility of relationships between a set of structural properties and a particular kind of biological activity [2].

The validity of a QSAR model depends on the choice of parameters. It is important to identify and assess the most relevant quantitative parameters to be used depending on the activity and selected molecules, because the theoretical study is important to study their physicochemical properties by various theoretical methods validated after a geometric study [3].

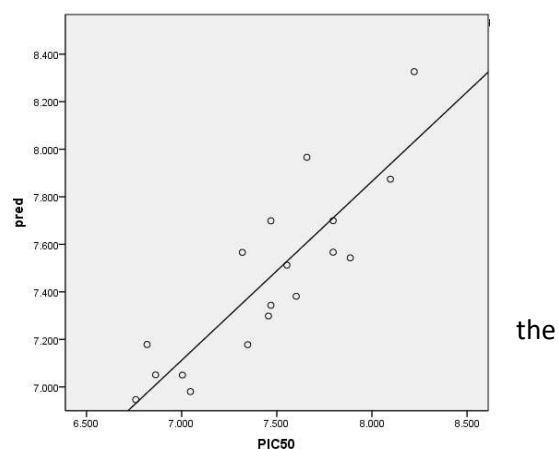
### Methods

In the present work, the inhibition of KDR kinase inhibitors, by a group of 1,2,3-thiadiazole pyrazolones derivatives was investigated to predict a QSAR model using molecular descriptors and MLR analysis. A group of eighteen pyrazolones derivatives inhibitors of kinase inhibitors was selected for the study. The structures and inhibitory activities expressed as values of IC<sub>50</sub> obtained for in vitro [4] were adopted as reported by Rabindranath Tripathy et al [5].

Multiple linear regression analysis of molecular descriptors was carried out using the stepwise strategy in SPSS version 19 for Windows [6].

### Results

The several physical and chemical properties known



**Fig. 2.** Plots of predicted versus experimentally observed kinase inhibitors

as physicochemical descriptors were used as independent variables and were correlated with biological activities of pyrazolones derivatives for the generation of QSAR models by multiple linear regressions (MLR) analyze.

The correlation between the inhibitory activities of KDR kinase inhibitors with physicochemical descriptors expressed by the following relation (1):

$$\text{Log}(1/IC_{50}) = 14.754 + 0.075 \text{ HE} - 0.388 \log P + 1.190 \text{ pol} - 0.543 \text{ MR} + 0.022 \text{ MW}, \quad (1)$$

$n = 18$ ;  $r = 0.867$ ;  $s = 0.254$ ;  $F = 7.299$ ;  $Q = 3.413$

### Conclusion

In order to test the validity of the predictive power of selected QSAR models, the leave-one-out technique (LOO technique) was used. High agreement between experimental and predicted inhibitory values obtained in the validation procedure, indicating the validation and the good quality of the derived QSAR models which show that hydrophilic derivatives of pyrazoles give a good kinase inhibitors activity.

### References

- [1] Vasilij A. B, Wim D, *the chemistry of 1,2,3-thiadiazoles*, Edward C. T and Peter W, 2004.
- [2] Wermuth, C.G, *The Practice of Medicinal Chemistry*, Academic Press, 2008.
- [3] Belaidi S, Salah S, Melkemi N, Sinha L and Prasad O, *Comput. and Theor. Nanosci.*, 12 (2015) pp 2421-2427.
- [4] T. Ke, B. Xiao-Zhi, L. Xiao-Qiang, Z. Yue, S. Ji-Hong, T. Chao-Wu and H. Da-Hai, *J. Comput. Theor. Nanosci.*, 11(2014) pp 1785.
- [5] J. Lavrado, Z. Mackey, E. Hansell, J. H. McKerrow, A. Paulo, and R. Moreira, *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 22 (2012) pp 6256.
- [6] Spss 19 For Windows, SPSS software packages, SPSS Inc., 444 North Michigan Avenue, Suite 3000, Chicago, Illinois, 60611, USA

## P74 - JCTC12

## ANALYSE CONFORMATIONNELLE ET LA LIAISON D'HYDROGENE INTRAMOLECULAIRE DU CIS 1.2 INDANEDIOL

S. Rezzouk<sup>a\*</sup>, Y. Moussaoui<sup>a</sup>

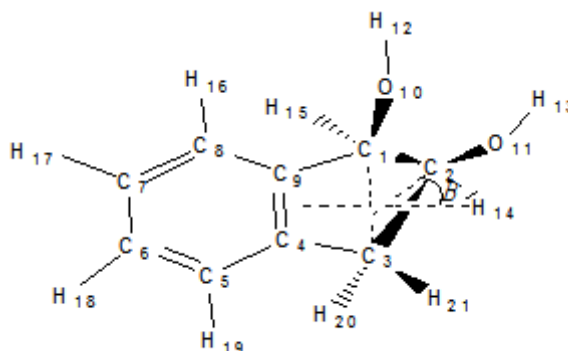
<sup>a</sup> Laboratoire chimie théorique computationnelle et photonique, faculté de chimie, U.S.T.H.B  
<sup>\*</sup> [souhilachimie@yahoo.fr](mailto:souhilachimie@yahoo.fr)

**Résumé**

Le cis (1S, 2R) indanediol, c'est un précurseur potentiel à la formation de cis-(1S, 2R)-1-aminoindan-2-ol. Ce dernier est l'intermédiaire principal pour Crixivan (Indinavir) ; qui est un inhibiteur compétitif de la HIV protéase du SIDA.

Le plissement du cycle (ring-puckering) et la rotation interne du groupement OH ont met en évidence différents conformères du cis 1.2 indanediol.

Une optimisation complète est réalisée à l'aide des méthodes B3LYP et MP2 avec la base 6-311+G(2d,p), suivirent d'un calcul de fréquence. La liaison d'hydrogène intramoléculaire OH  $\pi$  et OH OH joue un rôle important dans la stabilité de certaines conformations.



**Mots clés:** Cis 1,2 indanediol, DFT, ring-puckering

**Références**

- [1] Reider, P.: Advances in AIDS chemotherapy: the asymmetric synthesis of Crixivan@. *Chimia*, 51(1997), 306-308.
- [2] H.Guemmour, D. Kheffache, A. Benaboura, *J. Mol. Struc* 1002 (2011), 151-156.
- [3] K. Senthilkumar, P. Kolandival, *J. Mol. Struc (theochem)*, 577(2002), 69-79.
- [4] Eckard Koglin, Robert J. Meier, *Chem., Phys., Lett* , 312(1999), 284-290.



## P75 - JCTC12

## STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING AND DRUG-LIKE OF QUERCETIN DERIVATIVES WITH ANTI-MALARIA ACTIVITY

Abderrahmane Rouane<sup>a\*</sup>, Nouredine Tchouar<sup>a</sup>, Aicha Kerassa<sup>b</sup>, Salah Belaidi<sup>b</sup><sup>a</sup>Laboratoire de Modélisation et Optimisation des Systèmes Industriels, Université des Sciences et Technologies d'Oran (USTO) 31036, Algérie.<sup>b</sup>Équipe de chimie informatique et pharmaceutique, laboratoire de chimie moléculaire et environnement, université de Biskra, 07000, Algérie\* [rouanerahim@yahoo.fr](mailto:rouanerahim@yahoo.fr)**Abstract**

Current research on flavonoids is mainly based on theoretical [1] and biological [2] studies. Quercetin is a very important substance, potentially pharmacodynamic [3] and biomedical [4]. The aim is to study their physicochemical properties by various theoretical methods. These properties are validated after a geometric study, which allows us to understand the influence and the improvement of the biological activities.

The QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships) study is a correlation based on a statistical calculation of physico-chemical parameters with biological activity [5]. The validity of a QSAR model will therefore depend on the choice made on the parameters. It is thus important to identify and quantitatively evaluate the useful parameters as a function of the activity and the molecule selected.

The purpose of this work is to determine the electronic and geometric structure of Quercetin by molecular modeling (Ab-initio and DFT). The values of the charges, the dipole moments, the angles and the distances between atoms calculated using the different calculation methods were compared with the experimental results. The calculation showed that the structure of Quercetin is plane; the latter is in agreement with the experimental results [6].

**Keywords** : Quercetin, DFT, HF, MPO, NBO, QSAR.

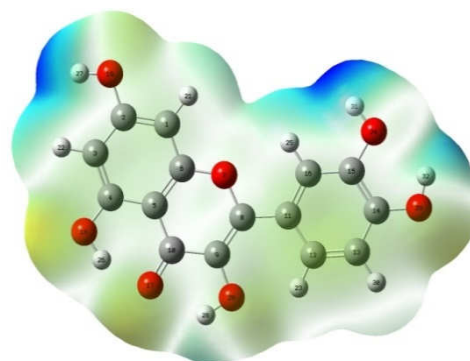
**Introduction**

Flavonoids are natural compounds that fructified through the various biological and medical roles [7] have been considered an interesting scientific topic recently.

The one compounds Quercetin flavonoid that has antioxidant biological activity [8]. and cancer [9]. it has a definite geometric structure, the effect of antioxidant Quercetin is attributed to the formation of stable, aryloxy radical, it is due to the double bond (C2 = C3) that follows the geometric planarity, cyclic chains A and B in flavonoids is stabilized by the conjugate form [10-11]

**Titre 1**

The molecular electrostatic potential surface (MESP) which is a plot of electrostatic potential mapped onto the iso-electron density surface simultaneously displays molecular shape, size and electrostatic potential values and has been plotted for of the title compound. MESP mapping is very useful in the investigation of the molecular structure with its physiochemical property relationships



## Conclusion

The study of the structure of Quercetin based on ab initio and DFT prove that our calculated results are similar and correspond with experimental data taken from the literature. The comparison between donor group (methyl) and the acceptor group (methoxy) substitution of Quercetin showed an influence on the nature of the substitution on decreasing the heat of formation of about 5.901 kcal/mol for the addition of methoxy and about 34.558 kcal/mol for the addition of methyl.

## Acknowledgments

We appreciate the technical assistance of the Group of Computational and Pharmaceutical Chemistry, Laboratory of Molecular Chemistry and environment, Department of Chemistry, University of Biskra in performing the computational analyses.

## References

- [1] X. Yang, Q. Wang, Y. Huang, P. Fu, J. Zhang, R. Zeng, *Inorg Chem Comm*, 25 (2012) 55–59.
- [2] Y. S. Tarahovsky, Y. A. Kim, E. A. Yagolnik, E. N. Muzafarov, *Bioch et Bioph, Acta* 1838, (2014) 1235–1246.3.
- [3] T. R. Helgren et al. / *Bioorg. Med. Chem. Lett*, 25 (2015) 327–332.
- [4] S. Belaidi, N. Melkemi and D. Bouzidi. *International Journal of Chemical Research*, (2012) 0975-3699.
- [5] S. Belaidi, T. Salah, N. Melkemi<sup>1</sup>, L. Sinha, and O. Prasad. *J. Comput. Theor. Nanosci*, 12 (2015) 10.
- [6] T. Salah, S. Belaidi, N. Melkemi, and N. Tchouar, *Rev. Theor. Sci*, 3 (2015) 3.
- [7] Scotti, M. T. Cardoso, L. Pauletti, C. P. C. Gamboa, I. da Silva, V. B., Valéria, M. Velasco, R. de Souza, C. M. M. Ferreira, E. I. de Ciências, R. B. F. *Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences*. 43 (2007) 2.
- [8] Pyrzynska, K. Biesaga, M. *Trends in Analytical Chemistry*. 28 (2009) 894
- [9] Dias, T. A. Duarte, C. L. Lima, C. F. Proença, M. F. Pereira-Wilson, C. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 65 (2013) 500-510.
- [10] Xiao, J. Capanoglu, E. Jassbi, A. Miron, A. *Biotechnology Advances*, 11 (2014) 002.  
Boeck, P. Falcao, C. A. B. Leal, C. P. A. Yunes, R. Filho, V. C. Torres-Santos, E. C. Rossi-Bergmann, B. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. 14 (2006) 1538–1545.
- [11] Beker, B. Y. Bakır, T. Sönmezoğlu, İ. İmer, F. Apak, R. *Chemistry and Physics of Lipids*. 164 (2011) 732–739.

## P76 - JCTC12

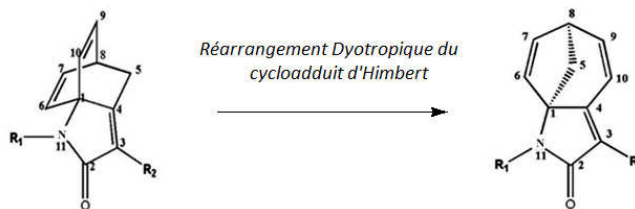
## ETUDE THEORIQUE DU REARRANGEMENT DYOTROPIQUE DU CYCLOADDUIT D'HIMBERT

Amar Saal,<sup>a, b\*</sup>, Lynda Merzoud,<sup>a, b</sup> Meriem Almi<sup>a</sup><sup>a</sup> Laboratory of Computational and Theoretical Chemistry and Photonics, USTHB University of Algiers, 16111, Algeria.<sup>b</sup> Chemistry Department, UMMTO University of Tizi-Ouzou, 15000, Algeria\* [merzoud-lynda@live.fr](mailto:merzoud-lynda@live.fr)**Résumé**

La cycloaddition intramoléculaire découverte par Himbert offre des intermédiaires polycycliques avec une contrainte de cycle suffisante afin d'effectuer un processus de réarrangement dyotropique et fournir ainsi d'autres composés polycycliques. Ainsi, nous nous sommes proposés de discuter les détails de ce réarrangement dyotropique induit thermiquement dans les cycloadduits d'Himbert. Pour cela, nous avons exploré l'effet du changement des hétéroatomes et des substituants sur ce réarrangement. Le modèle B3LYP/6-31G(d) de la DFT a été utilisé pour déterminer les chemins réactionnels et les diagrammes énergétiques des onze chemins réactionnels étudiés.

**Mots clés :** Réarrangement dyotropique, Himbert, DFT**Introduction**

Il y a plus de trente ans, Himbert a introduit un autre type de cycloaddition, dit la Cycloaddition Intramoléculaire de Diels-Alder IMDA.[1] Cette inhabituelle cycloaddition intramoléculaire Arène/Allène n'arrête pas de susciter l'intérêt des chercheurs expérimentateurs et théoriciens puisqu'elle permet la synthèse facile de composés polycycliques complexes.

**Effet de la Substitution**

L'effet des hétéroatomes et des différents substituants sur les équilibres, bicyclo[2.2.2]octadiène ↔ bicyclo[3.2.1]octadiène, du produit d'Himbert a été étudié. Cet équilibre est assuré par une réaction dyotropique de type I et non concertée. Le but de cette étude est de déterminer le type d'hétéroatome et la nature du substituant qui favorise l'un ou l'autre composé de l'équilibre et donc de maîtriser la sélectivité dans la réaction de synthèse d'Himbert. Les structures géométriques ont toutes été complètement optimisées au niveau de B3LYP/6-31G(d). L'analyse des résultats obtenus montre que le composé substitué avec l'azote comme hétéroatome est cinétiquement plus favorable par rapport aux composés ayant un soufre ou un oxygène. La formation du produit bicyclo[3.2.1]octadiène est favorisée par un groupement CH<sub>3</sub> lié à N. De plus, le composé substitué avec NO<sub>2</sub> est cinétiquement plus favorable avec des énergies d'activation faibles pour les deux étapes du chemin réactionnel par rapport aux composés substitués avec CHO et CN. Quant au composé avec le substituant OCH<sub>3</sub>, il réagit plus rapidement que les composés avec OH et CH<sub>3</sub>. De plus, le produit bicyclo[3.2.1]octadiène est plus stable dans le cas de OCH<sub>3</sub>.

**Conclusion**

De tous les substituants étudiés, le composé avec NO<sub>2</sub> abaisse considérablement les énergies d'activation de l'équilibre étudié de près de 10 kcal/mol et donc cinétiquement plus favorable.

**Références**

[1] Himbert, G. ; Henn, L. ; *Angew. Chem. Int. Ed.* 21 (1982) 620.

## P77 - JCTC12

COORDINATION CHEMISTRY OF TRINUCLEAR  $[M_3(\text{Tr})_2(L)_3]^{2+}$  (M = Fe, Ni, Pd, Pt, Tr = TROPYLIUM AND L = CO, CNH AND C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) SANDWICH COMPOUNDS: THEORETICAL INVESTIGATIONAmira Saiad,<sup>a\*</sup>, Bachir Zouchoune<sup>a, b</sup><sup>a</sup> Chimie appliquée et Technologie des Matériaux, Larbi Ben M'Hidi, Oum El Bouaghi, Algeria<sup>b</sup> Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale, Mentouri, Constantine, Algeria\* [saiad.amira@gmail.com](mailto:saiad.amira@gmail.com)**Abstract**

DFT calculations with full geometry optimization using BP86 and M06L have been performed on the  $M_3(\text{Tr})L_3$  (M = Fe, Ni, Pd, Pt, Tr = C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>), and L = CO, CNH and C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) sandwich complexes. The trimetallic  $M_3$  moiety which is encapsulated between two Tropylium cations as described experimentally [1-2] and theoretically for CO [3] ligand tends to establish M-L bonding with regards to the metal nature and the spin state. The NBO analysis using Wiberg Bond index (WBI) is used to evaluate the metal-metal bond orders. It is worth noting that the obtained HOMO-LUMO gaps are comparable for both BP86 and M06L functionals. The interactions between the L ligand and the  $[M_3(\text{Tr})]^{2+}$  moiety shows somewhat differences highlighted by the M-M bond distances, the metal electronic configurations and the the  $\pi$ - and  $\pi^*$ -orbital occupations of the ligands.

**Keywords** : Metal-Metal bonding, NBO analysis, Coordination chemistry, MO interactions.**References**

- [1] T. Murahashi, K. Usui, R. Inoue, S. Ogoshi, H. Kurosawa. Chem. Sci, 2 (2011) 117-122
- [2] T. Murahashi, Y. Hashimoto, K. Chiyoda, M. Fujimoto, T. Uemura, R. Inoue, S. Ogoshi, H. Kurosawa. J. Am. Chem. Soc, 130 (2008) 8586-8587
- [3] P. Jin, F. Li, Z. Chen. J. Phys. Chem A, 115 (2011) 2402-2408.

## P78 - JCTC12

## APPROCHE THEORIQUE DE LA REACTIVITE CHIMIQUE DES HETEROCYCLES SUBSTITUES

Razika Saihi<sup>a\*</sup>, Abdelkader Ladjarafi<sup>b</sup>, Hacène Meghezzi<sup>b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Chimie Organique, Faculté de Chimie, Université Ziane Achour, UZAD, Djelfa, Algérie,<sup>b</sup> Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB, Alger, Algérie,

\*chimie17@yahoo.fr

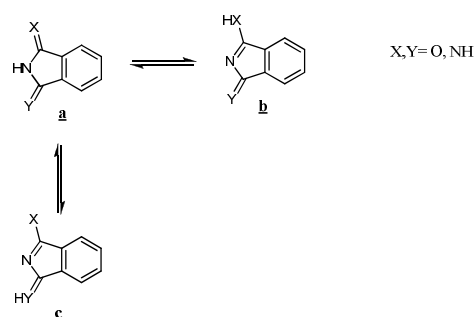
## Résumé

Les isoindolines-isoindoles sont des composés hétérocycliques largement utilisés comme intermédiaires de synthèse; ils jouent un rôle important dans la synthèse organique et constituent le noyau de base de divers composés d'intérêt biologique et pharmacologique (activité anti-inflammatoire, anticonvulsivant, anticancéreuse et antimicrobiennes). En particulier, l'isoindoline-1,3-dione a suscité dernièrement un intérêt scientifique important en raison de son action contre le cancer et les maladies inflammatoires, récemment découvert. On se propose d'étudier, dans ce travail, l'influence de l'hétéroatome sur les propriétés électroniques et structurales de quelques dérivés d'isoindoline par la prise en compte de l'effet du solvant. Les calculs théoriques ont été effectués par les méthodes AM1, HF/6-31G et la méthode DFT avec la fonctionnelle B3LYP et la base 6-31G par la chaîne de programme Gaussian 03.

**Mots clés :** isoindolines-isoindoles; hétéroatome; effet du solvant; DFT.

## Introduction

Les hétérocycles conjugués constituent un des domaines de la chimie organique où les travaux théoriques et expérimentaux s'influencent le plus mutuellement. Ces composés constituent le noyau de base d'un grand nombre de substances naturelles et de divers composés d'intérêt biologique et pharmacologique. Ils jouent aussi un rôle important dans la synthèse organique et peuvent servir de produits de départ dans la préparation de nouveaux dérivés fonctionnels [1,2]. Notre but, dans ce travail, est de déterminer l'influence de l'hétéroatome extracyclique noté X et Y (= O, NH) sur les propriétés électroniques et structurales de quelques dérivés d'isoindoline par la prise en compte de l'effet du solvant [3,4].



## Conclusion

L'étude effectuée sur les hétérocycles étudiés, au moyen des différentes méthodes semi-empiriques et ab initio, a permis de mettre en évidence le rôle de l'hétéroatome extracyclique sur les propriétés électroniques moléculaires de l'état fondamental. Les résultats obtenus des énergies totales et des constantes d'équilibre en solution montrent que les formes isoindolines sont prédominantes en phase gazeuse et dans les deux solvants, ce qui est en accord avec l'expérience. Le moment dipolaire obtenu par les méthodes AM1, HF et DFT à l'état gazeux et en solution, augmente quand on passe de la forme isoindoline à la forme isoindole. Les calculs théoriques effectués en solution ont montré aussi que les propriétés électroniques (moments dipolaires, charges atomiques, énergies d'ionisation et affinités électroniques) des hétérocycles étudiés sont influencées par la nature du solvant utilisé.

## Références

- [1] R. Baharfar and S. Mohajer, *Helvetica Chimica Acta*, 95 (2012) 185-190.
- [2] M. Yosuva Suvakin et al, *Adv. Appl. Sci. Res.*, 3 (2012) 45-50.
- [3] Singh et al. *Pharmacologyonline*, 2 (2011) 976-987.
- [4] L. Min, S. Wan, Y. Yang, Y. Wen-yuan, L. Zhong-jun & C. Jing-rong, *Acta Pharmacol Sin.*, 30 (2009) 134-140.

## P79 - JCTC12

## ETUDE PAR DES METHODES QSAR DES DERIVES DE 1,2,5-THIADIAZOLE A L'AIDE DES DESCRIPTEURS MOLECULAIRES

Zoulikha Sebaa<sup>a\*</sup>, Noureddine Tchouar<sup>a</sup>, Sihem Medjahed<sup>a</sup>, Fatima Soualmia<sup>a</sup>, Salah Belaidi<sup>b</sup>, 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

\* [sebaazoulikha@yahoo.com](mailto:sebaazoulikha@yahoo.com)

### Résumé

Une étude QSAR a été effectuée sur dix-neuf molécules des dérivés de 1,2,5-Thiadazole. Les composés utilisés sont caractérisés par leurs activités biologiques. La régression linéaire multiple (MLR) a été utilisée pour quantifier les relations entre les descripteurs moléculaires et la propriété de détoxification des dérivés du 1,2,5-Thiadazole.

**Mots clés:** 1,2,5-Thiadiazole, QSAR, MLR, activité biologique, Agoniste muscarinique

### Introduction

Les relations quantitatives structure-activité (QSAR) sont très utiles pour comprendre comment la structure chimique se corrèle à l'activité biologique et à la toxicité des produits chimiques naturels et synthétiques [1].

### Etude quantitative des relations structure-activité des dérivés de 1,2,5-Thiadiazole

A l'aide de logiciel SPSS, nous avons établi un modèle QSAR pour une série bioactives de dérivés de 1,2,5-Thiadiazole dont l'objectif est de mettre en place une relation mathématique, reliant des propriétés moléculaires appelées descripteurs, à un effet expérimental (activité biologique).

A partir des résultats d'étude de modèle QSAR nous avons définis la relation suivante:

$$PIC50 = -16.250 + 0.060 * V + 0.016 * HE - 0.073 * SAG - 0.513 * MR + 4.683 * FLUMO - 41.017 * qN2 - 3.597 * qC3 + 3.084qC4 + 0.075 * qN5$$

Alors E<sub>LUMO</sub>, V, HE, SAG, MR, q<sub>N2</sub>, q<sub>C3</sub>, q<sub>C4</sub> et q<sub>N5</sub> sont les fiables descripteurs pour la prévision de l'activité.

### Conclusion

Le pouvoir prédictif de modèle obtenu a été confirmé par la méthode de validation croisée. Une forte corrélation a été observée entre les valeurs expérimentales et prédites des activités biologiques, ce qui indique la validité et la qualité des modèles QSAR obtenus.

### Références

[1] T. Salah, S. Belaidi, N. Melkmi and N. Tchouar, Rev. Theor. Sci, 3 (2015) pp 355-364.

## P80 - JCTC12

## ÉTUDE DES PROPRIÉTÉS ÉLECTRONIQUES ET QSAR DANS DES DÉRIVÉS DE PYRAZINE

Fatima Soualmia<sup>a\*</sup>, Noureddine Tchouar<sup>a</sup>, Zoulikha Sebaa<sup>a</sup>, Sihem Medjahed<sup>a</sup>, Salah Belaidi<sup>b</sup>, Kamel Bentayeb<sup>a</sup>.

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

<sup>b</sup>Équipe de Chimie Informatique et Pharmaceutique, Laboratoire de Chimie Moléculaire et Environnement, Université de Biskra, 07000, Algérie

\*[soualmia-gc@outlok.fr](mailto:soualmia-gc@outlok.fr)

### Résumé

Dans cette étude, une recherche fondamentale et originale sur l'hétérocycle pyrazine est réalisée dans le but est de prédire la réactivité et de l'activité biologique du composé étudié et ses dérivés. Une étude qualitative de la relation structure-propriété/activité (QSAR) a été effectuée également pour une série bioactive de dérivés de pyrazine.

**Mots clés:** Pyrazine, MP2, HF, DFT, activité biologique.

### Introduction

La pyrazine de formule brute  $C_4H_4N_2$ , est un composé hétérocyclique simple et fondamental [1]. L'étude QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationships*) est une corrélation basée sur un calcul statistique, de paramètres physico-chimiques avec l'activité biologique [2].

### Etude des propriétés structurales, électroniques de pyrazine

D'après les résultats obtenus, on montre que la géométrie de la pyrazine est plane et symétrique ceci est en accord avec les travaux expérimentaux.

La surface de MESP de pyrazine (Fig 1) montre trois régions: la couleur rouge (potentiel électrostatique négative) qui expliquent la capacité d'une attaque électrophile, la couleur bleu (potentiel électrostatique positif) qui expliquent que ces régions sont sensibles à une attaque nucléophile et la couleur verte située au milieu entre les régions rouges et bleues expliquer surface de potentiel électrostatique neutre.

Le composé 2,3-dibromopyrazine est de plus faible gap énergétique donc plus réactif. Tous les vingt un dérivés de pyrazine possèdent un Log P dans la plage des normes (intervalle 0-3), ces composés ont pour conséquence une bonne solubilité et une perméabilité efficace.

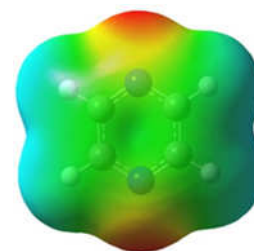


Fig. 1 : MESP surface de pyrazine

### Conclusion

L'étude de la structure chimique avec des différentes méthodes présente des résultats similaires.

### Références

- [1] Baldwin Mathew V, Arikatt SD, Sindhu TJ, Chanran M, Bhat AR, Krishnakumar K, World Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, 3(2014) 1124-1132.  
 [2] Belaidi S, Belaidi, H, Bouzidi, D, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, 12(2015)1737-1745.



## P81 - JCTC12

STRUCTURAL, ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF IRON-DISULPHIDE  $\text{Fe}_n\text{S}_2^{0/-/+}$   $n=1-6$  CLUSTERSS. Tazibt<sup>1,\*</sup>, A. Chikhaoui<sup>1</sup>, S. Bouarab<sup>1</sup>, A. Vega<sup>2</sup><sup>1</sup> LPCQ, Université Mouloud MAMMERRI, Tizi Ouzou, Algérie<sup>2</sup> Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica, Universidad de Valladolid, Paseo Belén, E-47011 Valladolid, Spain\* [slimanetazibt@ummto.dz](mailto:slimanetazibt@ummto.dz)**Abstract**

The structural, electronic and magnetic properties of neutral and charged  $\text{Fe}_n\text{S}_2^{0/-/+}$  clusters have been calculated in the framework of the density functional theory in the generalized gradient approximation for the exchange and correlation. The calculated adiabatic electron affinity and the vertical detachment energy are found to be in good agreement with the available experimental data. The impact of disulfide doping of the small iron clusters on the atomic structure, stability, magnetic moment and reactivity is determined through the analysis of the binding energy per atom, electronic charge transfer, spin-polarized electronic density of states and global reactivity indicators like the electronegativity and chemical hardness. Our results provide an exhaustive characterization of these small iron-sulfide particles in vacuum, a first step for completely understand their role as components of proteins.

**Keywords** : Clusters, DFT, GGA, VDE, AEA, Reactivity**Introduction**

We have performed first-principles DFT calculations, in the generalized gradient approximation for exchange and correlation, to determine the putative ground state structures and related electronic properties of neutral and charged  $\text{Fe}_n\text{S}_2^{0/-/+}$ ,  $n=1-6$  clusters, and to analyze the impact of disulfide doping on the fundamental properties of the smallest iron clusters.

**Conclusion**

The iron disulfide clusters exhibit an Fe skeleton similar to the corresponding pure Fe host, an indication of the strong metallic bonding. Disulfide doping of small Fe clusters enhances the binding energy per atom, without substantially modifying the magnetic moment. This increase in the global stability is consistent with the partial ionic contribution to the bonding, a fact that is corroborated by the noticeable electronic charge transfer from the Fe atoms to the S ones. The preservation of most of the magnetic moment upon S doping is due to the robust parallel magnetic coupling between the Fe atoms. Except in this case and few other exceptions, the change in the total spin magnetic moment upon both ionization and an electron excess can be explained as a one electron process, leading to a  $1\mu_B$  increase or decrease of the spin moment with respect to the neutral state. The exceptions are due to strong electronic relaxation, most of which associated to a structural change. Disulfide iron clusters are more electronegative than their pure iron hosts, and thus less reactive towards electrophilic compounds. They have also a larger chemical hardness, so that the sensitivity of their chemical potential to changes in the number of electrons is enhanced, becoming globally less reactive than their pure iron hosts.  $\text{Fe}_2\text{S}_2$  out as the less reactive and more stable of the smallest iron disulfide clusters. It is also the only one in which ionization quenches the magnetic moment, and it is similar to the structural entity most frequently contained in proteins [1]. We hope that our characterization of the smallest disulfide iron clusters in vacuum helps in achieving a complete understanding of the role of these compounds in biology and catalysis.

**References**

[1] Mayerle et al. ,J. Am. Chem. Soc. 97 (1975) 1032.

## P82 - JCTC12

ETUDE QUANTIQUE DE L'ACTIVITE ANTIOXYDANTE DE L'HYDROXYTYROSOL ET DE SON INTERACTION AVEC LA  $\beta$ -CYCLODEXTRINEKhawla Yahiaoui<sup>a,b,\*</sup>, Fatiha Fetici<sup>b</sup>, Lynda Seridi<sup>a,b</sup><sup>a</sup> Laboratoire de Physique de Guelma (LPG), Université 08 Mai 1945, Guelma, Algérie<sup>b</sup> Département de Génie des Procédés, Université 08 Mai 1945, Guelma, Algérie\* [khawlaya@hotmail.fr](mailto:khawlaya@hotmail.fr)

## Résumé

Nos investigations théoriques ont porté sur l'étude, à un niveau DFT selon la fonctionnelle hybride B3LYP/6-311G(d,p), de l'activité antioxydante de l'Hydroxytyrosol (HT). Grâce au calcul de descripteurs thermodynamiques, nous avons déterminé le pharmacophore responsable de cette propriété ainsi que le mécanisme intervenant dans le piégeage des radicaux libres. Nous avons ensuite procédé à un docking moléculaire de HT dans la  $\beta$ -Cyclodextrine ( $\beta$ -CD) pour une stœchiométrie 1:1, selon deux orientations, ainsi qu'à l'étude structurale, thermodynamique et électronique du complexe HT@  $\beta$ -CD le plus stable formé. Pour cela nous avons utilisé les méthodes PM6 et hybride ONIOM2 (B3LYP/6-31G(d):PM6). Enfin l'analyse NBO, réalisée à un niveau B3LYP/6-31G(d), nous a permis de quantifier les interactions intermoléculaires entre molécules hôte et invité et a révélé que les principales forces motrices stabilisantes de ce complexe d'inclusion sont de type VdW associées à plusieurs liaisons hydrogène conventionnelles.

**Mots clés:** Hydroxytyrosol,  $\beta$ -CD, activité antioxydante, DFT, PM6, ONIOM 2, NBO.

## Introduction

L'Hydroxytyrosol est un composé phénolique qu'on trouve dans les olives, davantage dans la pulpe que dans l'huile. Il exerce son activité antioxydante par piégeage des radicaux libres. Il a été démontré expérimentalement [1] que sa complexation dans la  $\beta$ -CD améliore sa stabilité (Photo protection contre UV et prolongation de sa durée de vie) et augmente ses performances antioxydantes.

## Méthodologie suivie

Après une recherche conformationnelle par variation de trois angles dièdres, le conformère HT de minimum d'énergie est réoptimisé selon B3LYP/6-311G(d,p) ainsi que les radicaux, anions et radical cation. Les descripteurs thermodynamiques (BDE, AIP, PA, PDE, ETE) ont été calculés et analysés. Pour la formation du complexe, nous avons suivi le modèle d'inclusion décrit dans la référence [2] et étudié les minimums issus des deux orientations illustrées dans la figure 1.

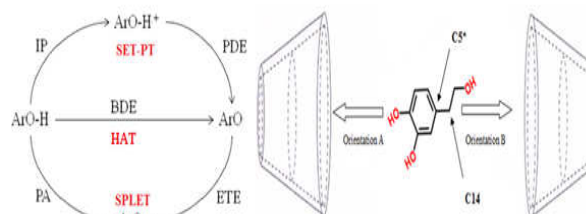


Fig 1. Mécanismes d'activité antioxydante et processus d'inclusion de HT dans  $\beta$ -CD

## Conclusion

L'analyse des différents descripteurs thermodynamiques a montré que la capacité de piégeage des radicaux libres de l'HT est liée à son groupements hydroxyl O12-H13 représentant le site le plus actif et que le mécanisme mis en jeu est le Transfert Directe d'atome Hydrogène (HAT). Toutes les méthodes concordent sur la structure géométrique du complexe le plus stable, nous avons une inclusion totale de HT dans la  $\beta$ -CD, avec le groupement catechol situé du cote des hydroxyls primaires, alors que celui hydroxyethyl est du côté des hydroxyls secondaires. La complexation est spontanée, exothermique et enthalpiquement conduite. Les interactions de VdW et les ponts hydrogène stabilisent principalement le complexe d'inclusion HT@  $\beta$ -CD.

## Références

- [1] M.Á. López-García, O. López, I. Maya, J.G.F. Bolaños, Tetrahedron, 66 (2010) pp 8006-8011.  
 [2] L. Seridi, A. Boufelfel, S. Soltani, Journal of Molecular Liquids, 221 (2016) pp 885-895.

## P83 - JCTC12

## COMPORTEMENT REDOX DE COMPLEXES TRIS(CYCLOPENTADIENYLE) D'URANIUM. ETUDE DFT/ZORA RELATIVISTE.

Khadidja Yassia-Talha,<sup>\*a</sup> Lotfi Belkhiri<sup>a</sup> et Abdou Boucekkine<sup>c</sup><sup>a</sup> URCHEMS, Département de Chimie, Université des Frères Mentouri - Constantine 1<sup>c</sup> Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS - Université de Rennes 1, 35042 Rennes Cedex, France[s.aboudersa27@yahoo.fr](mailto:s.aboudersa27@yahoo.fr)**Résumé**

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude quantochimique d'une famille de complexes tris(cyclopentadienyle) d'uranium  $Cp^*_3UL(X)$  associés à des ligands fonctionnalisés X de type  $\sigma$  et/ou  $\pi$  donneur. Ces composés dont la structure RX de certains d'entre eux est connue, n'ont fait l'objet d'aucune étude théorique jusqu'à ce jour. Nous étudierons tout particulièrement les géométries moléculaires, la relation structure électronique - comportement redox ainsi que la nature des interactions métal-ligand mises en jeu. Nous analyserons les différentes corrélations possibles entre les valeurs des grandeurs quantiques calculées (AE, charge métallique nette, HOMO/LUMO et indices de liaisons) avec les variations du potentiel redox de demi-vague ( $-E_{1/2}$ ) mesuré expérimentalement. Dans le cadre de l'aspect prédictif de la méthode DFT, nous analyserons les propriétés redox de certaines espèces inconnues ou non encore isolées.

**Mots clés :** Complexes d'uranium, Potentiel Redox, Affinité Electronique, DFT/ZORA, effet solvant, COSMO, spin-orbite.

La chimie des complexes organoactinides en particulier ceux d'uranium, a connu un regain d'intérêt et un essor remarquables, tant sur le plan expérimental que théorique, avec la synthèse et la caractérisation RX d'un large éventail de complexes combinant des ligands fonctionnalisés peu connus dans la chimie de coordination classique.<sup>1</sup>

Par ailleurs, en raison des divers états d'oxydation possibles d'uranium (III-VI), il est important de comprendre, soit expérimentalement soit théoriquement, leurs processus d'oxydoréduction et d'étudier l'effet d'une perte ou capture d'un électron sur la structure électronique et la liaison de leurs complexes en solution. Cependant, du fait de la difficulté des études électrochimiques expérimentales (redox) des systèmes d'actinides, inhérentes aux contraintes de toxicité radioactive et de rareté fréquente et la complexité de leur spectroscopie, la mesure de l'affinité électronique (AE) de tels systèmes est inaccessible, et seulement des mesures électrochimiques directes en solution du potentiel redox de demi-vague ( $-E_{1/2}$  Volts) de quelques complexes ont pu être effectuées.<sup>2,3</sup>

Une alternative est cependant apportée par la quantochimie computationnelle qui permet de déterminer théoriquement l'affinité électronique, en bon accord avec les données expérimentales au moyen de calculs DFT bien calibrés<sup>4</sup>.

Il a été également démontré, grâce à des calculs DFT, que la stabilité des différents couples redox U(IV/V), U(V/IV) et U(IV/III) est intimement liée à l'implication des orbitales 5f dans le caractère covalent des liaisons uranium – ligand<sup>5</sup>.

**Références**

- [1] (a) Ephritikhine M., *Organometallics*. 2013, 32, 2464. (b) Boucekkine A. and Belkhiri L. *f-Element Complexes*. In: Jan Reedijk and Kenneth Poeppelmeier, editors. *Compre. Inorg. Chem. II*, Vol 9. Oxford: Elsevier; 2013. p. 277-319.
- [2] (a) Hauchard, D.; Cassir, M.; Chivot, J.; Baudry, D.; Ephritikhine, M. *J. Electroanal. Chem.* 1993, 347, 399 (b) Schnabel, R.C.; Scott, B.L.; Smith, W.H.; Burns, C.J. *J. Organomet. Chem.* 1999, 591, 14.
- [3] (a) Morris, D.E; Da Re, R.E.; Jantunen, K.C.; Castro-Rodriguez, I.; Kiplinger, J.L. *Organometallics*, 2004, 23, 5142 (b) Da Re, R. E.; Jantunen, K. C.; Golden, J. T.; Kiplinger, J. L.; Morris, D. E. *J. Am. Chem. Soc.* 2005, 127, 682.
- [4] (a) Rienstra-Kiracofe, J.C.; Tschumper, G.S.; Schaefer, H.F.; Nandi, S.; Ellison, G.B. *Chem. Rev.* 2002, 102, 231

[5] (a) Elkechai, A.; Belkhiri, L.; Amarouche, M.; Clappe, C.; Boucekkine, A.; Hauchard, D.; Ephritikhine, M., *Dalton Trans.* 2009, 2843-2849 (b) El Kechai, A.; Boucekkine, A.; Belkhiri, L.; Hauchard, D.; Clappe, C.; Ephritikhine, M., *C.R. Chimie*, 2010, 13, 860-869. (c) A. Elkechai, F. Kias, F. Talbi, A. Boucekkine, *J. Mol. Model.* 2014, 20, 2294.

## P84 - JCTC12

### ETUDE THEORIQUE DE COMPLEXES METALLIQUES DE REPAGLINIDE

Sihem Zaater<sup>a,b\*</sup>, Sihem Sadaoui-Kacel<sup>c,d</sup> Nadjia Bensouilah<sup>b</sup> and Safia Djebbar<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Physico-Chimie Théorique et de Chimie Informatique-Faculté de Chimie-USTHB-Alger-Algérie.

<sup>b</sup> Ecole Préparatoire Sciences et Techniques Alger- Algérie.

<sup>c</sup> Hydrometallurgy and Molecular Inorganic Chemistry Laboratory, Faculty of Chemistry, Houari Boumediene Sciences and Technology University, BP 32 El Alia, 16111 Algiers, Algeria.

<sup>d</sup> Department of Chemistry, Faculty of Sciences, M'hamed Bougara University, Boumerdes, Algeria.

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

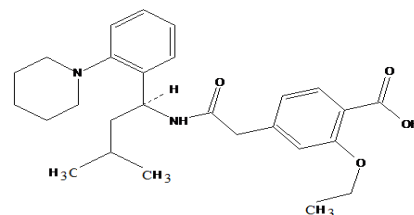
#### Résumé

Dans le cadre de ce travail, de nouveaux complexes de répaglinide avec le manganèse (II), le fer (III), le cuivre (II) et le zinc (II) ont été synthétisés et caractérisés par des méthodes analytiques et spectrales. Une étude théorique structurale, énergétique, spectrale et électronique a été effectuée au moyen de la DFT pour le ligand et les complexes étudiés.

**Mots clés :** DFT, répaglinide, complexes de répaglinide.

#### Introduction

Depuis quelques années, une attention particulière a été accordée aux complexes organométalliques contenant l'azote et l'oxygène. Les propriétés chimiques des composés aromatiques contenant des groupes carboxyles ont été largement étudiées en raison de leur forte tendance à la chélation des métaux de transition. Le manganèse, le fer, le cuivre et le zinc sont des oligo-éléments essentiels au fonctionnement de nombreuses enzymes et protéines [1]. La Répaglinide (Figure 1) est un agent antidiabétique de la classe des glinides, utilisé pour le traitement des patients atteints de diabète de type 2 [2].



**Figure 1.** Structure de la répaglinide

#### Résultats

L'étude théorique a montré que les complexes étudiés adoptent une géométrie octaédrique déformée autour du métal. Le calcul des énergies de liaisons montre que l'ordre de stabilité des complexes est le suivant : Fe(III)>Cu(II)>Zn(II)>Mn(II). Le calcul des énergies des orbitales moléculaires frontières HOMO et LUMO montre que le comportement redox dépend de la nature de l'atome central.

#### Conclusion

Les résultats théoriques nous ont permis de proposer la géométrie octaédrique pour les complexes de répaglinide étudiés et de trouver une relation entre le comportement redox des complexes et la nature du métal.

#### Références

- [1] Kozłowski H, Janicka-Kłos A, Brasun J, Gaggelli E, Valensin D, Valensin G, *Coord Chem Rev.* 253 (2009) 2665.  
 [2] Nicolescu C, Arama C, Monsiu C. M, *Farmacia.* 58 (2010) 78.

## P85 - JCTC12

## ETUDE DES COMPLEXES MONO-NUCLEAIRES DE METAUX DE TRANSITION DU LIGAND INDENYLE CYCLOPENTADIENYLE; STRUCTURE ELECTRONIQUE ET MODES DE COORDINATION

S.M. Zendaoui<sup>1,2</sup>, B. Zouchoune<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Chimie appliquée et Technologie des Matériaux, Université Larbi Ben M'Hidi- Oum El Bouaghi, (04000) Oum El Bouaghi, Algeria.

<sup>2</sup>Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale, Université Constantine (Mentouri), (25000) Constantine, Algeria.

[zendaoui\\_saber@yahoo.fr](mailto:zendaoui_saber@yahoo.fr)

**Résumé**

Les calculs d'optimisation de la géométrie ont été effectués au moyen de la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT, à l'aide du programme ADF2014.01, sur une série de complexes réels et hypothétiques de type  $CpM(\eta^5-C_5H_5)Cp^*Cp^*$  pour des métaux de transition (M= Sc, Ti, V (Nb), Cr (Mo), Mn (Re), Fe (Ru), Co (Rh), Ni (Pd) et  $C_7H_9^-$  = l'anion Indenyle). La rationalisation de la liaison dans ces complexes est bien établie comme ayant un caractère covalent. Selon le nombre d'électrons et de la nature du métal, le ligand Indenyle peut se lier au fragment métallique avec des modes de coordination très variés :  $\eta^3$ ,  $\eta^5$ ,  $\eta^{5+2}$  ou  $\eta^9$ . La configuration électronique du métal dépend du mode de coordination avec l'anion indenyle.

**Mot clés :** Optimisation de la géométrie, haptacité, mode de coordination, électrons de valence métalliques

## P86 - JCTC12

## FIRST PRINCIPLES STUDY OF THE STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF HfX (X= C, N, B)

Soumia Zouambia<sup>\*</sup>, Dalila Hammoutène

Laboratory of Thermodynamics and Molecular Modeling, University of Science and Technology – Houari Boumediene (USTHB), Faculty of Chemistry, Bab Ezzouar, Algiers, ALGERIA.

[zouambia\\_s@yahoo.fr](mailto:zouambia_s@yahoo.fr)

### Abstract

The structural and electronic properties of HfC, HfN and HfB have been studied using first-principles calculations based on density functional theory (DFT) with the plane wave basis set, as implemented in the CASTEP code. Our findings on structural and electronic parameters are in good accordance with the available theoretical and experimental data.

**Keywords** : Hafnium carbide, Hafnium nitride, Hafnium boride, Electronic structure.

### Introduction

The modern scientific-and-technical revolution is responsible for the increasing interest and impetus in the search for materials possessing specific and desired properties.

Carbides, nitrides and borides have attracted interest due to their physical and chemical properties such as extreme hardness, high melting point, chemical inertness and catalytic behavior. They belong to a promising group of engineering materials with a wide range of industrial applications. A great effort is currently focused on the synthesis and the characterization of these materials.

Technological applications of these materials and success of *ab initio* methods motivated us to analyze the structural and electronic properties of hafnium in its nitride, carbide and boride form.

### Computational methods and results

Our first-principles calculations are performed at normal pressure, on the structural and electronic properties of HfC, HfN and HfB, using the CASTEP code in MS modeling based on the plane wave basis set. The Vanderbilt ultrasoft pseudopotential was used with the cutoff energy of 550 eV. Brillouin zone sampling was carried out using Monkhorst–Pack k-point meshes. The dense 12x12x12 mesh parameters grids was utilized.

The lattice constant is found to be in good agreement with experimental and first principles calculations available in the literature. Regarding the density of states, the representative curve shows clearly that the bonding is an unusual mixture of metallic, covalent and ionic characters.

### Conclusion

We report the electronic band structure and density of states of HfX (X=C, N, B) under normal pressure. Our results suggest that these materials are stable in the cubic NaCl structure.

It is also observed that the bonding in cubic NaCl-HfN is a mixture of metallic, covalent, and ionic characters.

**A**

Abdaoui M., 171, 177  
 Abdelatif M. L., 139  
 Abdeldjebar H., 139, 157  
 Abdelli-Messaci S., 44, 82, 104  
 Abdoune F. Z., 128  
 Abed Ghars M. T., 180  
 Abid C., 30  
Abtouche S., 141  
 Achour S., 86, 94  
Achouri B., 105  
Acila M., 120  
 Addala S., 28  
 Addoun A., 158, 159  
Adjaoud O., 19  
Adjieroud Y., 160  
Aggoune S., 30  
 Aïnouche L., 41  
 Ait Djafar A., 82  
 Ait El Djoudi A., 100  
Ait Menguellat I. Z., 95  
 Albe K., 19  
 Alim M.M., 103  
 Alioua K., 101, 230  
 Aliouche D., 91  
 Allam D., 65  
Allam L., 64  
Allouche F., 161  
 Almi M., 151, 162, 165, 231, 238  
Almi Z., 163  
Amar A., 164  
 Amara El., 30  
Amghar N., 165  
 Amitouche F., 119  
Amrouch S., 49  
Anak B., 166  
 Aouaïchia M., 96  
Aoumeur N., 167, 233  
Aourag H., 11  
Arab K., 50  
Ardjani T. A., 168  
Ariche B., 142, 191  
 Assfeld X., 141  
 Attoui Yahia O., 190  
Ayache H., 169  
 Azayez M., 232  
 Azem S., 77  
 Azizi A., 77, 85  
 Azizi S., 216, 227  
Azzououm A. B., 66

**B**

Baadj S., 96  
 Bahi Azzououm A., 114  
Baïda F. I., 13  
 Baïda F. I., 57  
 Baïda F. I., 63  
Bait L., 67  
Bakhouch K., 143  
 Bakri R., 68, 69, 76  
Bakri S., 68, 69

Bekda A., 98  
 Bekhti N., 188  
Belabbas I., 27, 122, 126  
Belache B., 70  
 Belaidi S., 163, 226, 233, 236, 241, 242  
 Belarbi E. H., 203  
 Belasri A., 31, 95, 96, 102  
 Beldjilali S. A., 102  
 Belgroune N., 81  
 Belhadi A., 80  
 Belhakem M., 198  
Belhocine F., 121  
Belkafouf N., 170  
 Belkaid M. S., 45, 52, 74, 78  
Belkessam C., 71  
 Belkhir A., 57, 63  
 Belkhir M. A., 115  
 Belkhiri L., 153, 181, 183, 228, 245  
 Belkofsi R., 118, 122  
Bellili A., 144  
 Belmiloud Y., 105, 139, 157  
Ben Mesbah Z., 173  
Ben Mouhoub C., 123  
 Ben Yaghlane S., 216  
 Benabadji M. K., 110  
 Benamar M.E.A., 82  
 Benamara A., 114  
Benatmane S., 124  
Benbella D., 108  
 Benbrahim N., 41, 64, 69, 71, 75, 90, 123, 132  
 Bencharif M., 166  
Bencherif N., 73  
 Benchiheub M., 88  
 Benchouk W., 195  
 Bendahma F., 107  
 Bendib A., 35  
 Bendiba G., 44  
Bendif B., 171, 177  
 Benfedda B., 64, 90  
 Bengueddach A., 42  
 Benhaffaf A., 81  
 Benhaliliba M., 73  
 Benhmed N., 96  
 Benkhelfa N., 52  
 Benlecheb T., 161  
Benmensour M. A., 172  
 Benmesbah Z., 224  
 Bennamer A., 118  
Bennedjai S. C., 174  
 Benosman A., 188, 189  
 Benrekaa N., 39  
 Bensabra H., 120  
Bensadok R., 175  
Bensiradj N. E. H., 176  
Bensouilah A., 36  
 Bensouilah N., 171, 177, 246  
 Bentata S., 107, 108  
 Bentayeb K., 167, 178, 226, 233, 241, 242  
 Bentoumi H., 160

Benyahia A., 66  
 Berouguiaa D., 128  
Bezzina B., 180  
 Blanco J. A., 36, 39  
 Boixel J., 172  
 Bouakouk Z., 229  
Bouamama L., 106  
 Bouarab S., 112, 119, 243  
 Bouaraba F., 45, 52, 74  
 Bouaziz-Terrachet S., 210  
Boucekkine A., 18, 153, 164, 169, 172, 183, 212, 214, 215, 228, 245  
Boucenina S., 181  
Bouchekioua S., 182  
 Bouchemella K., 166  
Boucherrab M., 53  
 Bouchoucha A., 186  
Boudersa A., 183  
 Boudinar S., 69, 75, 90  
 Boudine B., 28  
 Boudjada A., 185, 209  
Boudrifa O., 37  
 Boufatit M., 121  
 Bouferguene A., 217  
 Boughdiri S., 16  
 Boughrara D., 132  
 Bouhadda Y., 232  
Bouhadiba A., 184  
 Bouhafis B., 124  
Bouhanibenziane H., 125  
Bouhdjer L., 28  
 Bouhemadou A., 37, 118  
 Bouhmidi M., 66  
 Boujoures H., 232  
 Boukabene M., 191  
 Boukellal A., 54  
 Bouledroua M., 101  
Boumrar K., 54  
 Bououdina M., 70, 88, 220  
 Bourahla B., 53, 56  
Bouraoui H., 185  
Bouremana A., 39  
Bourouina A., 186  
 Boussafel H., 67  
Boussassi R., 145  
Boussebbat W., 187  
 Boussoum O., 45, 74, 78  
 Boutarfaia S., 132  
Boutasta A., 188, 189  
 Boutemeur B., 177  
 Bouzar H., 113  
Bouzitouna A., 190  
 Bozetine H., 69, 76  
 Bradai D., 126  
Brahim H., 191, 192, 193, 203  
 Brahim S., 191, 192, 193  
Brahimi M., 20, 105, 139, 141, 157, 221  
 Bresson S., 203  
 Brihi O., 209  
Brihmat M., 115  
 Buffani E., 86

**C**

Caillier B., 31, 95, 102  
 Carisson Y., 180  
 Chabane H., 160  
 Chadli R., 60  
Chafaa F., 194, 211  
 Chafi Z., 93  
Chahi G., 126  
 Chainet E., 90  
Chaker H., 42  
 Chalal M., 49  
 Chaouchi A., 69, 76  
Charif I. E., 195  
 Charlot F., 90  
 Cherbouh K., 127  
Chekkal F., 196  
 Cheknoun S., 65  
Cherid S., 107  
Cheriet M., 197  
 Chérif L., 42  
Chermette H., 16, 147  
 Chetibi L., 94  
 Chettibi N., 160  
Chikh A., 56  
 Chikhaoui A., 243  
 Chouaih A., 170  
 Chouchane T., 180  
 Christ L., 16  
 Costuas K., 218

**D**

Daideche K., 77  
 Damien B., 45  
 Daraf B., 103  
 Deghiche D., 50  
Dehbi L., 57  
Dehlouz S., 77  
 Delbecq F., 150, 223  
 Demachy I., 17, 227  
 Dergal M., 110  
Derrar S. N., 198  
 Dhaouadi Z., 12, 148  
 Djani H., 175  
 Djebbar S., 186, 246  
 Djebli M., 98  
Djellout D., 99  
 Djellout H., 99  
 Djelti R., 107  
 Djennane S., 172  
 Djerourou A., 146, 194, 211  
Djida R., 100  
 Djilali N., 71  
 Djilani I., 184  
 Djitli W., 139  
 Domingo L. R., 146  
Douas N., 40, 93  
 Draï M., 203

**E**

El-Hadj Said A., 199  
 Elkechai A., 169, 214, 215



**F**

Faraoun H. I., 110  
 Fergoug T., 232  
 Ferhati F., 78  
 Ferrari C., 86  
 Fetici F., 244  
Fezazi A., 200  
 Fifen J. J., 12, 148  
 Fisli H., 177  
 Fontàs C., 127  
 Fourmentin S., 42

**G**

Gasser J-G, 133  
Ghaleb F., 31  
 Gorria P., 36, 39  
**Grioua H.**, 202  
 Grus R., 45  
**Guechtouli N.**, 202  
 Guellati O., 83  
 Guerchais V., 172  
 Guerioune M., 83  
 Guillot P., 31, 34, 95, 102  
 Guittoum A., 36, 39

**H**

Haddad A., 159  
 Haddad B., 191, 203  
Haddad M., 80  
Haddag O., 204  
Hadj Moussa M., 206  
 Hadjersi T., 69, 76  
Hadjou Belaid Z., 128  
 Hafsi Z., 200  
Haiahem S., 208  
Haichour R., 109  
 Halet J-F, 212, 218  
 Halimi O., 28  
 Hamadou L., 41  
 Hamana D., 94  
Hamdouni N., 209  
 Hamidi M., 63  
Hammad S., 210  
Hammar K., 110  
 Hammoutène D., 143, 169, 174, 175, 217, 248  
 Hamzaoui F., 170  
Hannachi D., 147  
 Harat A., 83  
 Harchaoui N., 204  
 Haroun M. F., 147  
Hassein-Bey A., 81, 82  
Hassein-Bey A. L., 82  
Hattab A., 148  
 Hebali K., 125  
Hebboul Z., 58  
 Hellal S., 204  
 Hellala D., 194  
Hellel D., 211  
 Hemmous M., 36, 39  
 Hochlaf M., 144, 216  
 Hocine S., 65  
 Humbel S., 180

**I**

Ibanez-Azpiroz J., 113  
Ibersiene F., 212  
 Idiri N., 71  
Ikhlef D., 213  
Issaad D., 59

**J**

Jaïdane N.-E., 145, 216

**K**

Kaban I., 133  
 Kadri A., 41, 64, 71, 75, 90, 123, 132, 165  
 Kahlal S., 213  
Kais A., 34  
 Katan C., 212  
 Kechouane M., 44, 103  
 Keghouche N., 40, 93  
 Kellou S., 229  
 Kemiti R., 95  
Kennaz H., 83  
 Kerassa A., 236  
 Khalouani S., 42  
 Khater A., 60  
 Khatmi D., 180, 190  
Kheffache S., 60  
 Khelfaoui Y., 70  
Khelif A., 15  
 Khireddine A., 147  
Khorief Nacereddine A., 146, 194, 211  
Kias F., 214, 215  
 Kiefer J., 203  
 Kotsedi C.L., 78  
Koudjeti S., 216  
Krim L., 217

**L**

Labani F., 129  
Ladjarafi A., 218, 240  
Lafane S., 44, 82  
Laidoudi S., 85  
Lakehal A., 219  
Lakehal S., 86, 219, 220  
 Lakhali H., 67  
 Lamine W., 16  
Lamiri L., 87  
 Lamri S., 74  
 Lamrous O., 49, 57  
 Lantri T., 108  
Larabi R., 221  
 Larazani L., 86  
 Larbi Daho Bachir N., 95  
 Larouci B., 31  
 Lasri B., 129  
 Le Bozec H., 172  
 Lekadir F., 53, 61, 62  
Lévy B., 17, 227  
 Liacha M., 160  
Lias S., 101  
 Linguerri R., 144  
 Lo J., 34

Loudjani N., 88  
 Lounis A., 106  
Lounis K., 222  
Lounis S., 21, 113  
Lourek L., 32

**M**

Maaza M., 78  
 Madi F., 197  
Mahmoudi A., 110  
 Mahtout S., 109, 115  
 Majlis B. Y., 81  
 Malek S., 44  
 Malloum A., 12, 148  
 Manallah A., 58  
Mansour M., 89  
 Mansouri N., 90  
 Manyala N., 83  
 Maou S., 150, 223  
 Marder T. B., 212  
 Martínez-Blanco D., 36, 39  
 Maschke U., 128  
 Massout N., 173, 224  
 Mayoufi M., 133  
 Mecheref R., 112  
 Méchernène L., 128  
 Mechouet M., 71  
Meddah C., 149  
Meddour F., 225  
 Medjahed A., 59  
 Medjahed I., 102  
Medjahed S., 226, 241, 242  
 Medjani M., 209  
Meftah Y., 150, 223  
 Megchiche El., 222  
**Meghezzi H.**, 202, 218, 240  
 Meghofel Z.F., 107  
 Mehnen B., 216  
 Meinel J., 185, 209  
Mekelleche S. M., 14, 168, 195, 199  
Merabet L., 129  
 Merabti K., 216, 227  
Merzoud L., 151, 162, 165, 231, 238  
 Meskaldji S., 181, 228  
 Messad L., 110  
Messaoudi B., 152  
Messaoudi O., 113  
Meyar M., 229  
 Mezeghrane A., 57, 63  
 Michel C., 150  
 Milchev A., 149  
 Mitiche L., 127  
 Mohamdi N., 177  
 Mokdad R., 54  
 Mokrani A., 106  
 Morell C., 16  
 Mouhaou W., 93  
Moussaoui A., 230  
 Moussaoui R., 151  
 Moussaoui Y., 235  
 Moutounet O., 212

Muja C., 34

**N**

N'konou K. K. D., 45  
Nadour H., 115, 130  
 Nasri L., 146  
Nassar M., 231  
 Nebbache N., 223  
 Nechiche M., 77  
 Nessark B., 87  
Nouairi M. A., 232  
 Nouar L., 197, 208, 225  
Nourine R., 114

**O**

Ouahrani T., 129  
 Ouamerali O., 104, 151, 162, 224, 231  
 Ouddai N., 182, 187, 220  
Oudini N., 35  
 Ouhenia S., 93  
 Oukil O., 167, 178, 233  
Ould Fella O., 115  
Oulmas C., 132  
 Oussalah S., 52

**P**

Paolone A., 203  
 Pasquinelmi M., 45  
 Paul F., 164  
 Peter G., 21  
 Pfeiffer P., 54  
 Poisson L., 144  
 Puzzarini C., 144

**R**

Rabilloud F., 115  
 Rahim M., 184  
 Rahmouni A., 142  
 Rahmouni M., 203  
 Redouane N., 206  
 Rekeb L., 41  
 Rekhis M., 173, 186  
 Rezouali K., 115  
Rezzouk S., 235  
 Rida K., 129  
 Ridard J., 17, 227  
 Rios-Guttiérrez M., 146  
 Rouane A., 167, 236

**S**

Saadi S., 166  
 Saaidia L., 96  
 Saal A., 151, 162, 165, 176, 231, 238  
 Sabeur S. A., 149  
 Sadaoui-Kacel S., 246  
Safer S., 115  
 Sahmoune A., 127  
 Sahnoun M., 125  
 Sahnoun O., 125  
Saiad A., 239

Saib S., 118  
 Saidi M., 89  
 Saidi-Amroun N., 89  
 Saifi A., 77  
 Saihi R., 240  
 Saillard J-Y, 11, 213  
 Saim L., 117  
 Salah T., 233  
 Saoula N., 67  
 Schwell M., 144  
 Sebaa Z., 226, 241, 242  
 Sebais M., 28  
 Seddiki N., 91  
 Sefir Y., 107  
 Sekkal M., 188  
 Sekkal-Rahal M., 200  
 Senent Diez M. L., 145, 174  
 Serhane R., 81  
 Seridi L., 244  
 Sidi Said A., 52

Simo A., 78  
 Skvortsov A. M., 149  
 Smili B., 133  
 Sobti N., 94  
 Souadia Z., 118  
 Soualah I., 202  
 Soualmia F., 226, 241, 242  
 Souici A., 93

**T**

Tadjine R., 103  
 Tahi H., 82  
 Talbi F., 214, 215  
 Tamine M., 115, 130  
 Tangour B., 139  
 Tazibt S., 243  
 Tchouar N., 167, 178, 226, 233, 236, 241, 242

Terbouche A., 176  
 Terbouche C., 176  
 Terkhi S., 107  
 Teyar B., 153  
 Tezkraat S., 68  
 Therese L., 34  
 Tigrine R., 53, 61, 62, 117  
 Trari M., 80  
 Tribeche M., 32

**V**

Vega A., 119, 243  
 Villemin D., 203

**Y**

Yahiaoui K., 244  
 Yassia-Talha K., 245  
 Yefsah S., 130  
 Yousfi H., 104

**Z**

Zaater S., 246  
 Zeghdoudi T., 63  
 Zendaoui S. M., 247  
 Zenia H., 222  
 Ziane A., 106, 110  
 Ziane M., 119  
 Ziani N., 45, 74  
 Zine A., 94  
 Zouambia S., 248  
 Zouaoui Rabah M., 200  
 Zouchoune B., 196, 239, 247