

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et

de la Recherche Scientifique

جامعة باتنة 02 - الجزائر

UNIVERSITÉ DE BATNA 02-ALGÉRIE

FACULTÉ DE TECHNOLOGIE

ORGANISE



1^{ER}

SÉMINAIRE

NATIONAL HYBRIDE

DE CHIMIE

SNHC'24

26 - 27 OCTOBRE 2024

BATNA - ALGÉRIE

Président du Séminaire

Dr. BAIRA Fayçal Univ. Batna 2



<https://snhc24batna2.sciencesconf.org/>



snhc24@gmail.com



BATNA - AGLÉRIE





Livre des résumés

Président d'Honneur

Dr. SMADI Hacene Univ. Batna 2

Président du Séminaire

Dr. BAIRA Fayçal Univ. Batna 2

Président du Comité Scientifique

Pr. ZIDANI Mosbah Univ. Batna 2

Président du Comité d'Organisation

Dr. BAIRA Fayçal Univ. Batna 2

Vice-Président du Comité d'Organisation

Dr. ZIDANI Sara Univ. Batna 1



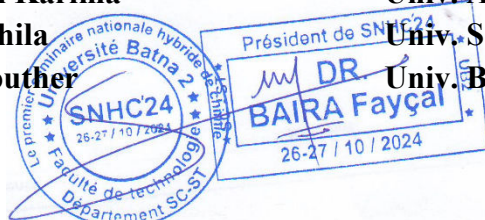
Comité D'organisation

Nom et Prénom	Université
Pr. ACHI Fethi	Univ. Ouargla
Dr. OUACHE Rachid	Univ. Batna 2
Dr. LABAAL Samah	Univ. Batna 2
Dr. CHAOUCHÉ Nadjat	Univ. Batna 2
Dr. BAIRA Kaouther	Univ. Batna 2
Dr. LOUANAS Hanane	Univ. Batna 2
Dr. OUCHEN Wassila	Univ. Batna 2
Dr. BENKRIMA Yamina	Univ. Ouargla
Dr. BOUSABBAT Wahiba	Univ. Batna 2
Dr. MSALLEM Lamine	Univ. Batna 2
Dr. HADDAD Khaoula	Univ. Batna 2
Dr. BAIRA Fayçal	Univ. Batna 2
Dr. HANFER Mourad	Univ. Batna 2
Dr. ZIDANI Sara	Univ. Batna 1
Dr. DJIMAOUI Toufik	Univ. Biskra
Dr. BOUKHANOUEFA Nouredin	Univ. Batna 2
Dr. ABDERRAHIM karima	Univ. Annaba
Dr. BENSADDEK Ali	Univ. Batna 2
Dr. BENAMOR Loubna	Univ. Batna 2
Dr. ZIDANI Ghania	Univ. Batna 2
Dr. TEMAGOULT Asma	Univ. Batna 1
Dr. TAMREBET Moncef	Univ. Batna 2
Dr. TOBBI Ouafa	Univ. Batna 2
Dr. ACHOUR Yahia	ENS. Laghouat
Dr. BENYEZZA Nabil	Univ. Khenchela
Mr. SIARI Aissa	Univ. Batna 2
Mr. ABDOU Chaabane	Univ. Batna 2
Mr. BOUCHAREB Youcef	Univ. Batna 2
Mr. Nadir Hachemi	Univ. Adrar
Dr. LEMMOUCHI Meriem	HNS-RE2SD. Batna



Comité Scientifique

Nom Prénom	Université
Pr. LAABASSI Mohammed	Univ. Batna 2
Pr. BENGUERBA Yacine	Univ. Setif 1
Pr. MADANI Hakim	Univ. Batna 2
Pr. HANNACHI Douniazed	Univ. Batna 1
Pr. SELLOUM Djamel	Univ. Sétif 1
Pr. LAKEHAL Salima	Univ. Batna 2
Pr. ARRIS Sihem	Univ. Constantine 3
Pr. AIT BARA Adel	Univ. El-Tatrf
Pr. ABDERRAHMANE Sihem	Univ. Annaba
Pr. BENOUDIA Mohamed Cherif	ENSTI-Annaba
Pr. MECHACHTI Said	Univ. Annaba
Pr. HARKAT Hacina	Univ. Batna 2
Pr. BOULCINA Raouf	Univ. Batna 2
Pr. MERZOUGUI Abdelkrim	Univ. Biskra
Pr. ACHI Fethi	Univ. Ouargla
Pr. BENTEMAN Hachemi	Univ. Biskra
Pr. MIROUD Djamel	USTHB-Alger
Pr. HAMMOUTENE Dalila	USTHB-Alger
Dr. BOUTEFNOUCHET Hafida	Univ. Annaba
Dr. BENKRIMA Yamina	Univ. Ouargla
Dr. SAKHER Elfahem	Univ. Adrar
Dr. BOUHDJER Adel	Univ. Batna 2
Dr. FEDAOUI Kamel	HNS-RE2SD. Batna
Dr. SAMER Said	Univ. Batna 2
Dr. ZIDANI Sara	Univ. Batna 1
Dr. OUACHE Rachid	Univ. Batna 2
Dr. CHOUHA Nora	Univ. Batna 2
Dr. CHINAR Tahani-Achouak	Univ. Batna 2
Dr. BENMOUSSA Fatah	Univ. D'Adrar
Dr. ZIGHMI Souad	Univ. Ouargla
Dr. BACHA Oussama	Univ. Ouargla
Dr. BAIRA Faycal	Univ. Batna 2
Dr. HANFER Mourad	Univ. Batna 2
Dr. MEHELLOU Ahmed	Univ. El'Oued
Dr. MEROUANI Hafida	Univ. Batna 2
Dr. BOUAKSA Fathia	USTMB-Oran
Dr. YAHIA Lazhar	Univ. Batna 2
Dr. TOBBI Ouafa	Univ. Batna 2
Dr. Abderrahim Karima	Univ. Annaba
Dr. Khellaf Souhila	Univ. Sétif 1
Dr. BAIRA Kaouthar	Univ. Batna 2



SPEAKERS	TITLE	Page
ABDERRAHIM KARIMA	ELECTROCHEMICAL AND COMPUTATIONAL APPROACHES OF POLYMER (C2) COATING ON ALUMINUM IN HYDROCHLORIC ACID MEDIUM	1
ABDOU IMENE (A)	NANOPARTICLE PRODUCTION USING AROMATIC PLANT EXTRACTS AND ASSESSMENT OF THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY	2
ABEL ZENATI	ANALYSE DES COMPOSES BIOACTIFS ET DE LEUR ACTIVITE ANTIRADICALAIRE DANS LES PRODUITS DE LA RUCHE : EXTRACTION ET QUANTIFICATION.	3
ACHOUR YAHIA	ELECTRONIC, MAGNETIC, AND RESONANT PROPERTIES OF THE COMPOSITES OF Pt ₂ FeN AND FeNi ₃	4
ADDALA ABDELHAMID	SYNTHESE ET CARACTERISATION PHYSICO-CHIMIQUE DE NOUVELLE BASE DE SCHIFF 2,4 BIS (2'- THIOPHENYL IMINO) PENTANE	5
AIMENE YASSINE	ÉTUDE COMPUTATIONNELLE DE L'EFFET BIOLOGIQUE DES FLAVONOÏDES D'ORIGINE NATURELLE	6
AKACHA IMANE	ONE STAGE PREPARATION OF A LOW COST ADSORBENT: CHARACTERIZATION AND APPLICATION FOR ADSORPTION OF PARACETAMOL IN WATER	7
ALIOUA SABRINA	SYNTHESIS OF NEW CYCLIC IMIDES DERIVATIVES AND THEIR ANTIMICROBIAL EVALUATIONS	8
AOUACHRIA KAMIRA	THERMAL AND DYNAMIC MECHANICAL ANALYSES OF POLY(LACTIC ACID)/ ETHYLENE VINYL ACETATE (PLA/EVA) BLENDS	9
ARAB HOUDA	THEORETICAL STUDY OF THE DESCRIPTORS OF THE REACTIVITY OF HERBICIDE : AMETRYN	10
ATHMANI SAMEH	ÉTUDE DE L'EFFICACITE INHIBITRICE D'UN EXTRAIT DE PLANTE VERTE SUR LA CORROSION D'UN ACIER ORDINAIRE X70 DANS UN MILIEU ACIDE PAR LA PERTE DE MASSE.	11
AZIEZ SIHAM	ENHANCING PHOTOCATALYTIC PROPERTIES THROUGH SR DOPING IN SNS PHOTOCATALYSTS USING SIMPLE HYDROTHERMAL TECHNIQUES	12
AZIEZ SIHAM	AN ADVANCED MATERIAL STUDY: CORRELATING pH-CONTROLLED GREEN SYNTHESIS OF NiO NANOPARTICLES WITH THEIR MAGNETIC PROPERTIES AND CATALYTIC PERFORMANCE	13
BACHAR REBAT	SYNTHESE ET CARACTERISATION DE STRUCTURES DERIVEES DE LA 2- PYRONE ET EVALUATION DE LEUR POTENTIEL INHIBITEUR SUR LE H37RV	14
BADAOUI KAWTHER	SYNTHESIS AND ANTIFUNGAL EVALUATION OF A-AMINOPHOSPHONATES	15
BAHADI RANIA	SYNTHESE ET EVALUATION DE L'ACTIVITE ANTIMICROBIENNE DE NOUVEAUX DERIVES DE SULFONAMIDE	16
BAIRA FAYÇAL	THE EFFECT OF ANNEALING ON THE PROPERTIES OF DRAWN COPPER WIRE	17
BAIRA FAYÇAL	L'INFLUENCE DU CHAMP ELECTRIQUE SUR LES PROPRIETES MECANIQUES ET ELECTRONIQUES DES NANOTUBES	18
BAIRA KAOUTHER	THEORETICAL ASPECT OF NOVEL HETEROCYCLIC COMPOUNDS: A DFT STUDY	19

BAOUZ TOUFFIK	MALEIC ANHYDRIDE GRAFTED STYRENE-ETHYLENE BUTADIENE-STYRENE (SEBS-G-MAH) COMPATIBILIZED POLY(LACTIC ACID)/RECYCLED HIGH IMPACT POLYSTYRENE (PLA/rHIPS) BLENDS CHARACTERIZED BY MORPHOLOGICAL, THERMAL, AND MECHANICAL MEASUREMENTS	20
BAYARASSOU M.	ETUDE DES PROPRIETES DES FILS EN ALLIAGE D'ALUMINIUM (AGS) TREFILE INDUSTRIELLEMENT	21
BAYMOUT MASSINISSA	ETUDE DE L'EFFET DES METAUX DE TRANSITION SUR L'ACTIVITE ANTIOXYDANTE DE QUELQUES MOLECULES COUMARINIQUE EN SOLUTION.	22
BELAZGHEM NOUR- ELHOUDA	EVALUATION OF THE BIOLOGICAL ACTIVITY OF PULEGONE AND ITS IMINODERIVATIVE USING MOLECULAR DOCKING	23
BELGHERBI OUAFA	STUDY OF THE INHIBITORY EFFECTIVENESS OF POLYAMIDE 11/POLYANILINE ON THE CORROSION OF CARBON STEEL IN 1.5M HCL MEDIUM	24
BELGHIT MOHAMED YAZID	IN SILICO THERAPEUTIC INVESTIGATION OF THE SULFADIAZINE INHIBITOR BASED ON THE STRUCTURE OF THE ENZYMES POLYKETIDE SYNTHASE PKS13 AND DIHYDROFOLATE REDUCTASE (DHFR)	25
BELGUENOUNE AHMED	INVESTIGATION ON STRUCTURAL PROPERTIES OF LaFeO ₃ PEROVSKITES PREPARED VIA SOL-GEL METHOD WITH VARIOUS COMPLEXING AGENTS	26
BELKIOUR SAADIA	PREPARATION OF NEW DENDRIMER-COPPER IN CLASSICAL AND ULTRASONIC METHOD	27
BELLAOUAR ASMA	STUDY OF FENTON PROCESS USING MODIFIED DOLOMITE FOR METHYL ORANGE DYE DEGRADATION	28
BEN AMOR LOUBNA	PIEZOELECTRIC CARACTÉRIZATION OF A NEW CERAMIC MATERIAL	29
BENAZZOUZ- TOUAMI AMINA	COUAMRIN-PYRAZOL AS POTENTIAL ANTI ALZEIMER AGENT	30
BENBRIKA CHAIMA	EFFECTS OF BARIUM DOPING ON THE STRUCTURAL, MORPHOLOGICAL OF BIT AURIVILLIUS	31
BENCHINOUNE MANEL	ÉTUDES ELECTROCHIMIQUES ET DFT DE BASE DE SCHIFF EN TANT QU'INHIBITEUR DE CORROSION	32
BENESSEDDIK RABIAA	CONTRIBUTING TO A PHYSICOCHEMICAL STUDY OF TWO SAMPLES OF ROCKS FROM KHANGAT SIDI NAJI IN BISKRA	33
BENGHANEM SAIDA	CHIMIE DES POLYMERES	34
BENOUNE RACHA AMIRA	MULTICOMPONENT, EFFICIENT APPROACH FOR THE SYNTHESIS OF BIOLOGICALLY ACTIVE 4-AMINO-5-CYANO-PYRIMIDINE DERIVATIVES	35
BENSANA AMIRA	PREPARATION DES ELECTRODES A BASE DE CARBONE COMME DES CAPTEURS CHIMIQUES	36
BENYAMINA ADLENE BENZAID CHAHRAZED	MINIATURISES POUR LA DETECTION DES POLLUANTS CHIMIQUES	37
BERRICHI AMINA	STUDY OF THE INHIBITORY EFFICACY OF PLANT EXTRACTS FROM THE ASTERACEA FAMILY ON XC60 STEEL IN 1M HCL MEDIUM	38
BOUANANI SANA	ACTIVITES BIOLOGIQUES D'OXAZOLIDINONES NEOSYNTHESES	39
	SYNTHESIS OF BIOACTIVE PROPARGYLAMINES DERIVATIVES VIA COPPER HETEROGENEOUS CATALYST	40
	ORGANIC SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF SOME AZO COMPOUNDS	

BOUASLA NABILA	SCREENING PHYTOCHIMIQUE DES GRAINES DE CHIA	41
BOUCHAREB MOHAMMED LAMINE	THE IMPACT OF CHIRAL ANGLE AND CHIRAL INDEX ON THERMAL BUCKLING CHARACTERISTICS OF SWBNNTs RESTING ON A PASTERNAK FOUNDATION USING NL-FSDT THEORY	42
BOUCHOUCHA AFAF	MANGANESE (II) COMPLEX WITH SULFA DRUG LIGAND. SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, ANTIMICROBIAL ACTIVITY, GENOTOXICITY, AND MOLECULAR DOCKING	43
BOUCIF FATIMA	SYNTHESE DE ZNFe-HDL ET SON PRODUIT CALCINE POUR EVALUER SES PROPRIETES CINETIQUES POUR L'ADSORPTION DE ROUGE CONGO.	44
BOUDOUR SAMAH	MORPHOLOGICAL STUDY OF MODIFIED POLYANILINE POWDERS USING IMAGE OPTIMISATION VIA MATLAB	45
BOUGHELOUM CHAFIKA	GREEN SYNTHESIS OF A NEW SERIES OF N-ACYL SULFONAMIDES UNDER HETEROGENEOUS CATALYSIS	46
BOUGHEZALA NASRINE	STUDY OF THE PHYSICAL PROPERTIES OF TIN(II) OXIDE THIN FILMS FOR THERMOELECTRIC APPLICATIONS	47
BOUGRIOU NADA	ÉTUDE DU PROFIL PHYTOCHIMIQUE DES ARTICHAUTS CULTIVÉS EN ALGERIE	48
BOUIZAR ROUKIA	INFLUENCE DE LA TEMPERATURE DE SECHAGE SUR LE PROFIL EN COMPOSES BIOACTIFS ET LES ACTIVITES ANTIOXYDANTES DE POUDRES D'ÉCORCES D'AGRUMES	49
BOUKERCHE KHADIDJA	SYNTHESIS, SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION AND ANTIOXIDANT ACTIVITY STUDY OF NEW ASYMMETRIC SCHIFF BASE	50
BOUKERTOUTA GHADIR	IN SILICO STUDY OF Re(I) BASED ON BENZENESULFONAMIDE AS A HUMAN CARBONIC ANHYDRASE IX INHIBITOR: DFT AND MOLECULAR DOCKING	51
BOUKEZZOULA FAIZA	SYNTHESIS AND ANTIBACTERIAL EVALUATION OF NOVEL SPIROOXINDOLE DERIVATIVES	52
BOUKHENOUBA NOUREDDINE	CONTRIBUTION A L'ETUDE DES PROPRIETES STRUCTURALES ET MORPHOLOGIQUES DES COUCHES MINCES A BASE DE ZNO PURES ET DOPEES AL ELABOREES PAR LA SYNTHESE SOL-GEL DIP COATING SUR DES SUBSTRATS VERRE POUR DES APPLICATIONS OPTOELECTRONIQUES.	53
BOUKLI HACENE IMENE FATIMA ZOHRA	ETUDE PHYTOCHIMIQUE ET ACTIVITE ANTIOXYDANTE DE L'EXTRAIT DE LA PLANTE DE CUPRESSUS LUSITANICA DU CAMEROUN	54
BOULEGHLEM HOCINE	ONE POT-EXTRACTION ET STABILISATION DE LA CURCUMINE PAR UNE MATRICE A BASE DE CHITOSANE: APPROCHES STRUCTURALE ET TECHNOLOGIE FONCTIONNELLE	55
BOUNOURI YASSINE	DIAGRAMME DE PHASE ET CONDUCTIVITÉ ÉLECTRIQUE DES SYSTÈMES BINAIRES NdBr ₃ - MBr (M = Na, K)	56
BOURAOUI RANIA	DFT ANALYSIS , MOLECULAR DOCKING , ADMET PREDICATIONS FOR DRUG DISCOVERY AGAINST NUDT5	57
BOUROUAI MOHAMED AMINE	SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, IN SILICO AND IN VIVO BIOLOGICAL PROPERTIES OF A NEW Ag(I) COMPLEX WITH AN OXAZOLE DERIVATIVE	58
BOUSKIA SOUMAYA	SYNTHESIS, MOLECULAR DOCKING AND ADME PREDICTION OF NEW BENZAMIDES DERIVATIVES CONTAINING SULFONAMIDE MOIETY AS CARBONIC ANHYDRASE TYPE II	59

BOUTICHE SALIMA	AB INITIO STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF BiCoO ₃ IN THE LOW SPIN STATE	60
BOUZGHAIA BADRA	CHEMICAL COMPOUNDS OF SPECIES CYTISUS PURGANS SUBSP. BALANSAE (BOISS) AND ANTIOXIDANT ACTIVITY	62
BOUZGHAIA BADRA	EVALUATION OF THE ANTIOXIDANT AND ANTIMICROBIAL ACTIVITIES OF THE AERIAL PARTS OF CENTAUREA RESUPINATA SUBSP. DUFOURII	61
BOUZIDI AFAF	ÉTUDE DE LA PHOTOREACTIVITE DES COMPOSITES DENTAIRE A BASE DE BIS-GMA/TEGDMA CONTENANT DIVERSES CHARGES VIA UN SYSTEME AMORÇANT CQ/AMINE TERTIAIRE.	63
BOUZINA LILA	ELIMINATION D'UN POLLUANT D'ORIGINE PHARMACEUTIQUE PAR ADSORPTION SUR DES MATERIAUX ISSUS DE LA BIOMASSE	64
BRASSI AICHA	ISOTHERMES D'ADSORPTION D'UN PRODUIT ORGANIQUE SUR DES BIOSORBANTS ISSU D'UN DECHET ALIMENTAIRE	65
BRIKI LYAMINE	CONTRIBUTION A LA CARACTERISATION D'UN GEOPOLYMER POUR SON UTILISATION DANS LE DOMAINE DE LA CONSTRUCTION	66
CHAIB MESSAOUDA	EVALUATING OPERATIONAL EFFICIENCY AND ENVIRONMENTAL IMPACTS ON A GRID-CONNECTED PHOTOVOLTAIC SYSTEM IN THE SAHARAN REGION OF ALGERIA	67
CHAIBI WAHIBA	SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF POLY(ACRYLAMIDE-CO-ACID ACRYLIC) HYDROGEL FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS	68
CHAOUCH NADJAT	EFFECT OF pH ON ZINC OXIDE THIN FILMS	69
CHAOUI AMINA	QSPR MODEL FOR ESTIMATING LOG K _{OC} PARTITION COEFFICIENT OF A SERIES OF POLYCHLORINATED BIPHENYLS.	70
CHARIF MAJDA	SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NANO CATALYSIS	71
CHEDDANI YASMINE	L'ELABORATION, L'ETUDE STRUCTURALE ET L'EVALUATION DES PROPRIETES OPTIQUES DE DEUX POLYMERES DE COORDINATION A BASE D'IONS Ln ³⁺ .	72
CHERCHAR HANENE	THE CYTOTOXIC ACTIVITY OF THREE ISOLATED COMPOUNDS FROM PHAGNALON SAXATILE (L.) CASS	73
CHINAR TAHANI ACHOUAK	ELECTROCHEMICAL, SURFACE AND THEORETICAL INVESTIGATIONS OF A NEW MOLECULE (ZSM-5) DESIGNED FOR CORROSION INHIBITION OF CARBON STEEL IN HYDROCHLORIC ACID MEDIUM	74
CHINAR TAHANI ACHOUAK	MIXED MATRIX (POLYMER/ MODIFIED CLAY) USED FOR INDUSTRIAL EFFLUENT TREATMENT	75
CHOUHA NORA	SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NOVEL SPIROCYCLIC COMPOUNDS	76
CHOUIKHI MANEL SAFIA	REMOVAL OF MALACHITE GREEN DYE FROM WASTEWATER USING POLYACRYLAMIDE HYDROGEL ADSORBENTS: EQUILIBRIUM ANALYSIS AND MODELING VIA LANGMUIR AND FREUNDLICH AND TEMKIN ISOTHERMS	77
DAIKH AMINA	UPLC-ESI-MS/MS ANALYSIS OF PROPOLIS EXTRACTS AND EVALUATION OF ITS CYTOTOXIC ACTIVITY	78
DECHOUK LAMIA FAHIMA	SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, COMPUTATIONAL CALCULATIONS, ADMET STUDY, MOLECULAR DOCKING AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF NICKEL (II) COMPLEX DERIVED FROM FUOPYRAN-3,4-DIONE LIGAND	79

DEKKICHE GHANIA	SYNTHESIS OF ZINC OXIDE NANOPARTICLES IN THE PRESENCE OF [DPOHMIM+][HSO4-] IONIC LIQUID BY SONOCHEMICAL METHOD	80
DEIMI AMEL	INVESTIGATION PHYTOCHIMIQUE DES EXTRAITS DES FEUILLES ET DES RACINES DE LA PLANTE CHICOREE AMERE (UROSPERMUM DALECHAMPII).	81
DERARDJA ALI AKRAM	SYNTHESIS, STRUCTURAL STUDIE OF COMPLEXE Co (II) WITH SCHIFF BASE ISONICOTINIC ACID (1-PHENYL-ETHYLIDENE) –HYDRAZID	82
DERBALI ABIR	SMART POLYMERICS SYSTEMS TO CONTROL DRUG DELIVERY	83
DJAALAB ELBAHI	CHEMICAL AND ELECTROCHEMICAL PREPARATION OF CONDUCTING POLYANILINE FILM COATED ELECTRODES	84
DJABER SELMA	ETUDE DE LA DECONTAMINATION DES EAUX PAR LA TECHNIQUE DES MEMBRANES LIQUIDES EMULSIONNEES. APPLICATION : BLEU DE METHYLENE	85
DJAFAROU SELSABIL	EXPLORATION OF THE ANTICHOLINESTERASE ACTIVITY OF PHENOLIC-PYRIDINIC DERIVATIVES: IN SILICO STUDIES	86
DJAMAI WISSAM	OPTIMIZATION OF THE EXTRACTION OF BIOMOLECULES FROM AZOLLA PINNATA FOR THEIR EXPLOITATION	87
DJENDI MANEL LINA	ÉVALUATION DE L'ACTIVITE ANTIMICROBIENNE, ANTIBIOFILM DES NOUVELLES A- AMINOPHOSPHONATES	88
DJERRAD NOUR ELHOUDA	DEVELOPMENT AND MORPHOLOGICAL, THERMAL, AND MECHANICAL CHARACTERIZATION OF BINARYBLENDS OF POLYOXYMETHYLENE/RECYCLED HIGH IMPACT POLYSTYRENE FROM WASTE ELECTRIC AND ELECTRONIC EQUIPMENT	89
DOGHMANE HOUSSEM EDDINE	SYNTHESIS AND ANNEALING TEMPERATURE EFFECTS ON TIO2 THIN FILM PROPERTIES	90
DOGHMANE NOZHA EL AHLEM	PROPRIÉTÉS STRUCTURALES ET ÉLECTRONIQUES DE LA PHASE WURTZITE ZNO DOPÉ EN ALUMINIUM	91
DRA RAFIK EL ARSLENE	SYNTHESE, CARACTERISATION STRUCTURALE ET ELECTRIQUE D'UN MATERIAUX AVANCE (TYPE OXYDE PYROCHLORE): APPLICATION DANS LES PILES A COMBUSTIBLE SOFC.	92
GHAMRI MARIEM	IN SILICO ANALYSIS OF HETEROCYCLIC MOLECULES APPLIED TO DRUG DESIGN	93
GHITRI FERIEL	APPLICATION OF NANOCOMPOSITE MATERIALS TO THE EXTRACTION OF LANTHANUM(III)	94
GOUISSEM LINDA	ÉTUDE COMPARATIVE DE L'IMPACT DE L'INCORPORATION DE CARBONATE DE CALCIUM (CaCO3) ET DE PERLITE EXPANSEE SUR LES PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES DU POLYETHYLENE HAUTE DENSITE (PEHD)	95
GUERRAB FAHIMA	CORROSION RESISTANCE AND ELECTROCHEMICAL PERFORMANCE OF Ti-6Al-xNb ALLOYS IN PBS SOLUTION	96
GUESMIA AISSA	ÉTUDE DE L'EQUILIBRE ET DE LA STABILITE MECANIQUE DU (Ba2SmsbO6) EN UTILISANT LE CODE WIEN2K AVEC LA METHODE DES ONDES PLANES AUGMENTEES LINEARISEES (LAPW).	97
GUEZZOUN NASSIMA	ETUDE D'ACTIVITE ANTIOXYDANTE DE QUATRE EXTRAITS DES FEUILLES DE ZIZIPHUS SPINA-CHRISTI (L) DE LA REGION DE SOUF (EL-OUED)	98

GUIRA MERIEM	RHEOLOGICAL AND WATER VAPOR PERMEABILITY PROPERTIES OF PLA/PCL-MOF COMPOSITES	99
HABECHE FATIMA	SILICE MESOPOREUSE DOPEE AVEC AgNPs ET CuO POUR LA REDUCTION CATALYTIQUE DES POLLUANTS ORGANIQUES DANS L'EAU.	100
HACHANI RAHIMA	VALORISATION DES DECHETS LIGNO-CELLULOSIQUES (NOYAUX DE DATTES) DANS L'ELIMINATION DES COLORANTS DE L'EAU	101
HACHEMI NADIR	RAMAN MICROSCOPIC ANALYSIS OF DETERIORATED PHOTOVOLTAIC CELL IN DESERT AREAS	102
HACHEMI YASMINE RAHMA	SYNTHÈSE ET ACTIVITÉ ANTIFONGIQUE DE QUELQUES 2,1,2,3-TRIAZOLINES BICYCLIQUES	103
HADDAD KHOULA	A NEW NUMERICAL SIMULATION OF CONTAMINANT TRANSPORT IN TWO-DIMENSIONAL POROUS MEDIA	104
HAMADI BILLEL	THERMAL CHARACTERIZATIONS IN FINISH TURNING OF AISI 1045 CARBON STEEL	105
HAMADI FOUZIA	IMPACT OF IRON CONTENT ON THE PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED Ti-6Al-XFe ALLOYS	106
HAMADI ZINEB	DETERMINATION OF STRUCTURAL STABILITY, ELASTIC, THERMAL AND HALF METALLIC BEHAVIOR OF CoZrVZ	107
HAMADOUCHE SALIMA	THEORETICAL EXPLORATION OF ENHANCED ANTIOXIDANT ACTIVITY IN COPPER COMPLEXES OF TETRAHYDROXYSTILBENES: INSIGHTS INTO MECHANISMS AND MOLECULAR INTERACTIONS	108
HAMAIDI FATIMA ZOHRA	EXTRACTION ET ANALYSE PHYSICO-CHIMIQUES D'UNE HUILE ESSENTIELLE DE L'ARMOISE BLANCHE ET EVALUATION DE LEURS EFFET SUR LES NEMATODE A GALLES	109
HAMDI DOUNIA	ROLE OF LANTHANUM DOPING ON STRUCTURAL AND OPTICAL PROPERTIES OF BaTiO ₃ NANOPARTICLES SYNTHESIZED BY SOLGEL METHOD.	110
HATTALI AHLEM	SYNTHESE ET CARACTERISATION D'UN BIO-POLYMERE COMPOSITE POUR LA DE POLLUTION DES EAUX POLLUEES.	111
HERRI IBTISSAM	EXPERIMENTAL STUDY OF THE EFFECT OF ROUGHNESS ON THE RELATIVE HEIGHT OF THE HYDRAULIC JUMP THRESHOLD DEVELOPED IN A COMPOSITE RECTANGULAR CHANNEL WITH A ROUGH MINOR BED.	112
IBRIR N.	THEORETICAL STUDY OF THE DEGRADATION MECHANISMS OF CEFADROXIL BY (AOP) PROCESSES AND KINETICS AND TOXICITY.	113
IDOUGH KHOULOU	LES SECRETS PHYTOCHIMIQUES DE LA TOMATE SECHEE : UNE EXPLORATION DES COMPOSES BIOACTIFS	114
ISSAADI OUARDA	MYRTUS COMMUNIS L.: PHYTOPOWER	115
JDIDI MARWA	DEVELOPMENT AND ANALYSIS OF ECO-FRIENDLY BENTONITE CLAY APPLICATION IN ADSORPTION OF CATIONIC AND ANIONIC DYES	116
KAHINA LAZELA	ETUDE TECHNICO-ECONOMIQUE COMPARATIVE DE LA SYNTHÈSE DE DEUX INHIBITEURS DE CORROSION DE TYPE SULFONATES DE PETROLE OBTENUS SEPARÉMENT AVEC L'OLEUM ET L'ACIDE SULFURIQUE.	126
KARA RACHA	ENHANCING PHOSPHATE REMOVAL PERFORMANCE FROM WATER USING ZNAL-LDH@BIOCHAR COMPOSITE	117

KASSOUM DJATAOU BAHARI	ACTIVITES ANTIFALCEMIANTE ET ANTI-HEMOLYTIQUE DE TROIS PLANTES MEDICINALES AU NIGER : ANNONA SENEGALENSIS L., BOSCIA SENEGALENSIS (PERS.) LAM. ET AMPELOCISSUS AFRICANA (LOUR.) MERR.	118
KERAKRA SAMIA	INFLUENCE OF VARIOUS TYPES OF METAL-ORGANIC FRAMEWORKS (MOFs) ON THE STRUCTURE AND WATER VAPOR BARRIER PROPERTIES OF PBAT	119
KHELFA NEDJLA	IN SILICO DRUG DISCOVERY OF NOVEL DIAMINODIHYDROTRIAZINE CHEMICALS AS POTENTIAL ANTIMALARIAL AGENTS BASED ON 3D-QSAR, ADME/T AND DRUG-LIKENESS EVALUATION	120
KOLLI ELHADJ	LE ROLE DE L'ACIDE OXALIQUE DANS L'ISOLEMENT DE L'ACIDE ASCORBIQUE DE PETROSELINUM CRISPUM	121
LAKEHAL SALIMA	THEORETICAL STUDY OF THE STRUCTURAL, ELECTRONIC AND ENERGETIC PROPERTIES OF GLDA-ALKALI METAL COMPLEXES.	122
LAKEHAL SALIMA	THEORETICAL STUDY OF THE STRUCTURAL, ELECTRONIC AND ENERGETIC PROPERTIES OF GLDA-ALKALI METAL COMPLEXES.	123
LAMIRI LEILA	3D PRINTING OF POLYMER COMPOSITES BASED ON PHOTSENSITIVE RESIN BY STEREOLITHOGRAPHY SLA	124
LARKAT KARIMA	LES CARACTERISTIQUES PHYSIQUES ET LA COMPOSITION MINERALE DE L'ARGILE JAUNE NATUREL	125
LEBBAL SAMEH	ETUDE THEORIQUE DES COMPLEXES BIMETALLIQUES A BASE DE TITANE	127
LEKEHAL SALIHA LEMMOUCHI	IDENTIFICATION AND INVESTIGATION OF POLYSACCHARIDES IN MEAT PRODUCTS WITH HISTOCHEMICAL TECHNIQUES	128
MERIEH	COMPLEXES OF EDDM AND EDDG	129
LOUANAS HANANE	MECHANISTIC STUDIES OF PHENOLIC ANTIOXIDANT IN REACTION WITH HYDROXYL AND SUPEROXIDE RADICALS	130
MADI FATIHA MAHIEDDINE	ETUDE ENERGETIQUE PAR LA METHODE DFT-D3/CCPVDZ DE LA REACTION DE COMPLEXATION DE P-AMINOBENZOATE DE METHYLE PAR LA A-CYCLODEXTRINE	131
CHERIFA MAKHLOUF	CHEMICAL MODIFICATION OF POTATO STARCH USING A WEAK ALKALINE	132
AZZEDINE	AGING SRTUDY OF NEW COMPOSITE	133
MAKHLOUF FATIMA ZAHRA	SCREEN-PRINTED ELECTRODE MODIFIED WITH PT-NANOPARTICLES AS AN ADVANCED MATERIAL FOR SIMULTANEOUS QUANTIFICATION OF ASCORBIC ACID AND DOPAMINE	134
MAKHLOUF HAMDI	GREEN BIOSYNTHESIS OF SILVER NANOPARTICLES USING MACLURA POMIFERA FRUIT EXTRACT	135
MECHACHTI FATIMA	ETUDE DES PROPRIETES THERMODYNAMIQUES DES ACIDES AMINOPOLYCARBOXILATES BIODEGRADABLES : CALCULS DFT.	136
MEHELLOU AHMED	COMBINING ELECTRODIALYSIS AND Pb/PbO2 ANODIC OXIDATION FOR FAST OXIDATION OF ORGANIC POLLUTANTS AND ENHANCED MEMBRANE ANTI-FOULING ACTIVITY	137
MELAIS NEDJMA	SYNTHESE DE NOUVEAUX TYPES D'AGENT ACYLATION	138
MERDJA KHEDIDJA	SYNTHESE ET CARACTERISATION DES 2-AMINO -5-ARYLIDENE IMIDAZOL-4-ONES ET CALCULS DFT ET DOCKING MOLECULAIRE	139

MESELLEM YAMIN	PREDICTION DE L'ADSORPTION DYNAMIQUE DE COMPOSES ORGANIQUES PAR RESEAUX DE NEURONES ARTIFICIELS (RNA)	140
MESSAOUDI MERIEM	ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR AND MICROSTRUCTURE CHARACTERIZATION OF 5356 ALUMINUM WELDING BEAD MANUFACTURED BY COLD METAL TRANSFER (CMT)	141
MESSAOUI MOHAMED MOUADH	EBOV ENTRY GLYCOPROTEIN INHIBITION: A COMPUTER-AIDED DRUG DISCOVERY APPROACH	142
MESSEDEK LOBNA	STRUCTURAL AND OPTICAL PROPERTIES OF SPIN-COATED Ga ₂ O ₃ THIN FILMS	143
MEYSSOUNE MERIEM	STUDY OF THE ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF DRAWN HARD STEEL WIRES INTENDED FOR THE MANUFACTURE OF STRANDS	145
MEYSSOUNE MERIEM	CHARACTERIZATION OF PHOSPHATE COATINGS ON HIGH CARBON STEEL FOR STRAND FABRICATION	144
MILOUD OUSSAMA	ABID CHEMICAL BONDING TOPOLOGY IN INTERMETALLIC COMPOUNDS WITH THE Mo ₂ FeB ₂ STRUCTURE	146
MOUAISSA MOHAMED SALAH	SYNTHESE D'UN POLYMER INORGANIQUE A BASE DE SEDIMENT DRAGUE : L'ETUDE DE L'EFFET DE LA MOLARITE DE L'HYDROXYDE DE SODIUM	147
MOUMENE NADJETTE	EXOPOLYSACCHARIDES MICROBIENS : AGENTS POTENTIELS POUR L'ÉLIMINATION DES METAUX LOURDS ET LA PRESERVATION DE L'ENVIRONNEMENT	148
MOUMENI OUAHIBA	SUNTHESE ET CARACHETERISATION ESTERS AMINOPHOSPHONATES : APPLICATION BIOLOGIQUE	149
NEGHMOUCHE NACER SALAH	FERROCENE IMIDAZOLIUM SALTS	150
OUACHE RACHID	ETUDE DE L'INHIBITION DE CORROSION PAR L'EXTRAIT AQUEUX DES PARTIES AERIENNES DE SOPHORA	151
OUAFEK N.	SIZE EFFECT OF Ni/MgO NANOCOMPOSITES ON ANTIBACTERIAL ACTIVITY	152
OUELBANI RAYENE	ETUDE D'UNE PLANTE MEDICINALE	153
RABAH AMAL	MOLECULAR DOCKING OF SOME FUROCHROMENE AS ANTI CANCER POTENIEL	154
RACHA BENOUNE	AMIRA MULTICOMPONENT, EFFICIENT APPROACH FOR THE SYNTHESIS OF BIOLOGICALLY ACTIVE 4-AMINO-5-CYANO-PYRIMIDINE DERIVATIVES	155
RAIS ZINEB	FROM WOOD WASTE TO BIOPOLYMER	156
REBIZI NADJIB	MOHAMED SYNTHESIS, BIOLOGICAL ACTIVITY, CHIRAL SEPARATION AND ABSOLUTE CONFIGURATION ASSIGNMENT OF IMINOFLAVANS	157
REFICE LAMOURI	THEORETICAL INVESTIGATION OF THE ELECTRONIC AND MECHANICAL STRUCTURAL PROPERTIES OF THE ANTI-PEROVSKITE PbBX ₃ WITH X=Ru, Sn, Lu	158
ROUANE ASMA	L'HUILE ESSENTIELLE D'ORIGAN : UNE ALTERNATIVE POTENTIELLE AUX ANTIBIOTIQUES	159
SAHLI RABAH	FRONTIER MOLECULAR ORBITALS AND LOCAL REACTIVITY DESCRIPTORS OF HETEROPOLYOXONIOMATES	160
SALHI RIM	INVESTIGATION OF PHYTOCHEMICAL AND ANTIOXIDANT PROPERTIES OF EXTRACTS FROM WILD MYRTLE BERRIES (MYRTUS COMMUNIS L.)	161

SALIHU A. KIYAWA	MINERAL CONTENTS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF HONEY FROM KANO - NIGERIA AGAINST ESCHERICHIA COLI AND PSEUDOMONAS AERUGINOSA	162
SAMSAR DJAMILA	ENHANCING NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES WITH ORTHO-CARBORANE CLUSTERS: A COMPUTATIONAL STUDY	163
SBAIHI AMIRA	THE STUDY OF STRUCTURAL AND OPTICAL PROPERTIES OF MG DOPED NiS NANOSTRUCTURED THIN FILMS BY SPRAY PYROLYSIS TECHNIQUE.	164
SEIDLAMRIA	COMPOSITE OF POLYAMIDE11 (P11) /POLYPYRROLE FOR CORROSION PROTECTION OF CUPRONICKEL (90/10) IN A 3.5% NaCl SOLUTION	165
SELADJI MERYEM	EVALUATION DES TENEURS EN COMPOSES PHENOLIQUES DES RACINES ET DES FEUILLES DE SCORZONERA CORONOPIFOLIA	166
SELLOUM DJAMEL	ELABORATION ET CARACTERISATION DES DEPOTS DE CUIVRE SUR L'ACIER INOXYDABLE	167
SIMOUD YASMINE LINA	PHENOLIC AND FLAVONOID CONTENT AND ANTIOXIDANT EVALUATION OF RED HAWTHORN FRUITS	168
SIRID REMACHE	EVALUATING THE EFFICACY OF ASTERACEAE BUTANOLIC EXTRACT AS A GREEN CORROSION INHIBITOR FOR CARBON STEEL IN ACIDIC ENVIRONMENTS USING GRAVIMETRIC ANALYSIS AND THERMODYNAMIC CALCULATIONS.	169
SOUFI WASSILA	CONTRIBUTION A LA MODELISATION DES INTERACTIONS DANS LES BIOMOLECULES	170
TEKILI ADEL	NEUTRAL AND MULTICHARGED IONS OF ALUMINUM NITRIDE SPECIES: STRUCTURES, IONIZATION AND DISSOCIATION ENERGIES	171
TELHAS DJIHAD	PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF AN ACTIVATED CARBON	172
TEMAGOULT ASMA	INFLUENCE DE LA TECHNIQUE SUR LES CARACTERISTIQUES DES PAPIERS FABRIQUES A PARTIR DES SOUS-PRODUITS DES CLADODES	173
TERKHI MED CHERIF	TRAITEMENT D'UN COMPOSE LIGNOCELLULOSIQUE D'ORIGINE VEGETALE PAR KOH POUR AMELIORER L'EFFICACITE D'ELIMINATION D'UN COLORANT CATIONIQUE TOXIQUE D'UNE SOLUTION AQUEUSE	174
TOBBI OUAFA	OPTIMIZATION OF Cr(VI) ADSORPTION PARAMETERS USING SPRUCE WASTE BIOSORBENT VIA RESPONSE SURFACE METHODOLOGY	175
TORCHE KHOULOU	SYNTHESIS, STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF $Co_{7-x}Mn_x(HPO_4)_4(PO_4)_2$	176
TOUAHRIA YUCEF ISLAM	ORGANIC SYNTHESIS OF HYDRAZONES: SPECTRAL ANALYSIS, EVALUATION OF ANTIBACTERIAL ACTIVITY, AND MOLECULAR DOCKING STUDIES	177
TOUATI NAIMA	PROPRIETES THERMIQUES DES BIOCOMPOSITES PHBV/LIGNINE ALCALINE	178
TOUIL MERIEM	A HOLISTIC APPROACH TOWARDS CHARACTERIZING THE TAIBET SILICEOUS SAND (EASTERN ALGERIA) FOR POTENTIAL INDUSTRIAL APPLICATIONS	179
ZAIDI MERIEM	QUANTUM CHEMICAL ANALYSIS OF STATIC AND DYNAMIC NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF ALN NANOCAGES	180
ZEHANI LAMIA	EVALUATION OF THE DERMATOPROTECTIVE AND ANTIOXIDANT ACTIVITIES OF THE METHANOLIC EXTRACT OF HALOGETON SP	181
ZIDANE IMADE	OVERVIEW OF NiTiNOL-BASED SHAPE MEMORY ALLOYS	182
ZIDANE SALIMA	DEVELOPPEMENT UNE STRATEGIE DE STABILISATION D'HYDROCHLOROTHIAZIDE VIA UN SYSTEME HYBRIDE TRAITE COMBINEE DE B-CYCLODEXTRINES ET L'ARGILE (ACTIVITE ET NON ACTIVITE)	183

ZIDANI SARA	OPTICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF ZNO	184
ZINE DJIHANE	NOUVELLE PROCEDURE DE PREPARATION DES DERIVES DE LA QUINAZOLINE.	185
ZINE MOUNIA	QSRR-BASED PREDICTION OF RETENTION TIMES FOR 122 VOCs	186

ELECTROCHEMICAL AND COMPUTATIONAL APPROACHES OF POLYMER (C2) COATING ON ALUMINUM IN HYDROCHLORIC ACID MEDIUM

ABDERRAHIM KARIMA, SID ASSIA(2), MOUSSAOUI KAMILIA (1), BOUASLA NABILA (1) (3)

1 - Surface Engineering Laboratory (L.I.S), Badji Mokhtar –Annaba University.12.P.O.Box. 23000
Annaba, Algeria (Algérie),

2 - Laboratory of Analytical Sciences, Materials and Environmental (LSAME). Larbi Ben M'Hidi
University. Oum El Bouaghi. 04000. Algeria. (Algérie),

3 - Université Chadli ben Djedid -El Tarf (Algérie) (Algérie)

Email : **Karimaabderrahim2@gmail.com**

Résumé :

In the present work, a new polymer, (C2) was synthesized and examined as a corrosion inhibitor for aluminum (Al) in a very aggressive medium (1 M HCl) using weight loss and electrochemical (PDP and EIS) techniques, the surface of the metal was characterized by EDX, and SEM. The reagents used in the synthesis of C2 are available, their synthesis yield is important, and is characterized by ^1H , ^{13}C NMR and FTIR. The C2 is applicable in therapeutic chemistry. It was found that the inhibitory efficiency increases with the concentration of C2 to reach a maximum value of 94.58% for the concentration 3×10^{-4} M. The temperature effect on the inhibition performance was studied in the interval (298–318 K) and C2 adsorption on the surface of MS in the corrosive environment followed the Langmuir isotherm. The results were supported by density functional calculations (DFT) and molecular dynamics simulation (MD).

Mots clés : Corrosion inhibition, Al, polymer(C2), Electrochemical test, DFT, MD

NANOPARTICLE PRODUCTION USING AROMATIC PLANT EXTRACTS AND ASSESSMENT OF THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY

ABDOU IMENE (A), YAKHLEF GANIA (B) KADI HADJER (B), RAHAL ASMA (B), RAHEM LINDA (B)

a: Higher National School of Renewable Energies, Environment, and Sustainable Development, Batna, Algeria

b: Department of Microbiology and Biochemistry, Faculty of Science of Nature and Life, University of Batna, 2 - Mustapha Ben Boulaid, 05000, Batna, Algeria

Email :

Résumé :

In order to replace expensive chemical synthesis with safer, more environmentally friendly alternatives, the current study aims to synthesize metal nanoparticles (AgNPs) from *E. camaldulensis* leaf extracts. The extracts' biomolecules serve as styling and reducing agents. UV-Visible, FTIR, XRD, and SEM-EDX methods were used to characterize the produced nanoparticles' structure and morphology. The findings show that stable spherical nanometric silver particles with an average agglomeration size of 50 nm and a maximum UV-Vis absorbance of 480 nm were effectively produced. Furthermore, an in vitro assessment of the AgNPs' possible biological activity was conducted. The combined findings unequivocally demonstrate that the synthesized AgNPs offer a great deal of promise for the biological functions examined. As a result, the biomolecules found in the plant extracts shown promising biological efficacy in the creation of AgNPs. This makes it possible to use these nanoparticles in novel medicinal and cosmetic formulations.

Mots clés : Silver nanoparticles, Green synthesis, *E. camaldulensis* extract, Biological activities.

ANALYSE DES COMPOSÉS BIOACTIFS ET DE LEUR ACTIVITÉ ANTIRADICALAIRE DANS LES PRODUITS DE LA RUCHE : EXTRACTION ET QUANTIFICATION.

ABEL ZENATI, SALHI RIM , TAFININE-MOUHOUBI ZINA, BOUIZAR ROUKIA (1), AMESSIS NADIA (2)

(1) Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie, Laboratoire de Biomathématiques Biophysique Biochimie et Scientométrie, Université A. MIRA de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie.
(2) Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie, Laboratoire de biochimie appliquée, Université A. MIRA de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie.

Email : **Abel.Zenati@univ-bejaia.dz**

Résumé :

Les produits apicoles, notamment le miel, la propolis et le pollen, suscitent un intérêt croissant en tant que sources naturelles de composés antioxydants. Notre étude a porté sur la détermination de la teneur totale en antioxydants et l'évaluation de l'activité antioxydante des produits de la ruche (miel, propolis et pollen) collectés dans la même région de Chellata (Algérie). Parmi les produits étudiés, la propolis avait la plus forte concentration d'antioxydants, suivie du pollen et du miel, mais les différences étaient significatives. La propolis se caractérise par la teneur la plus élevée en composés phénoliques, en caroténoïdes et en acide ascorbique. Le pollen est le produit le plus concentré en flavonoïdes. De plus, l'activité antioxydante des extraits de méthanol et d'éthanol a été évaluée à l'aide des tests DPPH et ABTS, montrant une activité antiradicalaire considérable avec des différences significatives entre les produits. L'analyse de corrélation a mis en évidence une relation positive significative entre la teneur en antioxydants (polyphénols, flavonoïdes et caroténoïdes) et l'activité antioxydante, indiquant que ces composés déterminent en grande partie les propriétés antioxydantes des produits apicoles. Ces résultats renforcent l'idée selon laquelle les produits de la ruche constituent une source précieuse d'antioxydants naturels. La variabilité de leur composition en antioxydants reflète des facteurs tels que l'origine végétale, la géographie et les conditions climatiques, ce qui souligne l'importance d'une caractérisation précise de ces produits.

Mots clés : DPPH, ABTS, Miel, pollen, propolis, polyphénols.

**ELECTRONIC, MAGNETIC, AND RESONANT PROPERTIES OF THE COMPOSITES OF
Pt₂FeN AND FeNi₃**

ACHOUR YAHIA,

Email : y.achour@ens-lagh.dz

Résumé :

Basically, electronic, elastic, and magnetic properties of FeNi₃ composite were studied, this is on the one hand, however on the other hand reviewing after grafting it with a platinum atom to obtain the compound FeNi₂Pt relying on the quasi-potential method, that is based on density functional theory, where the generalized gradient approximation proposed by (PBE) was used, gap range values were calculated by the generalized gradient approximation for a zero stress value, so as to be consistent with previous theoretical and experimental results. Through the electronic properties, especially the total density of states, the results of the calculated band structure of the compound FeNi₃ were compared with what was obtained for the compound FeNi₂Pt. It also appears that the electron density distribution process is in the region close to the Fermi level for both compounds. By calculating the polarization of the electronic winding, it appears that the two compounds studied are semi-metallic compounds and soft magnetic compounds that are characterized by excellent magnetic conduction properties. The partial density of states showed the effect of the 3D atomic level on the electronic distribution of the two compounds, as the d orbitals of the iron and nickel atoms contribute to the magnetization of the two compounds studied. FeNi₂Pt also showed greater ferromagnetism than FeNi₃.

The conclusion of calculating the elastic coefficients of the compound FeNi₃ were very close to the previously announced theoretical and experimental results, and it appears that the compounds FeNi₃ and FeNi₂Pt have high Hardness and that the bonds between their atoms are ionic bonds.

Mots clés : Density functional theory - FeNi₃ alloys - FeNi₂Pt alloys - band structure - total density of states DOS - electronic spin polarization - ferromagnetism -

26-27/10/2024

SYNTHÈSE ET CARACTÉRISATION PHYSICO-CHIMIQUE DE NOUVELLE BASE DE SCHIFF 2,4 BIS (2'- THIOPHENYL IMINO) PENTANE

ADDALA ABDELHAMID(1), CHAÏB NADJLA(2)

1,2 Université 20 aout 55, Département de génie des procédés Laboratoire Catalyse, bioprocédé et Environnement

Email : **a.addala@univ-skikda.dz**

Résumé :

Ces derniers temps, les bases de Schiff différemment substituées ont donné de bons résultats dans différent domaines pour des raisons d'écotoxicité, la médecine, l'adsorption et inhibiteur de corrosion...etc. Il est montré que des liaisons très fortes établies entre les sites actifs et les doublets électroniques libres des atomes hétérogènes présents dans la structure de l'imine. Le but de ce présent travail est la synthèse d'un nouveau ligand nommé 2,4 bis (2'- thiophenyl imino) pentane. Le mode de synthèse chimique de ce ligand est réalisé avec 2,4 – pentanedione et 2-aminobenzenethiol.

Ce nouveau composé organique est caractérisé par les méthodes spectroscopiques classique, la résonance magnétique nucléaire RMN, spectroscopie uv-visible, la spectroscopie infrarouge FTIR et l'analyse élémentaire.

Mots clés : Synthèse organique, base de Schiff

26-27/10/2024

ÉTUDE COMPUTATIONNELLE DE L'EFFET BIOLOGIQUE DES FLAVONOÏDES D'ORIGINE NATURELLE

AIMENE YASSINE (1), KOLLI ELHADJ (2)

1 - Laboratoire de Chimie Physique, Université 08 Mai 1945 Guelma 24000 (Algérie),

2 - Laboratoire des Silicates, Polymères et des Nanocomposites, Université 08 Mai 1945 Guelma 24000 (Algérie)

Email : yassine.aimene@gmail.com

Résumé :

Le but de notre étude est l'évaluation computationnelle de l'effet biologique de cinq composés flavonoïdes d'origine naturelle (L1 à L5) en tant qu'inhibiteurs potentiels de l'Anhydrase Carbonique Humaine IX (ACH-IX). À cette fin, des analyses de docking moléculaire ont été réalisées avec le programme Autodock4.2 pour évaluer la meilleure position de chaque ligand dans le site catalytique de l'enzyme ACH-IX. Cette approche nous permet d'explorer de nouvelles molécules naturelles potentiellement efficaces contre les tumeurs associées à la surexpression de l'ACH-IX. Les résultats préliminaires montrent que les cinq dérivés flavonoïdes sont bien placés dans le site actif de l'ACH-IX, où elles sont alignées avec l'inhibiteur naturel. Les scores énergétiques varient de 6,31 à -9,67 kcal/mol. Cependant, L3 montre une énergie de complexation ($\Delta G = -6,59$ kcal/mol) plus faible que les autres dérivés qui n'ont pas établi d'interactions avec le zinc. En conséquence, le complexe L3/ACH-IX (Hôte-invité) devrait être plus stable. Le pouvoir inhibiteur du ligand L3 pourrait en rend un médicament prometteur pour les tumeurs. Enfin, nous proposons de vérifier ces résultats théoriques par des études expérimentales in-vitro et/ou in-vivo.

Mots clés : Flavonoïde, ACH IX, Docking Moléculaire.

26-27/10/2024

ONE STAGE PREPARATION OF A LOW COST ADSORBENT: CHARACTERIZATION AND APPLICATION FOR ADSORPTION OF PARACETAMOL IN WATER

AKACHA IMANE (1), MERZOUGUI ABDELKRIM, BOUZID KHADIDJA

1 - LARGHYDE Laboratory, university of biskra (Algérie)

Email : **imane.akacha@univ-biskra.dz**

Résumé :

Recently pharmaceuticals are emerging as a major source of pollution for the environment. Drugs effluents are bioactive and their existence in the environment has been found harmful to both aquatic life and humans. Biochar is a solid material obtained from biomass carbonization has become an important low cost environmental management material and has more economic benefits than other adsorbents. The present study was undertaken to prepare a biochar from agriculture waste. Brunauer -Emmett-Teller (BET) and scanning electron microscopy Analysis SEM were used to characterize the bio-adsorbent. Several operating conditions were varied in order to optimize the adsorption efficiency of the prepared biochar for pharmaceutical pollutant removal (contact time, pH medium values ion strength . . .)

Mots clés : Adsorption process, Pharmaceuticals pollutants, Biochar, BET, SEM

26-27/10/2024

SYNTHESIS OF NEW CYCLIC IMIDES DERIVATIVES AND THEIR ANTIMICROBIAL EVALUATIONS

ALIOUA SABRINA(1), CHAFIKA BOUGHELOUM (2)

1 - Laboratory of Advanced Systems and Materials (Algérie),

2 - Sciences Faculty, Badji Mokhtar-Annaba University, (Algérie)

Email : s.alioua@yahoo.com

Résumé :

A series of cyclic imides having sulfonamide moieties are synthesized under efficient and economical synthetic methods. These compounds are obtained in three steps: carbamoylation- sulfamoylation, deprotection and condensation. The desired products were achieved with good to excellent yields. Chlorosulfonyl isocyanate (CSI) was used to introduce the sulfonyl moiety and succinic anhydride for the introduction of the imide moiety. The antibacterial and antifungal activities of the synthesized compounds in this work were evaluated in vitro using the minimum inhibition concentration method (CMI). The obtained results showed a significant effect against selected microbial strains. A series of cyclic imides having sulfonamide moieties are synthesized under efficient and economical synthetic methods. These compounds are obtained in three steps: carbamoylation- sulfamoylation, deprotection and condensation. The desired products were achieved with good to excellent yields. Chlorosulfonyl isocyanate (CSI) was used to introduce the sulfonyl moiety and succinic anhydride for the introduction of the imide moiety. The antibacterial and antifungal activities of the synthesized compounds in this work were evaluated in vitro using the minimum inhibition concentration method (CMI). The obtained results showed a significant effect against selected microbial strains.

Mots clés : cyclic imides, sulfonamides, condensation, antimicrobial activity.

THERMAL AND DYNAMIC MECHANICAL ANALYSES OF POLY(LACTIC ACID)/ ETHYLENE VINYL ACETATE (PLA/EVA) BLENDS

AOUACHRIA KAMIRA, KAMIRA AOUACHRIA, MOHAMED TAHAR BENANIBA

1 - Laboratoire des Matériaux Polymériques Multiphasiques (LMPMP), Département de Génie des Procédés Faculté de Technologie, Université Ferhat Abbas Sétif 1, Sétif (Algérie) (Algérie)

Email : **aouachria_dz@univ-setif.dz**

Résumé :

The Polylactic acid (PLA) has attracted a lot of attention in recent years because of its good properties such as high transparency, high tensile strength and excellent biodegradability. However, high modulus and low strain are disadvantage to be applied as packaging materials. To overcome this limitation, PLA is mixed with various ethylene vinyl acetate (EVA) content (0 – 20% by weight) in absence and in presence of acetyl tributyle citrate (ATBC). The dynamical mechanical analysis (DMA) and thermal properties measured by differential scanning calorimetry (DSC) and thermogravimetry analysis (TGA) were fully investigated. By using scanning electron microscopy (SEM), it was demonstrated that ATBC increases the miscibility between PLA/EVA blends.

Mots clés : PLA/EVA blends, ATBC, DMA, DSC, TGA.

26-27/10/2024

**THEORETICAL STUDY OF THE DESCRIPTORS OF THE REACTIVITY OF HERBICIDE :
AMETRYN**

ARAB HOUDA (1), MASMOUDI RIDA (1), KHETTAF SAMI (1), BOUCHEKIOUA SAAD (2), DIBI AMMAR (1)

1 - Laboratory of Chemistry and Environmental Chemistry (LCCE), Department of Chemistry,
Faculty of Material Sciences, University of Batna-1, Batna, Algeria. (Algérie),

2 - Pharmaceutical Sciences Research Center (CRSP), Constantine, Algeria. (Algérie)

Email : houda.arab@univ-batna.dz

Résumé :

A structural theoretical study by molecular modeling of ametryn in order to discuss the reliability of the chemical model used as well energy study on local and global descriptors to know their reactivity. The calculations were performed on using density functional theory (DFT) with the hybrid functional B3LYP at base 6-311++G(d,p) in isolated and solvated phase , using the Gaussian 16 package. The effect of the solvent is introduced using the theoretical model CPCM.

Mots clés : Ametryn, CPCM, DFT, local and global descriptors.

ETUDE DE L'EFFICACITÉ INHIBITRICE D'UN EXTRAIT DE PLANTE VERTE SUR LA CORROSION D'UN ACIER ORDINAIRE X70 DANS UN MILIEU ACIDE PAR LA PERTE DE MASSE.

**ATHMANI SAMEH (1,2), BOUASLA NABILA (2), SAOUDI ADEL (1), SEDIK AMEL (1),
ABDERRAHMANE SIHEM (2), LERARI DJAHIDA (1)**

1 - Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyses Physico-chimiques (CRAPC),
Zone Industrielle, BP 384 Bou -Ismail, Tipaza, Algeria. (Algérie),

2 - Surface Engineering Laboratory, Badji Mokhtar University, ANNABA, B. P. 12 (Algérie)

Email : aathmani2015@gmail.com

Résumé :

L'utilisation des inhibiteurs est l'un des moyens les plus couramment utilisés pour la protection des métaux de la corrosion notamment en milieu acide .Les huiles et les extraits de plantes sont considérés de plus en plus comme une source d'inhibiteurs de corrosion verts. Ils sont essentiellement utilisés en substitution aux produits chimiques toxiques dénoncés par les organismes de protection de la santé humaine et de l'environnement. Dans ce travail, l'effet inhibiteur des feuilles d'une plante verte extraite par la méthode de soxhlet, sur la corrosion de l'acier ordinaire X70 en milieu acide HCl à 1M a été étudié en utilisant la méthode de perte de masse. L'analyse de l'extrait de la plante a été réalisée par Transformé de Fourier Infrarouge (FTIR). L'influence de la concentration sur l'efficacité inhibitrice a été étudié. Les résultats obtenus montrent une efficacité inhibitrice maximale de 89,39% à été obtenue correspondant à la concentration 500ppm, la spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier a montré la présence des groupements OH et C=O.

Mots clés : corrosion, inhibiteur vert, acier, HCl, FTIR.

ENHANCING PHOTOCATALYTIC PROPERTIES THROUGH SR DOPING IN SnS PHOTOCATALYSTS USING SIMPLE HYDROTHERMAL TECHNIQUES

AZIEZ SIHAM(1), LERARI DJAHIDA¹, MESSAI YOUSSEF², BOUARROUDJ TAYEB¹, CHEBOUT REDOUANE¹ AND BACHARI KHALDOUN¹.

¹ Scientific and Technical Research Center in Physico-chemical Analyses (CRAPC), BP 384, Bou-ismail, RP 42004 Tipaza, Algeria.

² Laboratory for the Study of Surfaces and Interfaces of Solid Matter (LESIMS), Badji Mokhtar University, Annaba, 23000, Algeria.

Email : aziez.siham@crapc.dz

Résumé :

In this study, we report a facile hydrothermal synthesis of strontium-doped SnS nanoflowers that were used as a catalyst for the degradation of antibiotic molecules in water. The prepared sample was characterized using X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), and ultraviolet–visible absorption spectroscopy (UV–Vis). The photocatalytic ability of the strontium-doped SnS nanoflowers was evaluated by studying the degradation of metronidazole in an aqueous solution under photocatalytic conditions. The degradation study was conducted for a reaction period of 300 min at neutral pH, and it was found that the degradation of metronidazole reached 91%, indicating the excellent photocatalytic performance of the catalyst. The influence of experimental parameters such as catalyst dosage, initial metronidazole concentration, initial reaction pH, and light source nature was optimized with respect to metronidazole degradation over time. The reusability of the strontium-doped SnS nanoflowers catalyst was investigated, and its photocatalytic efficiency remained unchanged even after four cycles of use.

Mots clés :

26-27/10/2024

AN ADVANCED MATERIAL STUDY: CORRELATING pH-CONTROLLED GREEN SYNTHESIS OF NiO NANOPARTICLES WITH THEIR MAGNETIC PROPERTIES AND CATALYTIC PERFORMANCE

AZIEZ SIHAM(1), MESSAI YOUSSEF (2), BOUARROUDJ TAYEB (1), LERARI DJAHIDA (1), CHEBOUT REDOUANE (1) AND BACHARI KHALDOUN (1).

1 Scientific and Technical Research Center in Physico-chemical Analyses (CRAPC), BP 384, Bou-ismail, RP 42004 Tipaza, Algeria.

2 Laboratory for the Study of Surfaces and Interfaces of Solid Matter (LESIMS), Badji Mokhtar University, Annaba, 23000, Algeria.

Email : aziez.siham@crapc.dz

Résumé :

Nickel oxide nanoparticles (NiO) were synthesized using an eco-friendly approach with *Nigella sativa* seed extract as a stabilizing agent, varying the pH levels of the solutions (pH 7, 9, and 11). The resulting NiO nanoparticles were characterized using multiple techniques, including X-ray diffraction (XRD), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), Brunauer-Emmett-Teller (BET) analysis, scanning electron microscopy (SEM) with energy-dispersive spectroscopy (EDS), and vibrating sample magnetometry (VSM). XRD patterns, refined using the Rietveld method, confirmed the formation of NiO. Structural and microstructural variations were observed using the Williamson equation. FTIR analysis detected characteristic Ni-O vibration modes at 470 cm^{-1} . Magnetic analysis showed that NiO synthesized at pH 9 (NiO-9) had the highest magnetic saturation (M_s) and remanence (M_r), with values of 1.524 and 0.084 emu/g, respectively, enhancing its ferromagnetic properties. Additionally, NiO-9 exhibited the fastest catalytic activity in reducing 4-nitrophenol to 4-aminophenol, completing the reaction in 30 minutes with a rate constant of 0.29 min^{-1} .

Mots clés : Green synthesis, Nickel oxide nanoparticles; Catalysis; Magnetic properties

26-27/10/2024

SYNTHÈSE ET CARACTÉRISATION DE STRUCTURES DÉRIVÉES DE LA 2-PYRONE ET ÉVALUATION DE LEUR POTENTIEL INHIBITEUR SUR LE H37RV

BACHAR REBAT (1),

1 - Département de Chimie, Faculté des Sciences Exactes et de l'Informatique Université Ziane Achour, Djelfa 17000, Algérie

2 Laboratoire de Chimie Organique et Substances Naturelles Université Ziane Achour Djelfa, 17000, Algérie. (Algérie)

Email : rm.bachar@univ-djelfa.dz

Résumé :

La synthèse de composés hétérocycliques répondant à un besoin thérapeutique est l'axe principal des travaux de notre équipe de recherche. Nous avons utilisé l'acide déhydroacétique (DHA), une 2-pyrone peu onéreuse déjà utilisées dans nos travaux antérieurs, comme produit de départ. Le DHA est couramment utilisé comme agent de conservation, antimicrobien ou encore antifongique. Il est également utilisé comme une molécule de départ polyvalente pour la synthèse de nombreux pharmacophores avec une variété d'activités. La Tuberculose (TB), est une maladie infectieuse qui reste un problème de santé mondial majeur, selon l'Organisation Mondiale de la Santé (OMS), en 2022 1,6 millions de personnes sont mortes de la maladie. Faire face aux souches multi résistantes (MDR) avec des résistances aux antibiotiques comme l'isoniazide, la rifampicine et les souches ultra résistantes (XDR) de la tuberculose résistante au fluoroquinolone, kanamycine, et capréomycine reste un défi majeur du traitement contre la tuberculose. Dans cette étude, une série de cinamoyle obtenues à partir de cette pyrone ont été synthétisées de manière simple, caractérisées par diverses méthodes d'analyses (RMN ¹H, ¹³C, RX) puis soumises à l'évaluation de leurs concentrations minimales inhibitrices (CMI) contre la souche la plus virulente du *Mycobacterium tuberculosis* H37Rv. Ils ont ensuite été évalués comme inhibiteurs directs de l'enzyme InhA, une enzyme impliquée dans la synthèse de la paroi cellulaire mycobactérienne qui est une cible privilégiée de manière à contourner le problème de résistance lié aux antibiotiques classiques. Des résultats très prometteurs ont été obtenus.

Mots clés : 2, pyrone, cinamoyle, H37Rv, l'enzyme InhA

SYNTHESIS AND ANTIFUNGAL EVALUATION OF A-AMINOPHOSPHONATES

BADAoui KAWTHER (1), SEHOUT IMENE (1)

1 - Laboratoire de Synthèse des Molécules Bioactives Département de Chimie Université
Constantine 1 (Algérie)

Email : badaoui.kaouthar7@gmail.com

Résumé :

In this study, the multicomponent reaction Kabachnik-Fields reaction was used by the researcher to obtain some α -aminophosphonates derivatives starting from an aniline, an aldehyde and triethyl phosphite. The reaction was achieved in green and ecofriendly conditions. The synthesised compounds were tested on *Fusarium oxysporum* f.sp. *lycopersici*. with the use of PDA as a fungus culture medium to determine their antifungal activity.

Mots clés : Green Synthesis, Kabachnik, Fields reaction, α , aminophosphonates, Antifungal Evaluation, *Fusarium oxysporum* f.sp. *lycopersici*.

26-27/10/2024

SYNTHÈSE ET ÉVALUATION DE L'ACTIVITÉ ANTIMICROBIENNE DE NOUVEAUX DÉRIVÉS DE SULFONAMIDE

**BAHADI RANIA (1), BERREDJEM MALIKA (2), BENZAID CHAHRAZED (2), DJENDI MANEL LINA (2),
GRIB ISMAHENE (2)**

1 - 1-Laboratoire de Chimie Organique Appliquée, Faculté des Sciences, Université Badji-Mokhtar-Annaba, Annaba, Algérie.

2-Département Génie des Procédés, Faculté de Technologie, Université Chahid Mostfa Benboulaïd -Batna 2-, Batna, Algérie. (Algérie),

2 - 1-Laboratoire de Chimie Organique Appliquée, Faculté des Sciences, Université Badji-Mokhtar-Annaba, Annaba, Algérie. (Algérie)

Email : rania.bahadi@univ-batna2.dz

Résumé :

Les sulfonamides bactériostatiques et d'autres familles de médicaments dérivés de sulfonamide sont développés en exploitant les observations faites lors de l'évaluation clinique des dérivés de sulfanilamide ; parmi les exemples de médicaments qu'on trouve : le sulfadiazine [1], le sulfisoxazole [2] et le Mafénide [3]. Ces dernières années les chercheurs essaient d'employer de nouvelles techniques de synthèse afin de minimiser et résoudre les problèmes de santé humaine et de l'environnement liés à la pollution chimique. La chimie verte constitue alors un excellent moyen pour atteindre à ces objectifs. Parmi ces nouvelles techniques, on trouve la sonochimie, les micro-ondes qui facilitent la synthèse organique par la diminution de nombre d'étapes en offrant une grande efficacité. Notre travail exposé est consacré à la synthèse de nouveaux dérivés de sulfonamide. En mettant en œuvre une méthode de synthèse verte basée sur l'utilisation des micro-ondes et des ondes ultrasoniques pour activer la réaction, dont l'objectif est la synthèse de nouveaux agents antibactériens. La réaction a été effectuée à partir de chlorure de 4-toluènesulfonyl et une amine primaire suivie d'une condensation avec deux aldéhydes sans solvant et sans catalyseur. Les différentes méthodes spectroscopiques, RMN 1H, RMN 13C et IR, ont été mises à profit pour établir les caractéristiques structurales des composés synthétisés.

Mots clés : Sulfonamides, activité antibactérienne, micro, onde, ultrason.

THE EFFECT OF ANNEALING ON THE PROPERTIES OF DRAWN COPPER WIRE

BAIRA FAYÇAL (1), MOSBAH ZIDANI (1,2), MOKHTAR BAYAARASSOU(2).

1 Faculté de Technologie, Université Batna 02, Batna, Algérie,

2 Laboratoire de Génie Energétique et Matériaux (LGEM), Université de Biskra

Email : f.baira@univ-batna2.dz

Résumé :

This study is proposed within the framework of a scientific collaboration with the ENICAB electric power transmission cable manufacturing company in Biskra. The objective of this work is to study the influence of the annealing treatment and the holding time on the structural, mechanical and electrical properties of copper wires drawn industrially at the ENICAB company in Biskra intended for electric cables. For this study, several experimental techniques of measurement and characterization allowed us to carry out this work. These are: optical microscopy, scanning electron microscopy, backscattered electron diffraction, Vickers microhardness, tensile tests and resistivity measurements. Structural and textural analysis shows that the copper wires heat-treated at 260°C for 30 minutes of holding time consist of the same $\langle 111 \rangle$ // DN and $\langle 001 \rangle$ // DN reinforcements as the deformed wires with a homogeneity grain sizes. On the other hand, it is observed that the fiber $\langle 001 \rangle$ // DN remains predominant with a strong reduction in the intensity of the fiber $\langle 111 \rangle$ // DN after annealing. Also the hardness and mechanical strength and electrical resistivity decrease after holding for 30 minutes annealing at 260°C.

Mots clés : copper wires, mechanical strength, electrical resistivity.

26-27/10/2024

L'INFLUENCE DU CHAMP ÉLECTRIQUE SUR LES PROPRIÉTÉS MÉCANIQUES ET ÉLECTRONIQUES DES NANOTUBES

BAIRA FAYÇAL (1*), ZIDANI SARA (2), BAIRA KAOUTHER (1), BENKRIMA YAMINA (3).

1-Department of Sciences and technology, Faculty of technology, University of Batna 2, Alleys 53, Constantine Avenue. Fésdis, Batna 05078, Algeria

2-Department of Food Technology, Laboratory of Food Science (LSA), Institute of Veterinary and Agricultural Sciences, University of Batna 1 Had) Lakhdar, Alleys May 19 Biskra Avenue, Batna, 05000, Algeria

Email : F.baira@univ-batna2.dz

Résumé :

L'effet d'un champ électrique sur les nanotubes d'oxyde de zinc montre que l'énergie de déformation des nanotubes de ZnO augmente avec l'augmentation du diamètre, de plus, ses bandes d'énergie sont des bandes d'énergie semi-conductrices qui ont une meilleure valeur par rapport à celles enregistrées sur l'état de masse d'oxyde de zinc en utilisant la théorie des fonctions de densité (DFT) et en utilisant l'approximation généralisée du gradient (GGA), la diminution de la valeur de sa bande d'énergie est liée à l'augmentation de son diamètre. Lorsqu'un champ électrique est appliqué au nanotube de ZnO, il se déforme et sa déformation augmente avec l'augmentation de la valeur du champ électrique, et le pourcentage de distorsion augmente également avec l'augmentation du diamètre du nanotube de ZnO, l'augmentation du champ électrique qui leur est appliqué réduit la valeur de son écart d'énergie.

Mots clés : Étude Ab-initio, nanotube de ZnO, Champ électrique, Énergie de déformation, Structure de bande.

THEORETICAL ASPECT OF NOVEL HETEROCYCLIC COMPOUNDS: A DFT STUDY

BAIRA KAOUTHER, BAIRA FAYÇAL

Department of Sciences and technology, Faculty of technology, University of Batna 2, Alleys 53,
Constantine Avenue. Fésdis, Batna 05078, Algeria (Algérie)

Email : baira_kaouthar@yahoo.fr

Résumé :

The objective of this study is to perform a quantum calculation based on Density Functional Theory (DFT). The B3LYP method and the 6-311 G (d, p) base has been used to study the reactivity of the novel heterocyclic compounds azo dye (S1), ester (S2), and hydrazide (S3). The energies needed for the three thermodynamic mechanisms: HAT, SET-PT and SPLET, have been calculated, to determine the most probable hydrogen atom transfer mechanism. DFT calculations have shown that the ester (S2) form is more stable than the azo dye (S1) and hydrazide (S3).

Mots clés : novel heterocyclic compounds, biological activity, DFT.

MALEIC ANHYDRIDE GRAFTED STYRENE-ETHYLENE BUTADIENE-STYRENE (SEBS-G-MAH) COMPATIBILIZED POLY(LACTIC ACID)/RECYCLED HIGH IMPACT POLYSTYRENE (PLA/rHIPS) BLENDS CHARACTERIZED BY MORPHOLOGICAL, THERMAL, AND MECHANICAL MEASUREMENTS

BAOUZ TOUFFIK, DJERRAD NOUR EL HOUDA

1 - University of Bejaia, Faculty of Technology, Department of Process Engineering, Laboratory of Organic Materials (LMO) Bejaia, Algeria

Email : touffik.baouz@univ-bejaia.dz

Résumé :

In this work, we investigated blends of poly(lactic acid) (PLA) and recycled high impact polystyrene (rHIPS) from waste electric and electronic equipment (WEEE). The PLA/rHIPS (80/20 w/w) blends compatibilized with various maleic anhydride grafted styrene-ethylene butadiene-styrene (SEBS-g-MAH) ratios (2.5-10 wt. %) were prepared in the melt state and then characterized for their morphology and their mechanical and thermal properties. PLA/rHIPS exhibited a coarse morphology characteristic of an immiscible two-phase polymer blend. The significant drop in the dispersed rHIPS phase size domains in the PLA matrix and the intensely increased interfacial adhesion between the PLA and rHIPS phases attested for the positive compatibilizing effect of the SEBS-g-MAH for the PLA/rHIPS blends. This refined morphology was responsible for improved PLA toughness exhibited by increased elongation at break. However, this was at the expense of stiffness and strength, which both decreased due to the rubbery nature of rHIPS and SEBS-g-MAH. The thermal stability of the PLA/rHIPS blends studied by thermogravimetric analysis (TGA) revealed a two-step degradation profile. PLA thermal stability improved in the presence of rHIPS, and further enhancement was recorded after compatibilizing PLA/rHIPS with SEBS-g-MAH.

Mots clés : poly(lactic acid), recycled high impact polystyrene, blends, waste electric electronic equipment (WEEE), toughness

ÉTUDE DES PROPRIÉTÉS DES FILS EN ALLIAGE D'ALUMINIUM (AGS) TRÉFILÉ INDUSTRIELLEMENT

BAYARASSOU M. (1), M. ZIDANI (1.2), F. BAIRA (2)

1- Laboratory of Energy and Materials Engineering (LGEM), University of Biskra, Biskra 07000, Algeria.

2- University of Batna 2, Faculty of Technology, BP 53, 05078 Fésdis, U. Batna 2- Algeria

Email : **Bmokhtar0005@gmail.com**

Résumé :

Le but de ce travail est d'étudier l'évolution de la microstructure et des propriétés mécaniques des fils tréfilés en alliage d'aluminium (AGS), lors de traitements de vieillissement naturel et artificiel, l'influence combinée du taux de déformation plastique et de la température de vieillissement. La réduction de la section des fils montre une modification de la microstructure et de la texture, la présence de précipités β (Mg_2Si) qui augmente la dureté du fil d'aluminium avec le niveau de déformation par tréfilage à froid. Pour cela nous avons utilisé plusieurs techniques expérimentales de mesure et de caractérisation qui nous ont permis de réaliser ce travail. Il s'agit de : Microscopie optique (OM), microscopie électronique à balayage (MEB), diffraction des rayons X, microdureté Vickers et analyse chimique (EDAX), Notre étude a été réalisée sur une série d'alliage d'aluminium 6101 (Al-Mg-Si) du fournisseur MIDAL (BAHREÏN) sous forme de fil de 9,5 mm de diamètre, sont utilisés par la société ENICAB dans la fabrication des câbles de transmission d'énergie électrique.

Mots clés : Précipitation, Mg_2Si , tréfilage à froid, traitement de vieillissement, aluminium (AGS).

26-27/10/2024

ETUDE DE L'EFFET DES MÉTAUX DE TRANSITION SUR L'ACTIVITÉ ANTIOXYDANTE DE QUELQUES MOLÉCULES COUMARINIQUE EN SOLUTION.

BAYMOUT MASSINISSA (1), RABAHI AMAL (1), BECHOHRA LOUIZA (2), TOUAHRA FOUZIA (3), GUERFI AYA-INSAF (3), LECHANI NAWEL (1) (4), AKCHA SELMA (5)

- 1 - Laboratoire de Chimie Organique Appliquée (Groupe Hétérocycle), Faculté de Chimie, Université des Sciences et Technologies Houari Boumediène, BP 32, El-Alia, Bab-Ezzouar 16111 Alger (Algérie),
2 - Laboratoire de Biologie Cellulaire et Moléculaire, Faculté des Sciences Biologiques, Université des Sciences et Technologies Houari Boumediène, BP 32, El-Alia, Bab-Ezzouar 16111 Alger, Algérie (Algérie),
3 - Centre de Chimie et Physique Analytique (CRAPC), BP 248, Alger 16004, Algérie (Algérie),
4 - Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université Saad Dahleb de Blida, Algérie. (Algérie),
5 - Laboratoire d'Hydrométallurgie et Chimie Inorganique Moléculaire, Faculté de chimie, Université des Sciences et Technologies Houari Boumediène, BP 32, 16025, El-Alia, Bab Ezzouar, Alger, Algérie. (Algérie)

Email : **baymout.massinissa@gmail.com**

Résumé :

Les molécules coumariniques jouent un rôle essentiel dans le domaine de la chimie thérapeutique par leurs activités biologiques importantes. Notre travail consiste à la synthèse de quelques molécules iminocoumariniques sous agitation à froid. La structure de tous les composés synthétisés a été confirmée à l'aide de diverses techniques d'analyse, notamment la spectrométrie de masse, la RMN (^1H , ^{13}C), l'IR et l'UV-Visible. Nous avons ensuite examiné l'activité antioxydante des solutions métal-molécule (M-L). Pour certains composés, une augmentation significative de l'indice d'inhibition en présence du cuivre et de zinc a été observée, dépassant même celle du composé de référence. Étant donné que ces métaux sont connus pour leur capacité antioxydante en tant qu'oligoéléments, cette observation est particulièrement significative. Ces investigations pourraient ouvrir la voie à une nouvelle génération de complexes utilisables comme agents antioxydants.

Mots clés : Iminocoumarins, Metal, Solvatochromic, Charge transfer, Complex II in solution.

EVALUATION OF THE BIOLOGICAL ACTIVITY OF PULEGONE AND ITS IMINODERIVATIVE USING MOLECULAR DOCKING

BELAZGHEM NOUR-ELHOUDA (1), SEKKOUM KHALED (1), BOUANINI MERIEM (1), BELBOUKHARI NASSER (1)

1 - Bioactive Molecules and Chiral Separation Laboratory, Faculty Exact Sciences, University Tahri Mohamed, Bechar, 08000, Algeria. (Algérie)

Email : belazghem.nourelhouda@univ-bechar.dz

Résumé :

Molecular docking research has captured the interest of scientists in the present decade. It is used to examine the affinities of any natural or artificial molecules in connection to a certain biological target .The spread and development of diseases, and the resistance of pathogens to treatments, obliged researchers in the healthcare and pharmaceutical fields to use molecular docking . In this study, we aim to explain each studied compound's biological activity and determine the interaction between the ligand molecules and the amino acids. The molecular modeling research was carried out using MOE (Molecular Operating Environment) which is drug platform that includes different operations among them, visualization modeling and simulation . In our case, we have used Protein Data Bank (PDB) to choose the appropriate protein . The molecules named Pulegone and iminopulegone of the aromatic amines as follow (3-chloroaniline, 4-chloroaniline,p-Anizidine, m-Anizidine) were sketched in ChemDraw and were applied for the docking procedure. The PDB file was (7C7N) and the selected protein was planned for docking. The inhibitor activity for (7C7N) was investigated using the MOE molecular modeling environment against pulegone and its derivatives. The results were displayed on the graphical interface and saved in MOE, then its analysis was based on the interaction ligand between the ligand molecules and the amino acids. The five greatest poses were ordered according to their binding free energy and RMSD. We have saved that the RMSD value of pulegone was about 0.8272 and its binding free energie was -5.3754 Kcal.mol .Finally, the energy scores of the molecular docking research were in good agreement with the empirical findings for all derivatives of pulegone.

Mots clés : pulegone, MOE, 7C7N, Molecular docking, PDB

STUDY OF THE INHIBITORY EFFECTIVENESS OF POLYAMIDE 11/POLYANILINE ON THE CORROSION OF CARBON STEEL IN 1.5M HCL MEDIUM

BELGHERBI OUAFIA (1, 2*), SEID LAMRIA (2), SOBHI NOUR ELHOUDA (2), LAMIRI LEILA (1), BOUDOUR SAMAH (1), MESSAOUDI MERIEM (1), LAGHRIB SOUAD (3), BOUSSAHA BOUCHOUL (1), CHOUDER DALILA (2)

1Research Center in Industrial Technologies CRTI, P.O.Box 64, 16014 Cheraga, Algiers, Algeria

2Laboratoire d'Energétique et d'Electrochimie du solide. Département de Génie des procédés.
Faculté de Technologie. Université Ferhat Abbas, 19000 Sétif, Algeria

3Laboratory of Elaboration of New Materials and Characterizations, Ferhat Abbas University,
Setif, Algeria

Email : o.belgherbi@crti.dz/ belgherbiwafia@gmail.com

Résumé :

Corrosion is a critical process that plays an essential role in safety and economy, especially for alloys and metals [1]. Because of its exceptional mechanical-chemical qualities, carbon steel is widely employed in a wide range of engineering and manufacturing applications, including design and construction. However, carbon steel's vulnerability to corrosion is one of the main drawbacks [2]. Metals are commonly exposed to bases or acids in industrial settings [3].

This study investigates the inhibition of carbon steel corrosion by composite material PA11/PAni with 10wt.% aniline in aggressive HCl 1.5M environments using electrochemical impedance spectroscopy and potentiodynamic polarization measurements. The results show that the corrosion inhibition efficiency of carbon steel in HCl 1.5M solution improves significantly with the composite, achieving an optimal efficiency of 88.71% with the PA11/PAni 10Wt.% composite. The inhibitors primarily function cathodically, with materials forming a protective layer on the carbon steel surface; this result are confirmed by optical microscopy.

Mots clés : corrosion; carbon steel; HCl 1.5M; inhibitor; composite materials; polyaniline; polyamide 11.

IN SILICO THERAPEUTIC INVESTIGATION OF THE SULFADIAZINE INHIBITOR BASED ON THE STRUCTURE OF THE ENZYMES POLYKETIDE SYNTHASE PKS13 AND DIHYDROFOLATE REDUCTASE (DHFR)

BELGHIT MOHAMED YAZID (1), MALIKA BERREDJEM (2)

- 1- Department of Process Engineering and Petrochemicals, Faculty of Technology, University of Echahid Hamma Lakhdar, P.O.Box: 789, El-Oued 39000, Algeria.
- 2- Laboratory of Applied Organic Chemistry, Synthesis of Biomolecules and Molecular Modelling Group, Department of Chemistry, Badji-Mokhtar-Annaba University, Box 12, 23000 Annaba, Algeria.

Email : **Belghit.yazid07@gmail.com**

Résumé :

In order to develop new therapies, numerous researches target certain enzymes with anticancer, antibacterial and antimicrobial agents. This study focused on drug design based on the enzyme structures of dihydrofolate reductase (DHFR) and polyketide synthase 13-thioesterase (Pks13-TE), furthermore providing in silico inhibition of targets through the process of molecular docking. Initially, the sulfadiazine compound was selected from the family of a sulfa antibiotic, in comparison with the anti-tuberculosis drugs coumestan and anti-infectious trimethoprim, from the diaminopyrimidine family. The results showed that sulfadiazine presented an interesting interaction with the enzyme dihydrofolate reductase (DHFR) to form hydrogen bonds between residues Asn17 and Glu28 a very powerful hydrophobic interaction region with residues Met6, Met51, Ala8, Phe32 and Pro19. On the other hand sulfadiazine indicated significant effectiveness as an inhibitor of the enzyme polyketide synthase 13-thioesterase (Pks13-TE) of the stem strain of Mycobacterium tuberculosis. We suggest that the sulfadiazine inhibitor has recommended for broad therapeutic action against several infectious diseases.

Sulfadiazine

Mots clés : Molecular docking, Dihydrofolate reductase, polyketide synthase, infectious diseases, and sulfadiazine

26-27/10/2024

INVESTIGATION ON STRUCTURAL PROPERTIES OF LaFeO_3 PEROVSKITES PREPARED VIA SOL-GEL METHOD WITH VARIOUS COMPLEXING AGENTS

BELGUENOUNE AHMED (1), OULDHAMADOUCHE NADIR (1), BASSAID SALAH (1), DEHBI ABDELKADER (1), CHAKOUR NAZIHA (1)

1 - Engineering Physics Laboratory, University of Tiaret (Algérie)

Email : ahmed.belguenoune@univ-tiaret.dz

Résumé :

In this experimental study, Three perovskite LaFeO_3 nanoparticle samples were synthesized using the sol-gel method, employing citric acid, oxalic acid, and succinic acid as complexing agents under the same conditions. Two essential characterization techniques, X-ray diffraction (XRD) and Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), were employed to investigate the impact of complexing agents on the structural properties of this perovskite. X-ray diffraction (XRD) patterns showed that all samples matched the standard orthorhombic phase of LaFeO_3 (JCPDS No. 01-074-2203). Differences in lattice parameters, crystal size, and lattice strain were observed between the samples, with those prepared using oxalic acid differing significantly from those prepared with citric and succinic acids. Those differences are attributed to oxalic acid promoting the formation of Fe^{2+} instead of Fe^{3+} , leading to the Jahn-Teller distortion of FeO_6 and increasing cell and volume parameters. Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy confirmed the formation of LaFeO_3 perovskite, indicated by distinct peaks at 430 cm^{-1} and 568 cm^{-1} , corresponding to O-Fe-O deformation vibration and Fe-O stretching vibration, respectively. The sample prepared with succinic acid also showed peaks attributed to surface hydroxyl groups on the LaFeO_3 crystal surface.

Mots clés : Perovskite, XRD, FTIR, Complexing agent, Sol gel

PREPARATION OF NEW DENDRIMER-COPPER IN CLASSICAL AND ULTRASONIC METHOD

BELKIOUR SAADIA (1), SEBBA FATIMA ZOHRA, ZAOUI FAROUK

1 - laboratoire chimie physique- université Ahmed Ben Bella Oran1 (Algérie)

Email : **belkiour_saadia96@hotmail.com**

Résumé :

A new dendrimer based on citric acid and sebacoyl chloride was synthesized by Steglich esterification. The obtained dendrimer was used as a matrix for the dispersion of copper nanoparticles using classical and ultrasound methods. All materials were characterized by FTIR, ¹H NMR, thermogravimetric analysis, X-ray photoelectron spectrometry, scanning electron microscopy, and energy-dispersive X-ray spectroscopy. The obtained nanocomposites were tested against two Gram-positive pathogenic bacteria (*Bacillus cereus* and *Staphylococcus aureus*), two Gram negative (*Escherichia coli* and *Pseudomonas aeruginosa*), the organic dye methylene blue, and in the 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl radical scavenging assay. A comparative study between both methods in structural, morphological, and thermal properties as well as in the antimicrobial, antioxidant, and catalytic reduction activities was provided. All nanocomposites showed an excellent activity for all applications. The comparison between both synthesis methods shows the superiority of the sonication methods, especially via the catalytic reduction and the antioxidant activities, the classic method allows better thermal stability and a higher metal content with some cationic oxidation state in the obtained nanocomposites, but ultrasound allows a better dispersion with a fully reduced metal.

Mots clés : antimicrobials and antioxidant properties, citric acid dendrimers, copper nanoparticles, organic dyes, photo reductio

STUDY OF FENTON PROCESS USING MODIFIED DOLOMITE FOR METHYL ORANGE DYE DEGRADATION

BELLAOUAR ASMA (1), BOUKHEMKHEM ALI (1), BELLAOUAR NACIRA (2)

1 - Laboratory Interactions Materials-Environment (LIME), University of Jijel, 18000 Jijel, Algeria (Algérie),

2 - Biogeochemistry Laboratory of Desertic Environment, KasdiMerbah Ouargla University, Ouargla 30000, Algeria. (Algérie)

Email : asmabellaouar47@gmail.com

Résumé :

The study investigates the degradation of methyl orange dye utilizing iron-modified dolomite, by a simple procedure involving iron impregnation followed by calcination at 500 °C for 4 hours. A comprehensive analysis was conducted on both the unmodified and modified dolomite samples. XRD analysis confirmed the preservation of the dolomite structure. While, The chemical composition obtained by EDX showed a successful insertion of iron ions into the dolomite structure reaching 5.3 wt% of this metal. Furthermore, examination of the reaction parameters highlighted the significant impact of temperature and catalyst dosage on decolorization efficiency. Thermodynamic analysis revealed the endothermic nature of the reaction, with a positive enthalpy value ($\Delta H^\circ = 65.48 \text{ kJ/mol}$), along with a reduction in disorder as denoted by a negative entropy ($\Delta S^\circ = -0.055 \text{ kJ/mol}\cdot\text{K}$). The activation energy value ($E_a = 63.98 \text{ kJ/mol}$) showed that the process was controlled by a surface reaction. Additionally, the catalyst demonstrated notable stability and excellent performance even after six consecutive cycles, suggesting its potential for reuse.

Mots clés : Dolomite, Iron impregnation, Methyl orange, Fenton process

26-27/10/2024

PIEZOELECTRIC CHARACTERIZATION OF A NEW CERAMIC MATERIAL

BEN AMOR LOUBNA (1), BENMENINE ABDELKADER (2), OUM KELTOUM KRIBAA (3), AHMED BOUTARFAIA (3)

1 Department of Sciences and technology, University of Batna 2, (05000), Algérie

2 Department of Sciences and technology, University of Ouargla, BP.511, RP-Ouargla, (30000), Algérie

3 Laboratoire of Chemistry Applied, University of Biskra, BP.145, RP-Biskra (07000), Algérie

Email : l.benamor@univ-batna2.dz

Résumé :

Piezoelectric ceramics $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ generally known as PZT are used in a large number of applications such as , transducers, computer memory and display, and pyroelectric sensors [1, 2]. The breadth of these fields of application is due to their very interesting dielectric properties around the morphotropic phase boundary (MPB), which separates the Ti-rich tetragonal phase from the Zr-rich rhombohedral phase [3].

$0.05 \text{ Pb}[\text{Fe}_{1/2} \text{ Nb}_{1/2}]\text{O}_3$ - $0.05 \text{ Pb}[\text{Ni}_{1/3} \text{ Nb}_{2/3}]\text{O}_3$ - $0.90 \text{ Pb}[\text{Zr}_x\text{Ti}_{(1-x)}]\text{O}_3$ [PFN-PNN-PZT] quaternary piezoelectric ceramics with varying Zr/Ti ratios located near the morphotropic phase boundary (MPB) were prepared by a synthesis method in strong way.

The effect of Zr/Ti ratio and sintering temperature on the dielectric properties of our samples were investigated. The new MPB in this quaternary system with optimum piezoelectric properties was found at $x = 0.51$ - 0.53 . The dependence of the dielectric constant (ϵ) and the loss tangent on the Zr/Ti ratio shows a pronounced maximum of ϵ at Zr/Ti : 51/49 and a minimum $\tan \delta$.

Mots clés : PZT, the morphotropic border of phase (FMP), piezoelectric Properties, dielectric Properties, sintering temperature

COUAMRIN-PYRAZOL AS POTENTIAL ANTI ALZEIMER AGENT

BENAZZOUZ-TOUAMI AMINA (1,*), SOUHILA TERRACHET-BOUAZIZ (2,3), MALIKA MAKHLOUFI-CHEBLI (1), KARIMA IGHIL-AHRIZ(1)

1 Département de Chimie, Faculté des Sciences, Laboratoire de Physique et Chimie des Matériaux LPCM, Université Mouloud Mammeri, Tizi Ouzou 150 00, Algeria

2 Department of Chemistry, Faculty of Sciences, University Mohamed Bouguerra, Boumerdes, Algeria

3 Laboratoire de Physico-Chimie Théorique et de Chimie Informatique, Faculté de Chimie, USTHB, BP 32 El Alia, Bab-Ezzouar, Alger 16111, Algeria

Email : amina.benazzouz@ummt.dz

Résumé :

Alzheimer's disease (AD) is a neurodegenerative disorder marked by progressive, irreversible cognitive decline, including memory loss and other mental deficiencies. It is characterized by the degeneration of neurofibrillary tangles. Several hypotheses have been suggested for the pathogenesis of AD, including the cholinergic hypothesis, the amyloid cascade hypothesis, the oxidative stress hypothesis, and the tau protein hypothesis. Pyrazoles, with their pyrazolic substructure, are highly regarded in pharmaceutical compound design due to their wide range of beneficial properties and their broad spectrum of activity. They exhibit a plethora of biological activities, including antioxidant, anticonvulsant, antimicrobial, anti-inflammatory, antidiabetic, analgesic, anti-HIV, antitumor, and antidepressant properties. This structure is integral to many commercially available drugs. Coumarins, another significant category of heterocyclic compounds, are present in many drugs and show biological activity. Derivatives of coumarin display diverse pharmacological activities, such as antibacterial, anticancer, anticoagulant, anti-inflammatory, and anti-HIV effects. In light of the pharmacological potential of both coumarins and pyrazoles against AD, we've embarked on developing hybrid derivatives coumarin-pyrazole scaffold 3a-f. Selected compounds were evaluated for their anticholinesterase activity. In vitro studies showed that compounds 3e and 3f were the most effective showing high potential AChE inhibitory activities with respective IC₅₀ values of 4.41±0.53 and 5.04±0.96 µg/ml. Compounds 3a and 3b were found to be the best butyrylcholinesterase inhibitor with an IC₅₀ value comparable to that of the standard drugs. Molecular docking analysis was performed to better understand the enzyme-binding mode making the design of better ChE inhibitors possible.

Mots clés : Alzheimer's disease, Cholinesterase inhibitor, Coumarin, Pyrazole, Docking study

EFFECTS OF BARIUM DOPING ON THE STRUCTURAL, MORPHOLOGICAL OF BIT AURIVILLIUS

BENBRIKA CHAIMA (1), MENASRA HAYET (2), SMAILI LAKHDAR (2), SBALHI AMIRA (3)

1 - Applied Chemistry Laboratory (LCA) (University of Biskra. Algérie),

2 - Applied Chemistry laboratory (LCA) (Algérie),

3 - Laboratory of Semiconductor and Metallic Materials (Algérie)

Email : chaima.benbrika@univ-biskra.dz

Résumé :

The three-layer Aurivillius phase family $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ or (BIT) is considered an important photocatalyst and the doping modification of this family has attracted great attention to improve its performance in wastewater treatment. The aim of this work was to study the Effect of Barium doping on the Structural, Morphological of BIT Aurivillius nanoparticles using the low temperature molten-salt method as synthesis process. The prepared samples were characterized using powder X-ray diffraction XRD, Fourier transform infrared spectroscopy FTIR, Scanning electron microscopy analysis SEM, The X-ray diffraction (XRD) results revealed that the (BIT- Ba) ceramics have a pure orthorhombic of three-layer Aurivillius type structure, with the space group Aba_2 . Compared to pure BIT, the substitution of (Bi^{3+}) for (Ba^{2+}) leads to an increase in the unit cell volume and average cation-anion distance in the octahedral sub-lattice. SEM/ EDX results confirms that the samples have a relatively dense pure, with micro-grains agglomerated plate-like, structure typical. Infrared characterization, FTIR, results confirms the existence of the Aurivillius structure in the prepared compound. There is a distinct band in the wave number range between 400 and 700 cm^{-1} .

Mots clés : BIT Aurivillius, Ba doping, orthorhombic, SEM/ EDX analysis, X, ray

ÉTUDES ÉLECTROCHIMIQUES ET DFT DE BASE DE SCHIFF EN TANT QU'INHIBITEUR DE CORROSION

BENCHINOUE MANEL (1), HAMANI HANANE , DOUADI TAHAR

1 - Benchinoune Manel, HAMANI Hanane ,DOUADI Tahar (Algérie)

Email : benchinounemanel883@gmail.com

Résumé :

La corrosion est une dégradation chimique d'un matériau et l'altération de ses propriétés Physiques (notamment mécaniques) sous l'influence du milieu environnant. Les inhibiteurs de corrosion sont des composés chimiques que l'on ajoute, en faible quantité, au milieu pour diminuer la vitesse de corrosion des matériaux. [1] Les bases de Schiff sont considérées comme des agents très efficaces pour protéger les métaux contre la corrosion en milieu acide, grâce à la présence du groupe imine ($-C=N$) groupe imine ($-C=N$) et/ou d'hétéroatomes polaires tels que l'oxygène (O), l'azote (N) et le soufre (S) présents dans leur structure, ce qui leur permet de s'adsorber ou de former une barrière protectrice sur les métaux. . Cette étude de l'effet inhibiteur de ces composés sur la corrosion de l'acier utilise la méthode gravimétrique. La méthode de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)est une méthode courante et valide pour étudier les propriétés électroniques des composés organiques et leur capacité à inhiber les réactions chimiques. propriétés électroniques des composés organiques et leur capacité à inhiber la corrosion de divers métaux. References: [1] J. Benard, A. Michel, J. Philibert, J. Talbot, Métallurgie générale, Masson Editeurs (1969)

Mots clés : DFT, corrosion, acier

CONTRIBUTING TO A PHYSICOCHEMICAL STUDY OF TWO SAMPLES OF ROCKS FROM KHANGAT SIDI NAJI IN BISKRA

BENESSEDDIK RABIAA (1), ACHOURI ABDERRAHIM (1), ZEDDOURI AZIEZ (2), TOUIL MERIEM (1)

1 - Laboratoire de Développement des Energies Renouvelables dans les Zones Arides et Sahariennes, Département de Physique, Université de Ouargla, 30000 Ouargla, Algeria (Algérie),

2 - Laboratory of underground reservoirs of oil, gas and aquifer, university of Kasdi Merbah, Ouargla, Adresse: Ghardaïa road, PO: 511 Ouargla 30000; Algeria (Algérie)

Email : rabi3abenesseddik@gmail.com

Résumé :

This study examines two rock samples from Khangat Sidi Nadji in Biskra, employing a range of techniques including X-ray fluorescence, Fourier transform infrared spectroscopy, X-ray diffraction, and thin-slice technology. These methods were utilized to identify the crystal phase, crystal system, space group, and unit cell for the different compositions present in the two samples. The fluorescence analysis clearly indicated that sample R01 comprises 98% quartz, while sample R02 possesses a notably higher proportion of calcite. This distinction was further supported by the Fourier transform infrared technique, revealing the prevalence of quartz in the most absorbent areas of the first sample and a contrasting presence of calcite in the second sample. These findings aligned seamlessly with the X-ray diffraction results processed through the X'pert Highscore program. Sample R01 exhibited a high concentration of quartz with a hexagonal crystal structure under space group P3221, whereas sample R02 predominantly showcased calcite with a rhombohedral crystal structure under space group R-3c. Subsequently, to validate these outcomes comprehensively, the thin blades technique was applied to the rocks. The confirmed results mirrored those obtained through earlier methodologies, solidifying the understanding that despite originating from the same region, these two samples possess distinct appearances and compositions.

Mots clés : XRF. FTIR. XRD. ROCKS. Quartz. Calcite

CHIMIE DES POLYMÈRES

BENGHANEM SAIDA,

1 - Laboratoire de modification, préparation, des matériaux polymériques multiphasiques Institut des sciences et techniques des matériaux Université Ferhat Abbas de Sétif-1 (Algérie)

Email : saida.benghanem@univ-setif.dz

Résumé :

Le présent travail se concentre sur l'étude de l'oxydation d'un polysaccharide de nature anionique, carboxyméthylcellulose (CMC) par le système TEMPO/NaOCl/KBr. Ce système montre une sélectivité envers les fonctions hydroxyles primaires par rapport aux fonctions secondaires puis il leur converti en carboxyles. Le dosage des groupement aldéhydes et carboxyles après oxydation de la CMC montre que les aldéhydes générés lors de ce type de réaction est toujours inférieur à celui des carboxyles. Ce qui veut dire que l'oxydation s'est poursuivie en transformant les carbonyles en carboxyles. Par ailleurs, les titrations par pH-métrie et conductimétrie indiquent clairement que les nombres des carboxyles après oxydation de CMC augment. Les résultats obtenus par spectroscopie infrarouge et UV-Vis dévoilent que la carboxyméthylcellulose s'est bien oxydée.

Mots clés : carboxyméthylcellulose, oxydation, dosage chimique, propriétés physico, chimiques

MULTICOMPONENT, EFFICIENT APPROACH FOR THE SYNTHESIS OF BIOLOGICALLY ACTIVE 4-AMINO-5-CYANO-PYRIMIDINE DERIVATIVES

BENOUNE RACHA AMIRA, KAMIRA AOUACHRIA, MOHAMED TAHAR BENANIBA

1 - 2 - Department of chemistry/faculty of exact science, University of frères Mentouri - Constantine 1, Algeria (Algérie),

3 - Department of chemistry / Faculty of Technologie, University of Batna 2, Algeria (Algérie)

Email :

Résumé :

pyrimidines is well known nitrogen containing heterocyclic component finding prominent applications in the field of medicinal and pesticide chemistry. Many of the pyrimidines derivatives have obtained considerable attention as main building blocks for drug discovery. Additionally, the synthesis of pyrimidine analogs has gained renewed interest due to their various biological properties such as anti-depressant, anti-inflammatory, antimicrobial anti-obesity, antihypertensive, anti-inflammatory agents, analgesics and anticancer. Their derivatives are also reported as strong DNA binders. Therefore, a substantial attention has been focused on the development of biologically important new pyrimidine-fused heterocycles.[1] Among the pyrazole derivatives, 4-amino-5-cyano-pyrimidine exhibit a broad spectrum of pharmaceutical and biological activities including anti-cancer, antimicrobial , antiviral , anti-inflammatory , anti-angiogenic and anti-allergic etc.[2] Multicomponent reactions (MCRs) are known as a powerful tool for the construction of novel and structurally complex molecules in a single pot ensuring high atom-economy, good overall yields and high selectivity, lower costs, shorter reaction times, minimizing waste, labor, energy, and avoidance of expensive purification processes. It has been established that MCRs are generally much more environmentally friendly, and offer rapid access to large compound libraries with diverse functionalities.[3] In this context, we herein report an efficient one-pot synthesis of a series of novel highly substituted, functionalized and biologically active 4-amino-5-cyano-pyrimidine.

Mots clés : Pyrimidine, 4-amino-5-cyano-pyrimidine, green synthesis, multicomponent reactions.

26-27/10/2024

**PRÉPARATION DES ÉLECTRODES À BASE DE CARBONE COMME DES CAPTEURS
CHIMIQUES
MINIATURISÉS POUR LA DÉTECTION DES POLLUANTS CHIMIQUES**

BENSANA AMIRA, ACHI FETHI

Department of Process engineering, faculty of applied sciences, university of Kasdi-Merbah
Ouargla-Algeria

Email : achi.fethi@univ-ouargla.dz

Résumé :

Les capteurs électrochimiques sont des outils analytiques convertissant une réaction chimique en un signal de courant de sortie et sont généralement composés d'un transducteur et un récepteur. Les capteurs électrochimiques doivent être stables, avec des sites catalytiques hautement actifs et un système rapide assurant la rapidité du mécanisme réaction-diffusion des différents espèces ioniques mis en jeu. Les nanomatériaux à base de carbone offrent la possibilité d'être rapidement imprimés sur diverses structures pour obtenir des électrodes flexibles, peu coûteuses, jetables et prêtes à l'emploi, permettant de contrôler les polluants chimiques maladies chroniques humaines. Dans ce travail, les techniques de préparation des électrodes à base de matériaux carbonés y compris le graphène réduit et les nanotubes de carbone sont décrites. Ce travail présente une approche rapide et efficace pour préparer un matériau electro-catalytique à base de graphène rGO pour minimiser l'encrassement de la surface sensible.

Mots clés : Carbone, capteur, graphène réduit, polluants chimiques, nanomatériaux.

STUDY OF THE INHIBITORY EFFICACY OF PLANT EXTRACTS FROM THE ASTERACEA FAMILY ON XC60 STEEL IN 1M HCL MEDIUM

BENYAMINA ADLENE(1), SIRID REMACHE(1), AYACHE BOULTIF(2)*, MERZOUG BENAHMED(3), ABDRAHMANE MEZRAG(4)

(1) Laboratory of Natural Resources and Management of Sensitive Environments (LRNAMS) Oum-EL-Bouaghi University, 04000, Algeria.

(2) Laboratory of Applied Chemistry and Materials Technology, Oum-EL-Bouaghi University, 04000, Algeria.

(3) Laboratory of Organic Materials and Heterochemistry, (LMOH), Tébessa University, 12002, Algeria.

(4) Research Unit Valorization of Natural Resources, Bioactive Molecules and Physicochemical and Biological Analyses (VARENBIOMOL), Department of Chemistry, Faculty of Exact Sciences, Constantine1 University. Algeria.

Email : **boultif.ayache@univ-ueb.dz**

Résumé :

Environmental protection is a challenge for scientists. With this in mind, our objective was to evaluate plant extracts of the Asteraceae family as corrosion inhibitors against 1M HCl acid solutions of API X60 carbon steel. In the first part of this study, three extracts were prepared using the solvents ethanol, chloroform, and hexane. These extracts were extracted and characterized by qualitative analysis (phytochemical controls) and infrared and UV spectroscopy. The second part of the study investigated the inhibitory effect of chloroform extracts on API X60 steel in hydrochloric acid medium. Results obtained from weight loss measurements indicate that the extract has good corrosion resistance with an efficiency of 75.4% at 20°C. Thermodynamic adsorption coefficients indicated the presence of spontaneous adsorption on the steel surface according to the Langmuir isotherm of the chloroform extract. These results indicate that chloroform extract can be used as a corrosion inhibitor.

Mots clés : Corrosion, inhibition, green inhibitor, steel API X60, Asteraceae

ACTIVITÉS BIOLOGIQUES D'OXAZOLIDINONES NÉOSYNTHÉTISÉS

BENZAID CHAHRAZED (1,2), DJENDI MANEL LINA (2)

1 - Université Badji Mokhtar (Algérie),

2 - laboratoire de microbiologie et biologie moléculaire (Algérie)

Email : cbenzaid@gmail.com

Résumé :

La résistance aux antibiotiques représente un problème majeur de santé publique, entraînant une augmentation de la morbidité, de la mortalité, et la prolifération de microorganismes résistants à tous les antibiotiques disponibles. L'utilisation excessive et inappropriée des antibiotiques constitue la principale cause de cette antibiorésistance. La recherche de nouvelles molécules s'avère donc nécessaire pour pallier à ce phénomène ayant des répercussions significatives sur la santé publique et l'économie. Cette étude vise à évaluer l'activité antimicrobienne, antioxydante et anti-inflammatoire de 05 nouvelles molécules appartenant à la famille des oxazolidinones, synthétisées au laboratoire de chimie organique appliquée de l'Université de Badji Mokhtar Annaba. Pour cette étude, des souches bactériennes et fongiques ont été prélevées au service des brûlés de l'hôpital Ibn Sina. L'activité antimicrobienne des molécules synthétisées a été d'abord évaluée qualitativement par la méthode des puits, puis quantitativement par la détermination des valeurs de Concentration Minimale Inhibitrice (CMI) à l'aide de tests en milieu liquide sur microplaque. Cette évaluation a été complétée par des tests d'activité antibiofilm. L'activité antioxydante a été mesurée par le test de piégeage du radical libre DPPH, tandis que l'activité anti-inflammatoire a été évaluée par le test de dénaturation du BSA (albumine sérum bovine). Les tests ont montré que les souches microbiennes présentaient une interaction variable de résistance et de sensibilité lors des évaluations de l'activité antimicrobienne et antibiofilm. De plus ces molécules ont démontré un potentiel antioxydant et anti-inflammatoire remarquable. Les nouvelles molécules testées, appartenant aux familles des sulfamides et des oxazolidinones, se révèlent être de puissants agents antimicrobiens, antioxydants et anti-inflammatoires. Leurs propriétés thérapeutiques en font une alternative intéressante pour contrer la résistance aux traitements disponibles et développer de nouveaux traitements.

Mots clés : Synthèse chimique, activité antimicrobienne, antibiofilm, antioxydante, anti, inflammatoire

26-27/10/2024

SYNTHESIS OF BIOACTIVE PROPARGYLAMINES DERIVATIVES VIA COPPER HETEROGENEOUS CATALYST

BERRICHI AMINA (1,2), BACHIR REDOUANE (3)

1 - Laboratoire de Catalyse et Synthèse en Chimie Organique (Algérie),

2 - Faculté des Sciences et de la Technologie, Université de Ain Témouchent (Algérie),

3 - Université de Tlemcen (Algérie)

Email : berrichi.amina@yahoo.fr

Résumé :

Propargylamines are key intermediates for the synthesis of several biological active compounds like selegilin, rasagiline, Deprenyl and some inhibitors of type B monoamine oxidase [1]. They are also used for synthetic building blocks, such as Allenyl-sulfonamide, quinoline and dihydropyridine. Different methods were used to their preparation. There is several methods to synthesize propargylamines, such as A3 coupling reaction, the AHA coupling of amine, haloalkane and alkyne, and the KA2 coupling where the haloalkane was replaced by ketone. The Amines, aldehydes and alkynes three-component coupling, is the best known way using homogeneous and heterogeneous catalysts to synthesize propargylamines and heterocyclic molecules [2]. In the preset study, we prepared propargylamines derivatives with yields of 100% using copper catalyst, where we study also, their biological activity and docking molecular toward the Alzheimer's disease

Mots clés : propargylamine, copper nanoparticles, A3 coupling

ORGANIC SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF SOME AZO COMPOUNDS

BOUANANI SANA (1), HASSIBA BOUGUERIA (2) (3), (4), BENAROUS NESRINE (4)

1 - Research Unit for Chemistry of the Environment and Molecular Structural. University of Constantine 1, Constantine 25000, Algeria. (Algérie),

2 - Centre Universitaire Abdelhafid. Boussouf, Mila, Algérie (Algérie),

3 - Université des frères Mentouri Constantine 1, Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale CHEMS, Faculté des Sciences exact, Département de Chimie, Constantine, Algérie. (Algérie),

4 - Research Unit for Chemistry of the Environment and Molecular Structural (Algérie)

Email : sana.bouanani@doc.umc.edu.dz

Résumé :

Azo compounds are one of the most frequently used compounds in organic chemistry, mainly because of their relatively simple preparation methods. They were therefore widely used, especially as dyes for textiles, printing inks, printing cosmetics and food additives. In addition to their use as dyes, they attracted much attention from chemists as their potential applications are important. In this work we will especially get interest in structures containing the -N=N- chromophore on which carried our synthesis, our analytic studies of resolution structure by X-ray diffraction and spectrometric characterization. By diazotation reaction of primary arylamines which is cooled by an ice-bath to lower the temperature of the reaction remains below 5 °C, follow-up by copulation on β -naphthol according the following diagram which permit to present a series of structures restraints for exploitation and Characterization. By complexation of these compounds with metals, azo metal chelates have also attracted increasing attention due to their interesting electronic and geometrical features in connection with their application for molecular memory storage, nonlinear optical elements and printing systems.

Mots clés : Azo dyes, Diazotation, Copulation, Chromophores, X, ray diffraction.

SCREENING PHYTOCHIMIQUE DES GRAINES DE CHIA

**BOUASLA NABILA (1,2*), ATHMANI SAMEH (2,3) ,ABDERRAHMANE SIHEM (2),
ABDERRAHIM KARIMA (2), HADEF RIHEM (1)**

1. Université Chadli Bendjedid - El Tarf ALGERIE-
2. Laboratoire d'Ingénierie de Surfaces (LIS)-Université Badji Mokhtar-Annaba ALGERIE-
Faculté des sciences.
3. Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyses Physico-chimiques. BP 384, zone
industrielle Bou-ismail. RP 42004. Tipaza, Algérie.

Email : **n.bouasla@univ-eltarf.dz**

Résumé :

Le chia, également connu sous le nom scientifique de *Salvia hispanica*, est une plante herbacée annuelle largement utilisée à travers le monde pour ses usages culinaires et médicinaux. Les graines de chia renferment des acides gras oméga-3 bénéfiques pour la santé, ainsi que des acides gras polyinsaturés, des fibres alimentaires, des protéines, des vitamines et divers minéraux essentiels. De plus, elles constituent une riche source de polyphénols et d'antioxydants, incluant des composés tels que l'acide caféique, l'acide rosmarinique, la myricétine, la quercétine, entre autres. Actuellement, le chia fait l'objet d'études approfondies dans divers domaines de recherche, notamment médical, pharmaceutique et alimentaire, menées à travers le monde. Cette étude une analyse qualitative, elle vise à identifier la composition chimique des graines de chia via un screening phytochimique afin de détecter la présence de divers composés. Les résultats ont confirmé la présence de stérols, flavonoïdes, tanins, anthocyanes, phénols et huiles volatiles.

Mots clés : graine de chia, phytochimie, *salvia hispanica*, plante médicinale

THE IMPACT OF CHIRAL ANGLE AND CHIRAL INDEX ON THERMAL BUCKLING CHARACTERISTICS OF SWBNNTs RESTING ON A PASTERNAK FOUNDATION USING NL-FSDT THEORY

BOUCHAREB MOHAMMED LAMINE (1), NOUADRI NIHAD (2)

1 - Laboratory of Modeling and Simulation Multi-Scale, Université Djillali Liabess de Sidi Bel Abbes (Algérie),

2 - Laboratoire des Composants Actifs et Matériaux (LCAM) Université d'Oum El Bouaghi (Algérie)

Email : laminebouchareb95@gmail.com

Résumé :

In this study, the effect of chiral index and chiral angle dependent from diameter on thermal buckling of single-walled boron nitride nanotube (SWBNNT) embedded in Pasternak Elastic Foundation is investigated. The model of nonlocal first-order shear deformation theory (NL-FSDT) is used to study the critical buckling temperature characteristics of SWBNNT. Assume that a chemical bond between the SWBNNTs and Pasternak foundation is formed, and the equilibrium equations are obtained and solved for BNNT integrated in the elastic Pasternak medium. The influences of small-scale parameter, chirality of SWBNNTs, vibrational mode number, aspect ratio (i.e. length-to-diameter ratio) of SWBNNTs, chiral index and chiral angle on the critical buckling temperature characteristics of SWBNNTs are examined and discussed. The results indicate significant dependence of critical buckling temperature on the nonlocal parameter, chiral angle, chiral index, aspect ratio and chirality of SWBNNTs. The results were validated by comparing the published results acquired by other researchers. From numerical results, it is concluded that the critical buckling temperature characteristics of SWBNNT have been influenced by the chiral angle and chiral index. The findings reported in this paper can help researchers and designers develop nanodevices that incorporate the thermal buckling properties of boron nitride nanotube.

Mots clés : critical buckling temperature, SWBNNT, NLFSDT theory, Pasternak Foundation, chiral index, chiral angle.

MANGANESE (II) COMPLEX WITH SULFA DRUG LIGAND. SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, ANTIMICROBIAL ACTIVITY, GENOTOXICITY, AND MOLECULAR DOCKING

BOUCHOUCHA AFAF (1), BBOUROUAI MOHAMED AMINE, ZAOUANI MOHAMED (2)

- 1 - Laboratory of Hydrometallurgy and Molecular Inorganic Chemistry Laboratory, Faculty of Chemistry, University of Science and Technology Houari Boumediene (Algérie),
2 - Ecole Nationale Supérieure Vétérinaire d'Alger (Algérie)

Email : m.amine.bourouai@gmail.com

Résumé :

The synthesis, characterization and comparative biological study of manganese (II) complex with a heterocyclic ligand used in pharmaceutical field (Scheme 1), was reported. The complex has been prepared and characterized by elemental analysis, FAB mass, ESR magnetic measurements, FTIR, UV-Visible spectra and conductivity. The antimicrobial activity of ligand and complex against the species *Escherichia coli*, *P. aeruginosa*, *Klebsiella pneumoniae*, *S. aureus*, *Bacillus subtilis*, *Candida albicans*, *Candida tropicalis*, *Saccharomyces*, *Aspergillus fumigatus* and *Aspergillus terreus* has been carried out and compared using agar-diffusion method. An in vivo micronucleus test in bone marrow cells using NMRI male mice was used to examine genotoxic effect of the sulfamethoxazole manganese complex. Animals were treated with the manganese complex, suspended in distilled water, by gavage once daily during two days at a dose of 375, 750 and 1500 mg/kg. The results of the micronucleus test showed no increase in the frequency of MNPCs compared to negative control. In addition, an increase of the PCE/NCE ratio was observed, this means that the compound tested, does not have a clastogenic or aneugenic effect. In silico studies including ADMET simulation and molecular docking were used to investigate the biological efficiency of the synthesized ligand.

Mots clés : Sulfonamide ligand, complex, Characterization, Antimicrobial activity, in vivo micronucleus assay

SYNTHÈSE DE ZNFe-HDL ET SON PRODUIT CALCINE POUR ÉVALUER SES PROPRIÉTÉS CINÉTIQUES POUR L'ADSORPTION DE ROUGE CONGO.

BOUCIF FATIMA (1), MAHREZ NOURIA , BESSAHA FATIHA , BESSAHA GANIA , KHELIFA AMINE

1 - Laboratoire de Structure, Elaboration et Applications des Matériaux Moléculaires (S.E.A.2M.)
Université de Mostaganem (Algérie)

Email : **boucif78@yahoo.fr**

Résumé :

La pollution des eaux et des sols par certains produits chimiques d'origine industrielle ou agricole constitue une source de dégradation de l'environnement. Actuellement, la pollution suscite un intérêt particulier à l'échelle internationale. La dépollution des eaux contaminées par les colorants et s'avère nécessaire pour la protection de l'environnement. A cette fin, beaucoup de techniques de traitement ont été développées, mais malheureusement, ces technologies sont coûteuses. Il faut noter qu'il existe une méthode simple pour le traitement des eaux de rejet industriel et qui est l'adsorption. Cette technique est très attrayante pour sa simplicité et son faible coût. L'adsorbant le plus utilisé est le charbon actif, car il possède des propriétés d'adsorption et de sélectivité exceptionnelles. Ce type d'adsorbant étant onéreux a poussé les scientifiques à développer de nouveaux matériaux. Les argiles anioniques pourraient être des adsorbants à la fois économiques et moins polluants. Nous nous sommes intéressés à la synthèse d'hydroxydes doubles lamellaires à base de Zn et Fe par la méthode de coprécipitation à pH constant. Le matériau obtenu a été calciné à 500°C pendant 3 heures pour l'appliquer à l'élimination d'un colorant rouge congo en solution aqueuse. Cette étude est favorisée à un pH= 8 et le temps d'équilibre a été estimé à 2 heures avec une concentration initiale de 300 mg/L de rouge congo et selon un rapport solide sur solution égale à 1 g/L. Le modèle de pseudo second ordre est le plus adéquat pour décrire la cinétique d'adsorption de rouge congo.

Mots clés : Pollution, adsorption, colorant, Hydroxydes doubles lamellaire.

26-27/10/2024

MORPHOLOGICAL STUDY OF MODIFIED POLYANILINE POWDERS USING IMAGE OPTIMISATION VIA MATLAB

BOUDOUR SAMAH (1,2), OUFIA BELGHERBI (1) , MERIEM MESSAOUDI (1) , LEILA LAMIRI (1) ,
HAMZA KHEMLICHE (1)

1 - Center in Industrial Technologies CRTI (Algérie),

2 - Research Center in Industrial Technologies CRTI, B. O. Box 64, Cheraga, 16014, Algiers,
Algeria (Algérie)

Email : boudoursamah@gmail.com

Résumé :

In the present study, electrodeposited polyaniline powders were observed via scanning electron microscope (SEM) to study their extent morphologies change, and hence to optimize their characteristics for suitable applications. On other hand, image analysis has been offered advanced tools, such as filtering, thresholding, segmentation and others for extracting and optimizing accurate information and characteristics of targeted surfaces and powders. Very recently, we reported on the electrodeposited modified polyaniline powders. In this respect, SEM images obtained from this latter electrodeposited-work were used for extracting the average size, number, and distribution of particles over the surfaces of polyaniline powders using image analysis via matlab code. From the results and discussion, it is found that these information may lay a fondution for wide-spread use of processed modified polyaniline particles in many science fields.

Mots clés : Polyaniline, SEM Images, Morphology, Optimisation, Matlab

**GREEN SYNTHESIS OF A NEW SERIES OF N-ACYL SULFONAMIDES UNDER
HETEROGENEOUS CATALYSIS**

BOUGHELOUM CHAFIKA, BOUSKIA SOUMAYA

1 - Laboratoire des Systèmes et Matériaux Avancés (Algérie)

Email : **c_bougheloum@yahoo.fr**

Résumé :

The functional group N-acylsulfonamide is highly valued in the fields of medicinal and bioorganic chemistry due to its broad recognition of its significant biological relevance. This is mostly because of the clinical uses and pharmacological characteristics connected to this moiety [1-4]. Also, a considerable interest in the use of solid acids as heterogeneous catalysts in organic synthesis. Heteropolyacids are certainly one of these solids that have been effectively used as catalysts in various organic transformations, because of their easy work-up procedures, easy filtration, minimization of cost and recycling of these catalysts [5, 6]. Indeed, in this work we describe the condensation of some sulfonamide derivatives and various benzoylating agents in one step in the presence of a catalytic amount of heteropolyacid. The reaction leads to the desired compounds with good yields, after examining the model reaction in different conditions.

Mots clés : N, acyl sulfonamides, heteropolyacid, heterogeneous catalysis, one pot.

STUDY OF THE PHYSICAL PROPERTIES OF TIN(II) OXIDE THIN FILMS FOR THERMOELECTRIC APPLICATIONS

BOUGHEZALA NASRINE (1), KENZA. ALMI(1*), MERIEM MEBARKI, SAID. LAKEL (1)

1 Laboratoire des Matériaux Semi Conducteurs et Métalliques, LMSM, U. Biskra

Email : almi.kenza@yahoo.fr

Résumé :

This work is based on the elaboration and characterization of Tin (II) oxide thin films using sol-gel and spin-coating technique on a glass substrate. It aims to study the effect of molar concentration (0.1, 0.5 mol/l) on the optical and electrical properties of thin films prepared using two types of catalyst (HCl, Acetic Acid) for thermoelectric applications. The optical properties were investigated by visible and ultraviolet spectroscopy, and the electrical properties were obtained using the four probes method. The main results showed that the transmittance of SnO₂ thin films prepared by the two types of catalysts namely HCl and Acetic Acid varied between 85% and 99% in the visible when the molarity increases 0.1 and 0.5 mol/l. The gap energy values for the HCl catalyst are higher than those for the acetic acid catalyst for molarities below 0.5mol/l. The lowest value recorded in this molarity range is that of HCl: 0.5mol/l which is equal to 3.71eV. Electrical conductivity increases with molarity increase from 0.1 to 0.5 mol/l.

In the case of HCl catalyst, it increases from $0.29 \cdot 10^{-4}$ to $3.39 \cdot 10^{-4}$ S/cm, in the case of acetic acid it increases by $0.29 \cdot 10^{-3}$ to $4.74 \cdot 10^{-3}$ S/cm. The use of acetic acid as a catalyst improves electrical conductivity 10 times more than does the use of HCl.

Mots clés : Tin (II) oxide Thin films, Acetic Acid ,HCl, Spin Coating, Optical properties, Electrical properties

ÉTUDE DU PROFIL PHYTOCHIMIQUE DES ARTICHAUTS CULTIVÉS EN ALGÉRIE

BOUGRIOU NADA (1), BRAHMI NABILA (1), BOUIZAR ROUKIA (1), KHEYAR NAOUEL (1)

1 - Laboratoire de biomathématiques, biochimie, biophysique et scientométrie (3BS), Département des sciences alimentaires, Faculté des sciences de la nature et de la vie, Université Abderrahmane Mira de Bejaia. (Algérie)

Email : nada.bougriou@univ-bejaia.dz

Résumé :

L'artichaut (*Cynara cardunculus*), une espèce de chardon cultivée comme aliment, appartenant à la famille des Astéracées, Il s'agit d'une plante vivace originaire de la région Méditerranéenne. L'artichaut est considéré comme un aliment fonctionnel, car il est une source de composés phénoliques bioactifs, de fibres et de minéraux. L'objectif de cette étude est d'identifier et de quantifier les principaux composés phytochimiques présents dans les artichauts algériens, ainsi que d'évaluer leurs potentielles propriétés bioactives. Des échantillons de capitules, tiges et feuilles d'artichauts ont été collectés dans la province de Bejaïa, en Algérie. Les composés phytochimiques ont ensuite été extraits et analysés par chromatographie liquide à ultra-haute performance couplée à la spectrométrie de masse à haute résolution (UHPLC-HRMS). La capacité de piégeage des radicaux des extraits a été évaluée par les tests DPPH et ABTS⁺. Les analyses ont révélé la présence de 38 métabolites spécialisés identifiés comme étant 15 phénols simples, 21 polyphénols et 2 triterpènes, tous répartis différemment. L'échantillon à base de capitules était le plus riche en flavonoïdes, en particulier en lutéoline et en glycosides d'apigénine. Au contraire, les phénols simples caractérisaient l'échantillon à base de tige. Les niveaux de composés antioxydants étaient comparables à ceux trouvés dans des études similaires sur les artichauts d'autres régions. Les artichauts algériens présentent un riche profil phytochimique avec des niveaux élevés de composés bioactifs, suggérant leur potentiel bénéfice pour la santé. Ces résultats encouragent des recherches supplémentaires sur les applications thérapeutiques des artichauts algériens.

Mots clés : artichaut, composés phénoliques, UHPLC, HRMS, flavonoïdes, activité antioxydante.

INFLUENCE DE LA TEMPÉRATURE DE SÉCHAGE SUR LE PROFIL EN COMPOSÉS BIOACTIFS ET LES ACTIVITÉS ANTIOXYDANTES DE POUDRES D'ÉCORCES D'AGRUMES

BOUIZAR ROUKIA, RIM SALHI (1), RANIA AGABI (1), NABILA BRAHMI (1).

1 - Laboratoire de biomathématiques, biochimie, biophysique et scientométrie (3BS), Département des sciences alimentaires, Faculté des sciences de la nature et de la vie, Université Abderrahmane Mira de Bejaia. (Algérie)

Email : roukia.bouizar@univ-bejaia.dz

Résumé :

Les agrumes sont des produits de grande valeur marchande, utilisés en grandes quantités par l'industrie du jus. L'industrie du jus transforme des millions de tonnes d'agrumes par an, mais seule la pulpe est utilisée, tandis que les écorces, les graines et les résidus de membrane sont le plus souvent jetés. L'écorce d'agrumes est une source de composés bénéfiques pour la santé, en particulier les composés phénoliques (flavanones, glycosides et flavones), les huiles, les fibres, les minéraux et les caroténoïdes. Dans cette étude, l'objectif était d'examiner l'effet du séchage sur les propriétés physico-chimiques et biologiques des écorces d'agrumes, en se concentrant sur la collecte, le traitement et les caractéristiques de la poudre d'écorce d'orange. Différentes méthodes de séchage, y compris le séchage à l'air et le séchage au four à différentes températures (40, 50, 60 °C), ont été appliquées aux écorces d'oranges *Citrus sinensis* et Washington Navel. Les résultats ont montré que la concentration en polyphénols totaux variait avec la température de séchage, les températures plus élevées entraînant une teneur plus élevée en polyphénols. L'activité antioxydante de la poudre obtenue a été évaluée en mesurant les niveaux de polyphénols totaux et de flavonoïdes, ainsi qu'en utilisant les méthodes DPPH et ABTS. Les résultats ont confirmé que la température de séchage optimale au four pour les oranges sanguines (*Citrus sinensis*) et les oranges Washington Navel était de 60 °C. En résumé, ce choix de température préserve efficacement les composés bioactifs responsables des activités antioxydantes dans les écorces d'agrumes. Cette préservation assure le maintien des bienfaits pour la santé associée à ces agrumes, qui sont naturellement riches en composés phénoliques. Par conséquent, cette recherche met en lumière le potentiel d'amélioration de la valeur des sous-produits d'agrumes, de réduction des déchets et de valorisation propriétés bénéfiques pour la santé.

Mots clés : écorces d'agrumes, séchage, poudre des écorces d'oranges, composés bioactifs, Activités antioxydantes.

26-27/10/2024

**SYNTHESIS, SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION AND ANTIOXIDANT ACTIVITY
STUDY OF NEW ASYMMETRIC SCHIFF BASE**

BOUKERCHE KHADIDJA (1), HAFAR DJAHIDA (1)

1 - Laboratory of Electrochemistry and Materials (LEM), Department of Engineering Process,
Faculty of Technology, Ferhat Abbas University Setif-1, 19000, Algeria. khadidja.boub@yahoo.fr
(Algérie)

Email : khadidja.boub@yahoo.fr

Résumé :

Schiff bases are organic compounds that are derived from the reaction of an aldehyde or a ketone with a primary amine. They are widely used in organic chemistry. Schiff bases are the most widely used organic compounds in many fields, including biology. Due to its structures, the electrons on the nitrogen atom, the π bond, to the other functions with the phenolic groups play a very important role in human life due to their antioxidant activity that can prevent harmful diseases caused by free radicals. A novel Schiff base asymmetric was prepared and characterized by the analysis techniques: FT-IR, UV-Vis and Liquid Chromatography coupled to Mass Spectrometry (LC-MS).

Mots clés : Schiff base, antioxidant activity, FT, IR, UV, Vis

26-27/10/2024

IN SILICO STUDY OF Re(I) BASED ON BENZENESULFONAMIDE AS A HUMAN CARBONIC ANHYDRASE IX INHIBITOR: DFT AND MOLECULAR DOCKING

BOUKERTOUTA GHADIR (1), SERIDI ACHOUR (1)

1 - Laboratory of physical chemistry, University 8 May1945-Guelma, Algeria. (Algérie)

Email : boukertouta24ghadir@gmail.com

Résumé :

Human carbonic anhydrases are found in several important physiological processes in different organs; however, they have also been found to be overexpressed in tumors[1-2]. hCA IX inhibitors may be a potential candidate specifically designed to target cancer development at different stages. Sulfonamides are major carbonic anhydrase inhibitors (CAIs) that block CA function by directly coordinating the catalytic zinc ion to the CA active site region[3]. In this study, the Rhenium complex based on benzenesulfonamide is studied theoretically using the Gaussian 09 software and the DFT method. The complex is optimized with the hybrid function basis set B3LYP and LanL2DZ/6-31G(d); Different parameters were calculated, including the energies of the frontier molecular orbitals and the molecular electrostatic potential. This optimized structure is used in molecular docking with hCA IX using autodock4, this study aims to predict binding modes and binding interaction between ligand and target from affinity values (binding energy).

Mots clés : hCA IX, DFT, HOMO, LUMO, Molecular docking.

26-27/10/2024

SYNTHESIS AND ANTIBACTERIAL EVALUATION OF NOVEL SPIROOXINDOLE DERIVATIVES

BOUKEZZOULA FAIZA (1), CHOUHA NORA (1) (2)

- 1 - Laboratory of Chemistry and Environmental Chemistry (LCCE), Department of Chemistry,
Faculty of Sciences, Batna-1 University, Batna, Algeria (Algérie),
2 - Faculty of Technology, Batna-2 University, Algeria (Algérie)

Email : norachouha@gmail.com

Résumé :

We synthesized a series of novel spirooxindole derivatives and evaluated their antibacterial activity against a panel of Gram-positive and Gram-negative bacteria. Several compounds exhibited significant antibacterial activity, with MICs ranging from 1-10 µg/mL. Compound [1] showed excellent activity against MRSA and VRE, while compound [5] demonstrated excellent activity against E. coli. Structure-activity relationship analysis revealed the importance of specific substituents at the 3-position of the oxindole ring. These results suggest that these novel spirooxindole derivatives may be promising leads for developing new antibacterial agents.

Mots clés : Spirooxindole, Synthesis, Antibacterial Activity, MRSA

**CONTRIBUTION À L'ÉTUDE DES PROPRIÉTÉS STRUCTURALES ET MORPHOLOGIQUES
DES COUCHES MINCES À BASE DE ZnO PURES ET DOPÉES AL ÉLABORÉES PAR LA
SYNTHÈSE SOL-GEL DIP COATING SUR DES SUBSTRATS VERRE POUR DES
APPLICATIONS OPTOÉLECTRONIQUES.**

BOUKHENOUBA NOUREDDINE (1), N.NASRI (2) ; S.RAHMOUNI (2)

1 -Département Socle commun Sciences et Technologie, Faculté de technologie, Université Batna
2, Algérie

2- Ecole Nationale Supérieure de l'Enseignement Technique Skikda 21000 Algérie.

Email : **boukhenoufanour@gmail.com**

Résumé :

Résumé - Dans ce travail, une méthode de dépôts chimiques appelée sol-gel via une technique de (trempage – retrait) de l'anglais Dip-coating a été utilisée pour élaborer des couches minces à base de ZnO pures et dopées Al. l'impact de la concentration dopée par l'aluminium sur les propriétés structurales et morphologiques des échantillons préparés ont été étudiés. Il a été constaté que de meilleures performances électriques et optiques ont été obtenues pour une concentration en Al égale à 5%, où les films minces ZnO présentent une valeur de résistivité égale à 1,64104 cm. De plus, la plus grande transparence a été enregistrée pour la même valeur de concentration en Al. Les résultats obtenus de cette étude fait de la structure en couche mince développée un candidat potentiel pour des applications optoélectroniques de performances élevées.

Mots clés : : sol, gel dip, coating, ZnO dopé Aluminium, photovoltaïques, transmittance, résistivité.

ETUDE PHYTOCHIMIQUE ET ACTIVITÉ ANTIOXYDANTE DE L'EXTRAIT DE LA PLANTE DE CUPRESSUS LUSITANICA DU CAMEROUN

BOUKLI HACENE IMENE FATIMA ZOHRA, KHERBOUCHE AHLAM, GHALEM MERIEM

1 - Laboratoire de recherche PPABIONUT Physiologie, Physiopathologie et Biochimie de la Nutrition et Substances naturelles et bioactives LASNABIO (Algérie)

Email : bouklihacenefatima@gmail.com

Résumé :

Le Cupressus lusitanica (conifère), une plante originaire du Cameroun, est reconnu pour ses propriétés médicinales et ses composés phytochimiques bénéfiques. L'objectif de cette recherche est de réaliser une étude phytochimique approfondie de l'extrait de plante du Cupressus lusitanica du Cameroun en se concentrant sur les dosages des polyphénols et des flavonoïdes, tout en évaluant leur activité antioxydante. Dans cette étude, extraction de la plante a été réalisée à partir d'une méthode hydroalcoolique sur le Cupressus lusitanica. Les dosages des polyphénols sont déterminés par la méthode de folin ciocalteu et des flavonoïdes par la méthode de chlorure d'aluminium (AlCl₃). En parallèle, l'activité antioxydante de cet extrait a été évaluée à l'aide des méthodes FRAP et DPPH, pour comprendre son potentiel en tant qu'antioxydant naturel. Les résultats ont montré des concentrations significatives de polyphénols et de flavonoïdes dans le Cupressus lusitanica, confirmant son potentiel en tant que source d'antioxydants naturels. De plus, l'activité antioxydante a été observée, mettant en lumière les bienfaits de ces composés pour la santé. En conclusion, cette étude souligne l'importance des polyphénols et des flavonoïdes présents dans le Cupressus lusitanica en tant qu'antioxydants naturels. Ces résultats fournissent des informations précieuses sur les propriétés phytochimiques de cette plante et ouvrent la voie à de futures recherches sur ses applications potentielles en industries pharmaceutique, en médecine et en nutrition.

Mots clés : phytochimie, polyphénols, flavonoïdes, antioxydants

**ONE POT-EXTRACTION ET STABILISATION DE LA CURCUMINE PAR UNE MATRICE À
BASE DE CHITOSANE: APPROCHES STRUCTURALE ET TECHNOLOGIE
FONCTIONNELLE**

BOULEGHLEM HOCINE (1,2), S. ZIDANE, A.SEMANE, K. GUESRI, AND A. GUELIL

1 - University Mohamed BOUDIAF, M'sila (Algérie),

2 - Université Mohamed Boudiaf, M'sila. (Algérie)

Email : hocine.boulegghlem@gmail.com

Résumé :

Le développement d'aliments courants avec des composés bioactifs aide à promouvoir la santé et réduire le risque de maladies. Cependant, la plupart des bioactifs à propriétés biologiques intéressantes sont de nature hydrophobe et donc présentent des limites d'incorporation dans les aliments dues à leur faible solubilité dans les matrices aqueuses [1]. De plus, leurs activités biologiques se heurtent à des facteurs extrêmes lors des procédés de formulation et de fabrication du produit telle que les changements de pH, de température, de la lumière, de milieux acide et/ou basique et de l'oxydation par l'air...etc. [2]. Pour ce, l'extraction des bioactifs assistée par un agent complexant biopolymère naturel [3], s'avèrent être une solution pour améliorer le rendement, au même temps l'amélioration de la stabilité des bioactifs obtenus et préserver leurs propriétés biologiques [4]. En revanche, l'extraction de la Curcumine à l'aide de solvants organiques toxiques et polluants ainsi que sa faible solubilité dans l'eau et leur instabilité dans les milieux aqueux sont trois obstacles actuels qui limitent l'exploitation de cette ressource médicinale. À ce jour, l'extraction dans l'eau de la Curcumine à partir de Curcuma reste un défi. Le travail présenté ici peut résoudre ces trois problèmes par une stratégie simple, basant sur l'extraction de la Curcumine combinée à la complexation au sein d'une matrice à base de la chitosane en une seule étape en présence d'un solvant (eau/éthanol 9/1). Le choix de système de complexation s'est porté sur la micelle à base de chitosane véritable matrice naturelle et efficace aux propriétés technologie fonctionnelle variées [5]. L'extraction de la curcumine à l'aide d'un agent complexant à base de la chitosane (CS) été comparée à l'extraction par Soxhlet dans l'EtOH/H₂O (v/v) et à l'extraction par macération classique (à chaud et à froid) dans l'eau 100%. L'agent complexant ont permis d'extraire la Curcumine avec un rendement de 85.98%. Les résultats de cette étude confirment l'intérêt de ce procédé innovant pour l'extraction d'un actif naturel lipophile comme la Curcumine à partir de sa matrice d'origine, le tout en une seule étape. De plus, l'activité antioxydante par le test au DPPH montre l'efficacité de complexe (Cur-CS) leur IC₅₀ est de l'ordre de 0.78 mg/mL, et nous avons observé une forte activité antibactérienne dans le complexe (Cur-CS) avec une zone d'inhibition de 17 mm contre *Staphylococcus aureus*. En parallèle, nous avons préparé deux savons solides (à base de Curcumine 100% et/ou du Curcumine-CS), les résultats des analyses des savons préparés, ont montré que notre savon à base du Curcumine-CS n'est pas trop alcalin, il a de pH proche de la neutralité et a un bon pouvoir moussant. Enfin, l'étude de l'activité biologique suggère que les Curcumine-CS formés peuvent être considérés comme outils prometteurs pour l'optimisation des formulations pharmaceutiques car la complexation a conservé et a amélioré les propriétés antibactériennes et antioxydantes du Curcumine.

Mots clés : curcumine, chitosane, complexe, one pot, extraction, stabilisation, activité biologique

DIAGRAMME DE PHASE ET CONDUCTIVITÉ ÉLECTRIQUE DES SYSTÈMES BINAIRES NdBr_3 - MBr ($\text{M} = \text{Na}, \text{K}$)

BOUNOURI YASSINE (1), BERKANI MADJID, HAROUNE SALIMA (2), RYCERZ LESZEK (3)

- 1 - Laboratoire de Physico-chimie des Matériaux et Catalyse, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia (Algérie),
- 2 - Laboratoire de Physico-chimie des Matériaux et Catalyse, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, Targa ouzemmour 06000, Algérie. (Algérie),
- 3 - Wroclaw University of Technology (Chemical Metallurgy Group, Department of Chemistry, Wroclaw University of Technology, Wybrzeze Wyspianskiego 27, 50-370 Wroclaw, Poland Pologne)

Email : yassine.bounouri@univ-bejaia.dz

Résumé :

Les halogénures de lanthanide et leurs mélanges avec les halogénures de métaux alcalins jouent un rôle très important dans de nombreuses technologies modernes. Ils sont largement utilisés dans les dispositifs optiques et de scintillation, comme ils sont des composants intéressants pour les doses dans les lampes à décharge à haute intensité et les nouvelles sources lumineuses très efficaces avec des caractéristiques d'économie d'énergie (les lasers,... etc). Les matériaux à large bande interdite tels que les fluorures et autres halogénures codopés par des ions lanthanides fournissent des informations précieuses sur de nombreux aspects des centres de luminescence et ont de nombreuses applications. Une telle application de ces composés nécessite la connaissance de leurs propriétés structurales, physicochimiques et, en particulier, thermodynamiques. Dans le cadre de notre programme de recherche sur les halogénures de lanthanide et leurs systèmes avec les halogénures de métaux alcalins, nous avons établie des diagrammes de phase des systèmes binaires NdBr_3 - NaBr ($\text{M} = \text{Na}, \text{K}$) par calorimétrie différentielle à balayage (SETERAM LABSYS evo TG/DSC 1600). Le système NdBr_3 - NaBr présente un eutectique simple avec deux composés définis Na_3NdBr_6 et NaNdB_4 qui se décomposent à l'état solide à 580 K et 603 K. Dans le système NdBr_3 - KBr , trois composés stœchiométriques ont été identifiés, le premier (K_3NdBr_6) est formé à partir de KBr et de K_2NdBr_5 à 680 K et fond de manière congruente à 918 K, le deuxième composé (KNd_2Br_7) fond de manière congruente à 814 K et le troisième composé (K_2NdBr_5) fond de manière incongrue à 822 K. La conductivité électrique des mélanges liquides NdBr_3 - MBr a été mesurée sur l'ensemble de la gamme de composition et sur une large plage de températures. Les résultats obtenus sont discutés en termes de formation possible de complexes.

Mots clés : Diagramme de phase, bromure de néodyme, conductivité électrique

26-27/10/2024

DFT ANALYSIS , MOLECULAR DOCKING , ADMET PREDICATIONS FOR DRUG DISCOVERY AGAINST NUDT5

BOURAOUI RANIA (1), MASMOUDI RIDA (1)

1 - Laboratory of Chemistry and Environmental Chemistry (LCCE), Department of Chemistry, Faculty of Material Sciences, University of Batna-1, Batna, Algeria. (Algérie)

Email : **bouraouirania52@gmail.com**

Résumé :

Cancer is the leading cause of death and is a major public health problem worldwide. Molecular modeling, in particular molecular docking, has rapidly entered the field of pharmaceutical research. Molecular docking is a powerful tool in computer-based drug design. It is an important technique for predicting protein-small molecule interactions. The information generated from the output of molecular docking can predict the binding of small molecules with protein [1]. Free energy of binding can predict the stability of the protein-ligand complex in different conformations .In modern science, molecular docking has revolutionized the drug discovery process and can be explored to investigate anticancer drugs Our study focuses on molecular docking used for the search for new NUDT5 inhibitors. NUDT5 are nucleotide-metabolizing enzymes (NUDIX hydrolases) linked with the ADP ribose and 8-oxo-guanine metabolism. It is known to be associated with the hormone dependent gene regulation and proliferation in breast cancer cells. In this work, we utilized the DFT approach to perform various quantum chemical calculations in order to study reactivity or predict the activity and molecular docking some ligand. The hit compounds were further analyzed using Auto Dock. Three compounds that gave the best results in molecular docking, , were analyzed in terms of their toxicity and drug-likeness. Based on toxicity and drug-likeness study Swiss ADME and PYRX are used to predict and analyze pharmacokinetic properties and Toxicity , Also essential objective to predict the conformation defined by the most favorable relative position and orientation of the ligand within its receptor

Mots clés : molecular docking, ADN, DFT, Cancer

**SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, IN SILICO AND IN VIVO BIOLOGICAL PROPERTIES
OF A NEW AG(I) COMPLEX WITH AN OXAZOLE DERIVATIVE**

BOUROUAI MOHAMED AMINE (1), BOUCHOUCHA AFAF (1), ZAOUANI MOHAMED(2)

1 - Laboratory of Hydrometallurgy and Molecular Inorganic Chemistry Laboratory, Faculty of
Chemistry, University of Science and Technology Houari Boumediene (Algérie),

2 - Ecole nationale supérieure vétérinaire (Algérie)

Email : **m.amine.bourouai@gmail.com**

Résumé :

Silver complexes are among the most studied metal complexes due to their importance as therapeutic agents. Therefore, a newly synthesized ligand derived from sulfamethoxazole and its Ag(I) complex has been synthesized and characterized. Physical, analytical, spectral, and thermal methods have been used to investigate the coordination mode, geometry, and structure of all the synthesized compounds. The ligand and the metal (I) complex have been tested for their in vivo anti-inflammatory properties using the Wistar rats model. The antibacterial properties were also screened in vitro against: Staphylococcus aureus, Pseudomonas aeruginosa, and Escherichia coli. The pharmacokinetic properties and toxicity of the synthesized molecules were estimated in silico by ADMET simulation and drug-likeness, while the interactions between the complexes and therapeutic targets were examined by molecular docking. The obtained results enabled the identification of the synthesized compounds as efficient anti-inflammatory and antibacterial agents.

Mots clés : Silver complex, in vivo anti, inflammatory, biological activity, ADMET, Molecular Docking

26-27/10/2024

SYNTHESIS, MOLECULAR DOCKING AND ADME PREDICTION OF NEW BENZAMIDES DERIVATIVES CONTAINING SULFONAMIDE MOIETY AS CARBONIC ANHYDRASE TYPE II

BOUSKIA SOUMAYA (1), BOUGHELOUM CHAFIKA (1)

1 - Laboratoire des Systèmes et Matériaux Avancés (Algérie)

Email : bouskiasoumaya@gmail.com

Résumé :

Benzamides are prevalent in various biologically active natural compounds and pharmaceuticals, exhibiting significant biological effects such as antibacterial, antioxidant, antidiabetic, and anticancer properties [1-3]. Moreover, the incorporation of sulfonamide moiety into organic molecules has a potential to modify the bioactivities [4]. Our current research is concentrated on the synthesis of new benzamide derivatives containing a sulfonamide group through a one-step reaction involving benzoic acid and sulfonamides in the presence of a solid acting as a coupling agent. Molecular docking was conducted to explore the interactions between the synthesized benzamides and human carbonic anhydrase II (PDB IDs: 2AW1, 3HS4). Moreover, the drug-like characteristics of each synthesized compound, including absorption, distribution, metabolism, and excretion (ADME), have been predicted using Lipinski's rule of five.

Mots clés : Benzamides, Sulfonamides, Molecular docking, ADME.

26-27/10/2024

AB INITIO STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF BiCoO_3 IN THE LOW SPIN STATE

BOUTICHE SALIMA, ADEL TEKILI ET HANIA DJANI

1 - Chimie Théorique Computationnel Photonique (Algérie)

Email : salimaboutichee@gmail.com

Résumé :

This study employed ab initio calculations to investigate the phase diagram of BiCoO_3 in its low spin state. Through a detailed analysis of the phonon dispersion curves of the cubic phase, we identified all potential unstable modes and evaluated the energy gains from resulting distorted phases. Our findings highlight the presence of structurally similar phases in both low spin and high spin states, such as ferroelectric distortions and octahedral rotations. However, significant differences in the energetic stability of these phases between the two states were observed. Specifically, the energy benefits associated with mode condensation are notably less pronounced in the low spin state compared to the high spin state. Furthermore, our study identifies the Pnma phase as the primary state in low spin BiCoO_3 , closely followed by the Imma octahedral rotation phase and the ferroelectric R3c phase. This contrasts with the high spin state, where the ferroelectric P4mm phase predominates.

Mots clés : perovskite, magnetism, ferroelectricity

26-27/10/2024

EVALUATION OF THE ANTIOXIDANT AND ANTIMICROBIAL ACTIVITIES OF THE AERIAL PARTS OF *CENTAUREA RESUPINATA* SUBSP. *DUFOURII*

BOUZGHAIA BADRA (1,2), CHAIRA SAFA (3), BEN MOUSSA MOHAMMED TAHAR(3), GOUDJIL RIMA (4), HARKAT HASSINA (1) (3), PATRICK PALE (5)

1 - Lab. of Physiotoxicology, Cellular Pathology and Biomolecules, Batna 2 University, Algeria

2 - Department of Chemistry, Faculty of Material Sciences, Batna-1 University, Algeria

3 - Department of Pharmacy, Faculty of Medecine, Batna 2 University, Algeria

4 - Microbiology and Plant Biology Laboratory, University of Mostaganem, Algeria

5 - Laboratory of Organic Synthesis, Institute of Chemistry, University of Strasbourg, France

Email : badra.bouzghaia@gmail.com

Résumé :

The current study focuses on the chemical composition, and evaluation of antioxidant and antimicrobial activity of the aerial parts of *Centaurea resupinata* subsp. *dufourii*. Using different chromatographic methods ten compounds were isolated: Nicotiflorin, Tilioside, Apigenin, Chrysoeriol, Apigenin, Chrysin, Daucosterol, β -sitosterol, Taraxasterol, Lupeol. The structural identification of isolated compounds was achieved using several spectroscopic methods NMR techniques (^1H NMR, ^{13}C NMR, COSY, HSQC, HMBC) and mass spectroscopy (ESI-MS) and by comparison with literature data. The antioxidant activity of aerial parts of ethyl acetate and n-butanol extracts of *C. resupinata* subsp. *dufourii* was measured in vitro using the 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl (DPPH) according to the procedure described by (Hatano et al. 1988). Ascorbic acid was used as the reference compound. Ethyl acetate extract showed the highest activity of radical scavenging in comparison with n-butanol extract ($\text{IC}_{50} = 36.263 \pm 0.005 \mu\text{g/ml}$; $\text{IC}_{50} = 97.013 \pm 0.019 \mu\text{g/ml}$) which can be explained by its richness in flavonoids components, known especially for their antioxidant activity. in vitro study of the antimicrobial activity of *Centaurea resupinata* was determined on six bacterial strains: *Escherichia coli* ATCC 25922, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853, *Klebsiella pneumoniae*, *Proteus mirabilis*, *Serratia marcescens*, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 and two yeasts: *Candida albicans* and *Candida parapsilosis*. The results obtained prove the existence of significant tangible antimicrobial activity for the two extracts tested.

Mots clés : *Centaurea resupinata*, NMR, antioxidant activity, DPPH, antimicrobial activity

CHEMICAL COMPOUNDS OF SPECIES CYTISUS PURGANS SUBSP. BALANSAE (BOISS) AND ANTIOXIDANT ACTIVITY

BOUZGHAIA BADRA (1,2), CHAIRA SAFA (3), HARKAT HASSINA (1,3), PATRICK PALE (4)

1 - Lab. of Physiotoxicology, Cellular Pathology and Biomolecules, Batna 2 University, Algeria

2 - Department of Chemistry, Faculty of Material Sciences, Batna-1 University, Algeria

3 - Department of Pharmacy, Faculty of Medicine, Batna 2 University, Algeria

4 - Laboratory of Organic Synthesis, Institute of Chemistry, University of Strasbourg, France

Email : badra.bouzghaia@gmail.com

Résumé :

Within the Fabaceae family, *Cytisus* is a widely distributed genus around the Mediterranean Sea, and 8 of the approximately 70 species that comprise this genus are found in northern Algeria. *Cytisus purgans* subsp. *balansae* (Boiss.) Maire is an uncommon species found in Algeria (Aures, Mahdids and Lella Khadidja). The chemical analysis of this species enabled the structural elucidation of seven compounds: four isoflavones, including daidzein, genistein, isopruneitin and biochanin A. Additionally, one flavone, chrysin and one flavonol, quercetin, were positively identified. Notably, the phytosterol daucosterol was also isolated and characterised. The main methods to measure the anti-oxidant activity of natural products are the DPPH, ferric reducing anti-oxidant power (FRAP) and phosphomolybdate assays. *C. purgans* ethyl acetate and n-butanolic extracts exhibited interesting antioxidant properties. In all assays, EAE showed greater antioxidant activity. With the DPPH assay, ethyl acetate extract demonstrated the most scavenging potential with an IC₅₀ value of 26.66 µg/mL. By contrast, n-butanolic extract showed similar but lower activity with an IC₅₀ value of 30.91 µg/mL. The FRAP assay measures the reducing potency of compounds or extracts, typically compared to a standard anti-oxidant. With the FRAP assay, IC₅₀ values indicated a relevant reducing power for both extracts, similar to ascorbic acid used as a standard. Interestingly, *C. purgans* EAE was as effective as ascorbic acid in this assay. The total anti-oxidant capacity of *C. purgans* extracts was evaluated by the phosphomolybdate assay. ethyl acetate and n-butanolic extracts exhibited similar and substantial anti-oxidant efficacy, with values of 106.5 ± 5.81 mg AAE/g for the n-butanolic extract and 105.46 ± 8.64 mg AAE/g for the ethyl acetate extract.

Mots clés : *Cytisus purgans*, NMR, antioxidant activity, DPPH, antioxidant activity

26-27/10/2024

ÉTUDE DE LA PHOTORÉACTIVITÉ DES COMPOSITES DENTAIRES À BASE DE BIS-GMA/TEGDMA CONTENANT DIVERSES CHARGES VIA UN SYSTÈME AMORÇANT CQ/AMINE TERTIAIRE.

BOUZIDI AFAF (1), BAYOU SAMIR , BENFARHI SAID

1 - Laboratoire de Valorisation et de Technologie des Ressources du Sahara, Faculté des sciences exactes, El Oued, Algérie (Algérie)

Email : bouzidi-afaf@univ-eloued.dz

Résumé :

Résumé Les matériaux composites dentaires ont été adoptés il y a plus de 50 ans comme matériaux de restauration directe, conçus pour répondre aux progrès de la dentisterie et aux exigences d'une santé bucco-dentaire optimale [1]. Un composite est généralement constitué d'une ou plusieurs phases inorganiques, appelées renforts, qui assurent la résistance mécanique, et d'une phase organique appelée résine. L'interface résine/renfort, créée par les agents de couplage, assure la cohésion du matériau [2]. Les composites à base de résine dentaire ont considérablement progressé, mais leur durabilité et leur longévité en tant que restaurations dentaires sont limitées. Durant la polymérisation, la résine composite subit un retrait important qui peut entraîner des fuites marginales, une mauvaise résistance à l'usure, une forte sorption d'eau et à d'autres facteurs [3]. Ces matériaux nécessitent des mélanges spécifiques et favorables de monomères de haut poids moléculaire (Bis-GMA) et de diluants réactifs (TEGDMA) en combinaison avec diverses charges [4]. Plusieurs efforts déployés pour réduire le retrait de polymérisation et faciliter le traitement des composites à des fins médicales. En conséquence, l'inclusion de charges naturelles dans un composite peut représenter l'orientation du développement des composites vers l'amélioration des performances à long terme de ces matériaux. L'objectif de cette étude est de contribuer à la compréhension des mécanismes fondamentaux impliqués durant la photopolymérisation. Plusieurs méthodes peuvent être envisagées pour prendre en compte la cinétique de réticulation, notre choix est porté sur l'approche de Kamal et Sourour [5]. Pour ce faire, des différents types de charges sont traités et fonctionnalisés, et mélangés avec la matrice résineuse Bis-GMA/TEGDMA avec différents proportions. La cinétique de ces formulation sera alors étudiée par la spectroscopie FTIR afin de déterminer l'influence de l'incorporation de charges sur la cinétique de polymérisation ainsi que la façon dont le rayonnement visible interagit avec la formulation dentaire chargée. Références 1. Anusavice, K.J., C. Shen, and H.R. Rawls, Phillips' science of dental materials. 2012: Elsevier Health Sciences. 2. Lynch, C.D., Successful posterior composites. Vol. 32. 2019: Quintessence Publishing Company Limited. 3. Calheiros, F.C., et al., Polymerization contraction stress of low-shrinkage composites and its correlation with microleakage in class V restorations. Journal of dentistry, 2004. 32(5): p. 407-412. 4. Moszner, N. and U. Salz, New developments of polymeric dental composites. Progress in polymer science, 2001. 26(4): p. 535-576. 5. Bouzidi, A., et al., Photoinitiated polymerization of a dental formulation, part 2: kinetic studies. Polymer Bulletin, 2024. 81(5): p. 4221-4235.

Mots clés : composite dentaire, polymérisation, monomères, charges, cinétique.

ELIMINATION D'UN POLLUANT D'ORIGINE PHARMACEUTIQUE PAR ADSORPTION SUR DES MATÉRIAUX ISSUS DE LA BIOMASSE

**BOUZINA LILA *1,, SALIMA MERGHACHE1, NABILA IMANE BENDIMERAD1, YASMINE
AMINA SEDJELMACII**

1 Laboratory of Inorganic Chemistry and Environment (LCIE), Department of Chemistry, Faculty
of Sciences, University of Tlemcen, P.O. Box 119, Tlemcen 13000, Algeria

Email : **l249bouzina@yahoo.fr**

Résumé :

L'eau tient une place particulièrement importante dans notre vie, en effet on la retrouve dans toutes les activités qui rythment notre quotidien. L'objectif de ce travail est de protéger l'eau d'un polluant d'origine pharmaceutique le permanganate de potassium (KMnO_4). Pour ce faire, nous avons étudié les paramètres et la cinétique d'adsorption du KMnO_4 en solution aqueuse en utilisant deux biomatériaux, la coquille de noisette brute et le charbon actif synthétisé à partir de cette dernière. Les résultats obtenus révèlent que les conditions optimales sont: masse d'adsorbants brut et charbon actif=0.5g, $\text{pH}=1$, $T=60^\circ\text{C}$, Vagitation=300 rpm (le brut) et 200 rpm (le charbon actif), $[\text{NaCl}]=0.9 \text{ mol/L}$, temps d'équilibre est compris entre 15 min et 135 min pour des concentrations de 50 à 400 mg/L. Le modèle cinétique le mieux adapté est celui du pseudo second ordre. L'étude des isothermes montre une isotherme du type H indiquant une adsorption physique. L'étude thermodynamique révèle que l'adsorption est endothermique spontanée. Ces résultats nous ont permis de conclure que la coquille de noisette et le charbon actif issu de cette dernière ont une forte capacité d'adsorption du KMnO_4 .

Mots clés : permanganate de potassium, adsorption, coquille de noisette, charbon actif

ISOTHERMES D'ADSORPTION D'UN PRODUIT ORGANIQUE SUR DES BIOSORBANTS ISSU D'UN DÉCHET ALIMENTAIRE

BRASSI AICHA(1,2), MIMANNE GOUSSEM(1), BENHABIB KARIM (3), MOKDAD HAYAT (1),
BOUSSAID RIHAB (1), ABDALLAH TOUATI MANEL (1)

- 1 - Département de chimie, Faculté Des Sciences Exactes - Laboratoire de Matériaux & Catalyse - Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbes. (Algérie),
- 2 - Département de chimie, Faculté Des Sciences Exactes -Université Mustapha Stambouli de Mascara (Algérie),
- 3 - Eco-Procédés, Optimisation et Aide à la Décision (EPROAD, EA4669)- Université de Picardie Jules Verne, IUT de l'Aisne, 48 rue d'Ostende, 02100 Saint-Quentin. (France)

Email : **brassi.aicha@yahoo.fr**

Résumé :

Notre travail porte sur la valorisation d'un déchet agroalimentaire dont l'abondance est importante dans notre pays et son utilisation pour l'élimination d'un colorant organique à partir des solutions aqueuses par adsorption. Il s'appuie sur la fixation du bémacide jaune, utilisé dans l'industrie textile, par des biosorbants préparés à base de noyaux de dattes à différentes tailles activées par microonde, à savoir NDmo1 et NDmo2. Le test d'adsorption du colorant sur les biosorbants préparés a présenté un taux d'adsorption très satisfaisant. Les isothermes d'adsorption du bémacide jaune montrent que le processus d'adsorption sur NDmo2 obéit, aussi bien au modèle de Fowler-Guggenheim, qu'à celui de Hill-de-Boer et l'adsorption sur NDmo1 est conforme à l'isotherme de Hill-de-Boer. L'étude thermodynamique a montré aussi que le processus d'adsorption est exothermique, spontané et de nature physique. Notre contribution ouvre la voie à des investigations futures pour la valorisation des déchets agroalimentaire, à savoir les noyaux de dattes, en les exploitant dans le domaine d'épuration des eaux usées par le procédé d'adsorption, étant donné que ce dernier est très utile non seulement, pour minimiser le degré de pollution mais aussi pour purifier des effluents industriels et pour protéger l'environnement d'une manière générale.

Mots clés : valorisation, biosorbants, noyaux de datte, adsorption

**CONTRIBUTION À LA CARACTÉRISATION D'UN GÉOPOLYMÈRE POUR SON
UTILISATION DANS LE DOMAINE DE LA CONSTRUCTION**

BRIKI LYAMINE (1*), BENZEROUAL BELKACEM (2A, ZIDANI KAMEL (3A

1*Département de Génie Civil, Faculté de Technologie, Université Batna 2, ALGERIE.

2Département de Géographie et Aménagement du Territoire, Institut de Sciences de la Terre et de
l'Univers, Université Batna 2, ALGERIE.

3Département de Génie Mécanique, Faculté de Technologie, Université Batna 2, ALGERIE

Email : **l.briki@univ-batna2.dz**

Résumé :

Cet article présente une étude sur la préparation d'un nouveau matériau écologique de type géopolymère, destiné aux travaux de construction, afin de réduire les émissions du CO₂ résultant de la décomposition du carbonate lors de la cuisson, et de préserver ainsi les ressources naturelles destinés à la fabrication du ciment Portland.

Nous avons utilisé un sable reconstitué avec un ajout de 18% de fillers calcaires 0/80 μ m, issu de la carrière de la SCIMAT Ain-Touta (Unité des agrégats et sable concassé), les coquilles d'œufs de poules ont été utilisées comme activateur de la réaction chimique pour transformer le sable en matériau dur et très compact. Ce nouveau matériau a été synthétisé selon des processus d'analyse physico-chimiques et mécaniques ; les résultats obtenus sont très encourageants, et permettant l'intégration de ce matériau dans les différents projets de construction et des travaux publics.

Mots clés : Géopolymère, fillers, coquilles d'œufs de poules, matériaux, environnement.

26-27/10/2024

EVALUATING OPERATIONAL EFFICIENCY AND ENVIRONMENTAL IMPACTS ON A GRID-CONNECTED PHOTOVOLTAIC SYSTEM IN THE SAHARAN REGION OF ALGERIA

CHAIB MESSAOUDA (1,*), ALI BENATIALLAH (1), NADIR HACHEMI (1), ABDELJALILE DAHBI

1 Department Of Material Science Laboratory of energy environment and information system ,
Adrar, Algeria

2 Unité de Recherche en Energie Renouvelable en Milieu Saharien (URERMS). Adrar 01000,
Alegria,

Email : chaib.messaouda@univ-adrar.edu.dz

Résumé :

The global push towards renewable energy has intensified interest in solar power, particularly in regions with high solar potential like the Sahara Desert. However, the performance of photovoltaic systems in extreme desert conditions remains understudied. This research aims to bridge this knowledge gap by analyzing the performance of a grid-connected PV system in the Zaouit Kounta desert region of Adrar, Southern Algeria. The study's significance lies in its potential to inform the design, operation, and maintenance of future solar installations in similar harsh environments, thereby contributing to the advancement of sustainable energy solutions in arid regions.

The investigation utilized operational data directly acquired from the PV power plant over a one-year period. This comprehensive dataset included both meteorological parameters and electrical output measurements. The analysis was conducted in accordance with the International Energy Agency (IEA) guidelines, ensuring adherence to globally recognized standards for PV system performance evaluation. Key performance indicators were calculated and analyzed on monthly and annual bases, providing a thorough understanding of the system's behavior under varying seasonal conditions.

The study revealed that the PV system delivered a total of 10,305.4245 MWh of energy to the grid over the year, demonstrating its significant contribution to local energy needs. Monthly average reference yields, which indicate the solar potential of the site, ranged from 4.1 to 7.1 hours per day, highlighting the region's excellent solar resources. Final yields, representing the actual energy output, varied more widely between 6.0 and 45.39 h/d, reflecting the system's response to changing environmental conditions. The annual average daily performance ratio of 70.35% indicates good overall efficiency, while the capacity factor of 19.63% suggests room for improvement in utilization. Total system losses averaged 1.95 h/d, pointing to areas for potential optimization.

The PV system shows satisfactory performance in the desert environment, with a performance ratio meeting international standards. However, variations in final yields suggest room for optimization, especially in managing extreme weather and reducing losses. This study offers valuable insights into solar plant efficiency in the Algerian desert, providing a foundation for improving future projects in similar environments through enhanced design, operation, and maintenance strategies.

Mots clés : Photovoltaic systems, Desert conditions, Grid-connected, Performance evaluation, Sustainable energy

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF POLY(ACRYLAMIDE-CO-ACID ACRYLIC) HYDROGEL FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS

CHAIBI WAHIBA (1,2), ASMAA BADAOUI , KADDOUR GUEMRA

- 1 - Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyses Physico-chimiques (CRAPC). BP 384, Zone Industrielle N°30. Bou-Ismaïl (w) TIPAZA 42004, Algérie. (Algérie),
2 - Laboratory of Physical and Macromolecular Organic Chemistry (LCOPM), "Djillali Liabes" University of Sidi Bel-Abbes, BP 89, Faculty of Exact Sciences, Algeria. (Algérie)

Email : wahiba_chaibi@yahoo.fr

Résumé :

The objective of the work involves the synthesis of Polyacrylamide (AAM) and poly(acrylamide-co-acid acrylic) (poly(AAM-co-AAc)) hydrogels by solution free radical polymerization initiated by Potassium persulfate initiator (KPS) at different feed mol monomer ratios and N,N-methylene bisacrylamide (BIS) as a crosslinking agent. The obtained hydrogels were characterized by FTIR, scanning electron microscopy (SEM) and swelling behavior. The swelling properties of poly (AAM-co-AAc) hydrogels were studied in distilled water at different pH. The ability of this co-polymeric hydrogel for use in controlled release of model drugs such as diclofenac sodium was also studied.

Mots clés : Poly(acrylamide, co, acid acrylic), swelling, controlled release, hydrogel, diclofenac sodium .

EFFECT OF pH ON ZINC OXIDE THIN FILMS

CHAOUCH NADJAT 1*, SAID BENRAMACHE (1).

University of Batna2 - Algeria

Email : n.chaouch@univ-batna2.dz

Résumé :

In this study, zinc oxide thin films were deposited on a galas substrate at temperature $T = 420\text{ C}^\circ$ by spray pyrolysis technique. The pH effects of ZnO solution (2.5, 5 and 6.20) were successfully studied. Polycrystalline ZnO films with hexagonal structure with a strong preferred orientation (002) were observed in all the sputtered films with a maximum crystallite size of 46.97 nm. l. High transmittance was found in the ZnO thin film deposited with the lower pH 2.5.

Mots clés : Zinc oxide, , Spray Pyrolysis, thin films, solution of pH, structural properties, optical properties

26-27/10/2024

QSPR MODEL FOR ESTIMATING LOG KOC PARTITION COEFFICIENT OF A SERIES OF POLYCHLORINATED BIPHENYLS.

CHAOUI AMINA (1), BOUAKKADIA AMEL (2), KERTIOU NOUREDDINE (2)

1 - Engineering and Advanced Materials Science Laboratory, Abbes Laghrour University - Khenchela, Algeria. (Algérie),

2 - Synthesis and Bio Catalysis Organic Laboratory, Badji Mokhtar University -Annaba. Algeria. (Algérie)

Email : amina.chaoui@univ-khenchela.dz

Résumé :

In this context, we developed a QSPR model for prediction Organic Carbon – Water partition coefficient using genetic algorithm/multiple linear regression approaches. MLR-QSPR model development is encouraged providing that they respect four from the five principles for the validation of QSPR models drawn up by OECD [1]. All statistical parameters obtained have been shown a higher predictive ability and a goodness of fit ($R^2=99.18\%$, $Q^2=99.15\%$). The model obtained is very significant, a high value of the Fisher F statistic ($F=7840.2405$), and the applicability domain was discussed using the Williams diagram which highlights (influential points and outliers on Y).

Mots clés : QSAR/QSPR, log Koc, PCBs, molecular descriptors, genetic algorithms.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NANO CATALYSIS

CHARIF MAJDA(1), REHALI HANANE, MENASRA HAYET, SADAOU LOBNA, RAIS ZINEB.

1 - Industriel Chemistry Department, Laboratory of LARGHYDE, University of Biskra Bp 145 RP,
Biskra 07000, Algeria (Algérie)

Email : majda.charif@univ-biskra.dz

Résumé :

Abstract This study examines the conversion of waste biomass into biochar, a valuable commodity, using a unique procedure that involves inserting a ceramic material. The use of biomass waste, which is a significant environmental issue, served as the primary material for the production of biochar. Additionally, a ceramic dopant was added to improve the structural and functional characteristics of the biochar. The composite material was thoroughly characterized using Diffraction X-ray (DRX) and Infrared (FTIR) spectroscopic investigations. The combination of waste biomass-derived biochar with the inserted ceramic material demonstrates the potential benefits of this biocomposite. Its enhanced structural stability and altered functional groups underscore its potential for diverse applications, ranging from environmental remediation to industrial utilization. This work introduces a new method to make use of waste biomass and emphasizes the importance of adding ceramic materials to improve the qualities of the resulting biochar. This opens up possibilities for using biochar sustainably and diversely.

Mots clés : 1 bio, composite, 2 photocatalysis, 3 Biochar

26-27/10/2024

L'ÉLABORATION, L'ÉTUDE STRUCTURALE ET L'ÉVALUATION DES PROPRIÉTÉS OPTIQUES DE DEUX POLYMÈRES DE COORDINATION À BASE D'IONS Ln^{3+} .

CHEDDANI YASMINE, BELAID SABRINA (1), MAOUCHE ROZA (1), BENMERAD BELKACEM (1)

1 - * Laboratoire de Physico-chimie des Matériaux et Catalyse, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia (Algérie)

Email : yasmine.cheddani@univ-bejaia.dz

Résumé :

Les polymères de coordination (PCs) base de lanthanides (Ln) font actuellement l'objet d'innombrables travaux de recherche et rentrent dans la confection et le développement de matériaux avancés, cela grâce à leurs propriétés remarquables et incomparables résultants de leurs structures fascinantes qui leur offrent un large domaine d'applications, telles que l'optique, le magnétisme, le stockage ...etc. Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'élaboration et l'étude de polymères de coordination présentant des propriétés optiques. Dans ce contexte, nous avons synthétisé par voie hydrothermale deux PCs en associant deux ligands organiques, l'acide fumarique et la 1,10-phénantroline. La résolution structurale de ces deux PCs a révélé qu'ils cristallisent dans le système triclinique et groupe d'espace $P1$ formant un pseudo-réseau 3D de formule chimique: $[\text{Ln}_2(\text{phén})_2(\text{fum})_3(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ avec ($\text{Ln} = \text{Ce}(1), \text{Pr}(2)$). La stabilité thermique de ces composés a été étudiée par analyse thermogravimétrique (ATG) et a montré qu'ils sont stables jusqu'à 300 °C. L'étude des propriétés optiques dans le domaine du visible a été effectuée sur le PC à base de Praséodyme (Pr). Les spectres d'excitation et d'émission ont été enregistrés à température ambiante sous irradiation $\lambda_{\text{em}} = 688 \text{ nm}$, $\lambda_{\text{exc}} = 295 \text{ nm}$ respectivement. Le spectre d'émission a montré de belles signatures avec la présence de tous les pics caractéristiques des transitions électroniques de l'ion Pr^{3+} , ce qui prouve que ce PC présente effectivement des propriétés optiques.

Mots clés : lanthanides, polymères de coordination, phénantroline, fumarate, propriétés optiques

THE CYTOTOXIC ACTIVITY OF THREE ISOLATED COMPOUNDS FROM PHAGNALON SAXATILE (L.) CASS

CHERCHAR HANENE (1), BENCHERCHAR ILHEM , BERREHAL DJEMAA , KABOUCHE ZAHIA

Email : abdosai25@gmail.com hanene-ch@hotmail.fr

Résumé :

Phagnalon is one of the Euro-Mediterranean genres, which is represented by about 36 species distributed throughout Northeastern tropical Africa, the Macaronesian region, the Mediterranean basin, the Irano-Turanian and the Saharo-Arabian regions, but its greatest diversity is found in the Arabian Peninsula. Phagnalon species are used in folk medicine as antiallergic, antioxidant, anti-inflammatory and in the treatment of asthma and headache. Many reports have shown that Phagnalon species possess biological properties, e.g. hypertensive, anticholinesterase, antimicrobial, antibacterial, antiproliferative and cyto-toxic activities. The cytotoxic activity of three isolated compounds (1–3) from Phagnalon saxatile (L.) CASS was evaluated against fibrosarcoma (HT1080), human lung cancer (A549) and breast cancer (MCF7) cell lines. The results of these assays were used to determine the IC₅₀ as the concentration of each compound which induced 50% inhibition of cell growth. Compound 3, showed a moderate cytotoxic activity against HT1080, MCF7 and K562 whereas compounds 1 and 2 showed also moderate cytotoxicity on HT1080 cell line only.

Mots clés : Cytotoxic activity, Phagnalon saxatile (L.) CASS, A549, HT1080, MCF7

26-27/10/2024

ELECTROCHEMICAL, SURFACE AND THEORETICAL INVESTIGATIONS OF A NEW MOLECULE (ZSM-5) DESIGNED FOR CORROSION INHIBITION OF CARBON STEEL IN HYDROCHLORIC ACID MEDIUM

CHINAR TAHANI ACHOUAK (1,2), ABDERRAHIM KARIMA (3), BENFARHI SAID (4), MOUSSAOUI KAMILIA (3), ABDERRAHMANE SIHEM (3)

- 1 - Common core science and technology Mustapha Ben Boulaid University Batna 2, Batna, 05000 ,Algeria. (Algérie),
- 2 - Materials and Living Chemistry Laboratory: Activity & Reactivity (LCMVAR), Batna 1, Batna, 05000 , Algeria. (Algérie),
- 3 - Surface Engineering Laboratory (L.I.S), Badji Mokhtar –Annaba University.12.P.O.Box. 23000 Annaba, Algeria (Algérie),
- 4 - Chemistry and Environment Chemistry Laboratory, Department of Chemistry, Faculty of Sciences, ElhadjLakhdhar University Batna 1, Batna, 05000 ,Algeria, (Algérie)

Email : ta.chinar@univ-batna2.dz

Résumé :

Throughout this work, it is intended to evaluate the effect of a new molecule(ZSM-5) on Carbon Steel (C-steel) corrosion inhibition in 1M HCl medium. For this purpose, potentiodynamic polarization measurements and Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS) were realized. It could be perceived that the inhibitor concentration increase led to substantial corrosion level drop of C-steel in the harsh medium, with inhibitive efficiency value reaching 96% at 10⁻³ M inhibitor concentration. The polarization curves showed that the inhibitor ZSM-5 operated as a mixed cathodic and anodic type inhibitor. The Nyquist diagrams illustrated that increasing ZSM-5's amount in solution occasioned an increase in polarization resistance values, implying an increase of the inhibitory efficiency and a decrease of the double layer capacity. MO and UV-Vis. spectroscopy have been utilised to specify the impact of the inhibitor's existence on the superficial condition of the C-steel in the harsh solution. The Langmuir isotherm model was found to govern ZSM-5 adsorption on C-steel surface. Energy, enthalpy and entropy of activation were calculated and discussed. The Arrhenius law was used to calculate the adsorption free energy. The chemisorption of ZSM-5 on the C-steel surface was confirmed by a free adsorption energy of -44.04 kJ/mol. To support the experimental results, the investigated inhibitor molecule was optimized using B3LYP/6-31+G(d,p) level of theory and Molecular Dynamic Simulation (MDS). The calculation was apprehended in aqueous medium. The global and local chemical reactivity describing parameters were determined and analysed.

Mots clés : ZSM, 5, C, steel corrosion, SEM/UV, Visible, DFT B3LYP, Quantum chemical descriptors, Molecular Dynamic Simulation.

MIXED MATRIX (POLYMER/ MODIFIED CLAY) USED FOR INDUSTRIAL EFFLUENT TREATMENT

CHINAR TAHANI ACHOUAK (1,2), BENFARHI SAID (3)

1 - Common core science and technology Mustapha Ben Boulaid University Batna 2, Batna, 05000 ,Algeria. (Algérie),

2 - Materials and Living Chemistry Laboratory: Activity & Reactivity (LCMVAR), Batna 1, Batna, 05000 , Algeria. (Algérie),

3 - Chemistry and Environment Chemistry Laboratory, Department of Chemistry, Faculty of Sciences, ElhadjLakhdhar University Batna 1, Batna, 05000 ,Algeria, (Algérie)

Email : **ta.chinar@univ-batna2.dz**

Résumé :

The work concerns a process applicable to the treatment of industrial effluents; In particular, it concerns a process for the preparation of mixed matrices (polymer/ modified porous materials) of synthesis and insert them at the level of the piping thus playing the role of filters for the organic depollution in order to eliminate the traces of cationic and/ or anionic dyes. The uniform microporous structure, high thermal stability, mechanical resistance and inertia towards most chemical environments are the main features of the mixed synthetic matrices used in the treatment of industrial effluents. Hence the membrane technique is one of the most attractive separation methods due to its low cost and high selectivity. The obtained results show the existence of a selective retention which increases in general with the increase of the modified clay concentration.

Mots clés : Industrial effluents, mixed matrix, filter, depollution, modified clay.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NOVEL SPIROCYCLIC COMPOUNDS

CHOUHA NORA (1,2), BOUKEZZOULA FAIZA (3)

1 - University of Batna 2 (Algérie),

2 - Laboratory of Chemistry and Environmental Chemistry (LCCE), Department of Chemistry,
Faculty of Sciences, Batna-1 University, Batna, Algeria (Algérie),

3 - Laboratory of Materials Chemistry and living: Activity and Reactivity (LCMVAR), Department
of Chemistry, Faculty of Matter Sciences, Batna-1 University, Algeria (Algérie)

Email : n.chouha@univ-batna2.dz

Résumé :

In this study we have developed a new series of innovative molecules that combine indoline and pyrimidine components in a spirocyclic structure. These molecules were created through a multi-step reaction involving isatin, active methylene compounds, and urée, with the help of a novel catalyst. The molecular structure was confirmed using techniques such as infrared, nuclear magnetic resonance, and mass spectrometry. The resulting compounds exhibit diverse substituents and functional groups, which are being studied for their unique chemical and biological properties. These properties make them promising candidates for further research and potential applications in various fields.

Mots clés : Spirocyclic compounds, Indoline, Synthesis, Catalyst.

REMOVAL OF MALACHITE GREEN DYE FROM WASTEWATER USING POLYACRYLAMIDE HYDROGEL ADSORBENTS: EQUILIBRIUM ANALYSIS AND MODELING VIA LANGMUIR AND FREUNDLICH AND TEMKIN ISOTHERMS

CHOUIKHI MANEL SAFIA, SALAH HAMRI (1,2), ZAKIA HADJOU BELAID (1), FAYÇAL DERGAL (2), DJAHIDA LERARI (2).

1 Macromolecular Research Laboratory (LRM), Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Abou Bekr Belkaid, PB 119,13000 Tlemcen, Algeria

2 Center for Scientific and Technical Research in Physico-chemical Analyzes (CRAPC), PB384, Bou-Ismaïl, RP Tipaza 42004, Algeria

Email : manelsafia.chouikhi@univ-tlemcen.dz

Résumé :

The removal of dyes from wastewater through adsorption has gained significant research interest in recent years. This is due to the recognition of hydrogel-based adsorbents as promising tools for dye removal, as they are easy to use and cost-effective [1].

The objective of the present study was to design and develop a super adsorbent hydrogel based on acrylamide monomer for effectively removing dyes such as Malachite Green from polluted water sources. Acrylamide was selected as the monomer due to its structural properties. As it contains both a polar amide group and a carbon-carbon double bond, acrylamide can strongly interact with polluting dyes through electrostatic and Van der Waals forces, facilitating adsorption.

The acrylamide-based hydrogels were synthesized using a simple and scalable radical polymerization method. A photoinitiator was used to trigger polymer chain growth, while a crosslinker allowed a treelike, three-dimensional network structure to form within the hydrogel. This porous network structure is beneficial for adsorption, providing a large surface area for dye molecules to interact with [2].

Testing showed the super adsorbent hydrogels exhibited exceptionally high adsorption capacity for Malachite Green removal, with over 98% elimination efficiency. Adsorption isotherm models provide important insights into the adsorption process between adsorbents and adsorbates. By fitting experimental data to models like Langmuir, Freundlich and Temkin, parameters can be derived to characterize the maximum adsorption capacity and surface properties. This helps understand adsorption behavior and optimize adsorbent design for efficient pollutant removal from wastewater in various applications [3].

In summary, this study developed a novel super adsorbent hydrogel for highly effective dye removal from wastewater. The acrylamide-based material demonstrated great potential through its low-cost synthesis and very high adsorption performance, showing promise for scaling up water purification applications. Further optimization has the potential to improve adsorption capacity and kinetics even more.

Mots clés : Green malachite, Polyacrylamide hydrogel, Adsorption, Isotherms, Langmuir model, Freundlich model, Temkin model.

26-27/10/2024

UPLC-ESI-MS/MS ANALYSIS OF PROPOLIS EXTRACTS AND EVALUATION OF ITS CYTOTOXIC ACTIVITY

DAIKH AMINA, FARID NASIRLI, SEVKI ARSLAN, DOGUKAN MUTLU, NAZIME MERCAN DOGAN ,
NERIMANE SEGUENI

1 - constantine 1 (Algérie)

Email : daikh_amina@umc.edu.dz

Résumé :

Honeybees produce propolis, which is a complex mixture of resinous material collected by bees from different plants and modified by their salivary secretions. Propolis is widely used as an anti-inflammatory, anticarcinogenic, antioxidant, antibiofilm or immunomodulatory agent. The chemical composition of propolis is very complex and depends on plant origin, season, and bee species. The aim of this study is to determine the cytotoxic activity of propolis extracts of Algerian propolis against colon adenocarcinoma cells (Caco-2) by using MTT test. Chemical investigation of the most active extracts was performed using ultra-performance liquid chromatography with electrospray ionization coupled to tandem mass spectrometry (UPLC-ESIMS/MS). Our results indicated that the tested propolis extracts exhibited a significant cytotoxic effect in a dose-dependent manner. A decrease in cell viability at higher concentrations was observed. Differences between propolis extract and the used control were found to be significant at a concentration of 25, 50 and 75 mg/mL. Twenty-six phenolic compounds were detected, phenolic compounds, especially flavonoids and phenolic acids, are the major bioactive constituents of propolis.

Mots clés : Cytotoxic activity, Caco, 2, propolis, MTT assay, UPLC, ESIMS/ MS.

26-27/10/2024

SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, COMPUTATIONAL CALCULATIONS, ADMET STUDY, MOLECULAR DOCKING AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF NICKEL (II) COMPLEX DERIVED FROM FUOPYRAN-3,4-DIONE LIGAND

DECHOUK LAMIA FAHIMA(1,2), ABDI YAMINA , BOUCHOUCHA AFAF , SILARBI KARIMA , ZAATER SIHEM , TERRACHET-BOUAZIZ SOUHILA , DJEBBAR SAFIA

- 1 - Hydrometallurgy and Molecular Inorganic Chemistry Laboratory, Faculty of Chemistry, Houari Boumediene Technologies Sciences University(U.S.T.H.B) (BP 32 El Alia Algiers Algérie),
2- Faculty of science, materiel science departement, University of Algiers 1 Benyoucef Benkhedda. (Algérie)

Email : lamiafahima.dechouk@gmail.com

Résumé :

Metal ions play a vital role in many biologically applications, Thus, transition metal complexes are associated with various biomolecules related to essential physiological activities in human organism¹. Several works support that nickel (II) derivative complexes revealed an interesting antimicrobial activity comparing to their free respective ligands². In this case, synthesis, characterization, computational calculations and antibacterial activity of a new complex of Ni (II) with fuopyranone derivative ligand were carried out. The theoretical study was applied to define theoretical spectra, electronic proprieties and the reactivity of molecules using Density Functional Theory method. DFT results confirm the structure and geometry of compounds then predict their biological activity. The ADMET study was carried out to predict pharmacokinetic and toxicity of optimized compound. Molecular Docking of nickel complex was applied in order to study its molecular interactions against *S. aureus* bacteria strain. Furthermore, the antibacterial activity was evaluated against *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli* strains using disc-diffusion method. A good harmony was observed between experimental theoretical approaches, improving the medicinal interest of these compounds, and confirming thus the chelation theory.

Mots clés : Nickel complex, Fuopyran, 3, 4, dione ligand, DFT, Docking. Antibacterial activity

**SYNTHESIS OF ZINC OXIDE NANOPARTICLES IN THE PRESENCE OF
[DPOHMIM+][HSO4-] IONIC LIQUID BY SONOCHEMICAL METHOD**

**DEKKICHE GHANIA (1), BENABDELLAH ABDELKADER , CHAKER YASSINE , BELARBI EL HABIB ,
DEBDAB MANSOUR , HARID NOUREDDINE**

1 - Ibn khaldoun tiaret (Algérie)

Email : **ghania.dekkiche95@gmail.com**

Résumé :

Ionic liquids have been used as a potential electrolyte/medium for the nanoparticle synthesis, especially for their suitability at high temperature with stability. In this paper, Zinc oxide (ZnO) nanoparticles were successfully synthesized via a simple sonochemical reaction of Zinc chloride (ZnCl₂) using a novel synthesis medium namely 1,2-(propanediol)-3-methylimidazolium hydrogen sulfate [DPOHMIM+][HSO₄-] as ionic liquid (IL) and cetyl trimethyl ammonium bromide (CTAB) as surfactant for obtained (ZnO NPs + IL). After upon calcinations at 400 °C during 4h, Zinc oxide formation was confirmed by XRD, FT-IR results of the ZnO as calcinated samples. The formed products exhibits the hexagonal wurtzite structure evidenced by XRD and FTIR spectra show Zn-O bond clearly without the bond for H₂O/O-H for the calcinated sample. The size of the pure (ZnO NPs) nanoparticles are in the range of 18-20 nm in size and between 12- 14 nm of (ZnO NPs + IL).

Mots clés : Sonochemical Synthesis, Nanoparticles, Zinc Oxide, Ionic Liquids, X, Ray diffraction

26-27/10/2024

INVESTIGATION PHYTOCHIMIQUE DES EXTRAITS DES FEUILLES ET DES RACINES DE LA PLANTE CHICOREE AMERE (UROSPERMUM DALECHAMPII).

DELIMI AMEL (1,2), MEDJELDI SAIDA (3), BOUZATA CHOUHAIRA (4), TOUIL WIDED (2), ATAILIA HADIL (5)

- 1 - laboratoire de biodiversité et pollution des écosystèmes (Algérie),
- 2 - laboratoire des sciences de l'environnement et d'agroécologie (Algérie),
- 3 - Laboratoire de biochimie université de chadli ben djedid- El Tarf. (Algérie),
- 4 - Laboratoire des sciences de l'environnement et d'agroécologie (Algérie),
- 5 - Université de Chadli bendjedid (Algérie)

Email : delimi-amel@univ-eltarf.dz

Résumé :

L'objectif de ce travail porte sur la caractérisation de la fraction phytochimique des feuilles et des racines de la plante Chicorée amère (*Urospermum dalechampii*), sélectionnée à partir d'une enquête ethnobotanique réalisée dans la région de Guelma au nord Est de l'Algérie. L'étude a été focalisée sur l'optimisation de la méthode d'extraction : macération ou Soxhlet, ainsi que l'optimisation des solvants d'extraction : H₂O (Extrait aqueux EA), 50% hydro-éthanol (extrait hydroéthanolique EHE) et 100% éthanol. Les rendements d'extraction les plus performants sont ceux obtenus par Soxhlet (11,21%) et ceux obtenus par macération avec l'éthanol pur des feuilles (EE F) (3,51%). La teneur remarquable en polyphénols est attribuée à l'extrait (EHE F) (27 mg Equivalent d'Acide Gallique (EAG)/g Extrait Sec (ES). Les flavonoïdes et les tannins sont mieux extraits par la méthode de macération avec des teneurs considérables rapportées pour l'extrait (EE F) et qui sont respectivement de 24,1 et 2,5 mg Equivalent de cathéchine (EC) /g ES).

Mots clés : *Urospermum dalechampii*, extraction macération, soxhlet, polyphénols totaux, flavonoïdes, tanins condensés.

**SYNTHESIS, STRUCTURAL STUDIE OF COMPLEXE Co (II) WITH SCHIFF BASE
ISONICOTINIC ACID (1-PHENYL-ETHYLIDENE) –HYDRAZID**

DERARDJA ALI AKRAM (1), GOLEA LYNDIA (1) (2)

- 1 - Department of Material Sciences, Faculty of Science and Technology, Abbes Laghrour
Khenchela University, Khenchela 40000, Algeria (Algérie),
2 - Laboratory of Advanced Materials Engineering and Sciences (ISMA), Abbes Laghrour-
Khenchela University, Khenchela 40000, Algeria (Algérie)

Email : aliakramderardja@gmail.com

Résumé :

Schiff bases, which are particularly notable for their incorporation of heterocyclic structural units containing nitrogen-donor atoms, represent a crucial and widely investigated sector within the sphere of transition element coordination chemistry. This specific area of research has garnered significant attention over the years, underscoring its vital importance in the scientific community. The sustained interest in Schiff bases is largely driven by the urgent and ongoing issue of widespread antibacterial resistance in the medical field. This challenge has spurred researchers to explore Schiff bases extensively, given their potential to provide new and effective solutions. The growing significance of Schiff bases is further emphasized by their versatile potential applications, ranging from medicinal chemistry to materials science, making them a central focus for innovative and groundbreaking research efforts. The escalating challenge of antibacterial resistance in the medical sciences has propelled Schiff bases to the forefront of research efforts. These compounds' intrinsic versatility and their capacity to form metal complexes have made them invaluable subjects of study. Additionally, the revival of interest in this area is essential for developing novel Schiff base metal complexes with diverse applications. In this study, we concentrated on synthesizing a novel Schiff base ligand, placing particular emphasis on examining its complexation reaction with Cobalt (II). The methodology we employed encompassed an extensive range of advanced spectral techniques to ensure a comprehensive analysis. These techniques included one-dimensional (1D) and two-dimensional (2D) nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy, which allowed us to explore the molecular structure in great detail. Additionally, we utilized mass spectrometry to determine the molecular weight and composition of the synthesized compound. Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy was also employed to identify functional groups and investigate the vibrational modes of the ligand. Furthermore, visible spectroscopy was used to study the electronic transitions within the compound. By leveraging these sophisticated analytical tools, we aimed to elucidate both the structural and spectroscopic properties of the synthesized Schiff base ligand. Our objective was to provide a deeper and more comprehensive understanding of its potential applications within the realm of coordination chemistry, thereby contributing valuable insights to the field.

Mots clés : Schiff bases, FTIR, NMR, ligand

SMART POLYMERIC SYSTEMS TO CONTROL DRUG DELIVERY

DERBALI ABIR (1), BOUZID DJALLEL (1), SADJI AMEL (1)

1 - Ecole Nationale Polytechnique de Constantine (Algérie)

Email : derbaliabir307@gmail.com

Résumé :

Nanoparticles based on responsive polymeric systems promise to improve the targeted drug delivery with minimum side effects. Although, extensive research is being focused on developing a typical, intelligent and sensitive polymeric network which carry and release drug with sufficient concentration on damaged tissue, such as nanoparticles should limit drug cytotoxicity in healthy tissues. In this work, the development of pH-thermo-responsive double network, with hydrophilic properties is proposed, nanoparticles are developed by the combination of two intelligent biodegradable polymers, the used method based on the copolymerization of Poly (acrylic acid) and chitosan. The influence of the acrylic acid concentration and the crosslinker on the characteristics of formulated nanoparticles have been investigated. Particle size, Zeta potential and size distribution analysis revealed that nanoparticles had a size less than 100 nm, with zeta potential about (-29.7mV) and narrow size distribution. Furthermore, the developed system showed a high encapsulation efficiency about 90%. The swelling behaviors of CS-g-PAA nanoparticles have been studied, Chitosan-g-Poly (acrylic acid) nanoparticles proved pH-thermosensitive characteristics. that makes them an interesting system for control drug release. The swelling of nanoparticles was explained according to their structures. Results revealed that swelling behaviors were affected by the crosslinker and acrylic acid concentrations.

Mots clés : Smart polymer, Chitosan, Poly(acrylic acid), Drug delivery system, nanoparticles

26-27/10/2024

CHEMICAL AND ELECTROCHEMICAL PREPARATION OF CONDUCTING POLYANILINE FILM COATED ELECTRODES

DJAALAB ELBAHI (1), ABOUDA LAKHDAR , MANSOURI LAKHDAR

1 - Laboratory of Environmental Engineering (Department of process Engineering, Faculty of Engineering Sciences, Badji Mokhtar University-Annaba, P.O. Box 12, 23000 Annaba, Algeria Algérie)

Email : djaalabahi@gmail.com

Résumé :

In this research, conducting polyaniline (PANI) films coated electrodes was synthesized by using electrochemical and chemical oxidative polymerization method. A three-electrode electrochemical cell was used to deposit PANI films on Pt electrodes. PANI film was electropolymerised on Pt electrode by using cyclic voltammetry with the scanning potential range of 0.2 to 1.2V; this was carried out for 20 cycles using a fresh solution containing 0.1M aniline in 1M HCl. The synthesis of PANI film was carried out using a chemical polymerization method. For the activation of the aniline molecule, aniline monomer (0.1 M) was mixed in 1 M HCl. To this solution, 0.1 M ammonium persulfate activated by 1 M HCl, which acts as an oxidizer, was slowly added dropwise with continuous stirring at 4–5 °C. Our core conclusion, electrochemical methods have definite advantages over chemical methods in the synthesis of polyaniline.

Mots clés : polyaniline, cyclic voltammetry, polymerization, electrochemical

ETUDE DE LA DÉCONTAMINATION DES EAUX PAR LA TECHNIQUE DES MEMBRANES LIQUIDES ÉMULSIONNÉES. APPLICATION : BLEU DE MÉTHYLÈNE

DJABER SELMA (1,2), BOURANENE SALIHA

1 - Selma (Algérie), 2 - 1) Université Mohamed Chérif Messaadia Souk-Ahras, Faculté des Sciences et de la Technologie, Département de Sciences de la matière³) Laboratoire de sciences et techniques de l'eau et de l'environnement « LSTEE » (Algérie)

Email : djabers669@gmail.com

Résumé :

Notre travail est basé sur l'étude de l'extraction d'un colorant cationique à savoir le bleu de méthylène (BM) par la technique des membranes liquides émulsionnées (MLE). Les résultats obtenus montrent qu'une émulsion E/H contenant une phase aqueuse de l'acide sulfurique (H₂SO₄), un tensioactif (Span80), un extractant (TEA), et de l'hexane comme diluant est capable d'extraire la matière polluante «bleu de méthylène» avec un rendement d'extraction (R = 93,98%) dans les premières 5minutes. Le transfert du bleu de méthylène de la phase externe vers la phase interne a été confirmé par des analyses UV-Visible et infrarouges.

Mots clés : Membrane liquide émulsionnée, Extraction, Emulsion, Bleu de méthylène, Span 80.

26-27/10/2024

EXPLORATION OF THE ANTICHOLINESTERASE ACTIVITY OF PHENOLIC-PYRIDINIC DERIVATIVES: IN SILICO STUDIES

DJAFAROU SELSABIL¹, IMENE AMINE KHODJA (1), HOUSSEM BOULEBD (1)

¹ Department of Chemistry, Faculty of Exact Science, University of Constantine 1, Constantine 25000, Algeria)

Email : selsabil.djafarou@doc.umc.edu.dz.

Résumé :

Acetylcholinesterase (AChE) is an essential enzyme in the nervous system, responsible for breaking down the neurotransmitter acetylcholine and terminating its signaling activity. This enzyme plays a crucial role in regulating cholinergic transmission, which is involved in various cognitive and neuromuscular processes. Inhibiting AChE is a common pharmacological strategy for treating conditions such as Alzheimer's disease and myasthenia gravis, aiming to enhance cholinergic activity and improve cognitive functions or muscle strength. AChE inhibitors bind to the active site of the enzyme, preventing the breakdown of acetylcholine and prolonging its effects [1]. In order to develop new derivatives with anti-acetylcholinesterase capacities, a series of 24 phenolic-pyridinic derivatives was synthesized. A molecular modeling study was conducted to evaluate the inhibition capacity of these molecules against AChE. In silico studies also revealed a promising affinity of the compounds for the active sites of the targeted enzymes. These results clearly demonstrate that the synthesized compounds are potent antioxidants with significant potential for therapeutic applications.

Mots clés : Acetylcholinesterase , Alzheimer disease Phenolic-pyridinic, Molecular modeling.

OPTIMIZATION OF THE EXTRACTION OF BIOMOLECULES FROM AZOLLA PINNATA FOR THEIR EXPLOITATION

DJAMAI WISSAM(1), ALI-NEHARI ABDELKADER (1,2), BOUAZZA ZAKIA (1)

1 - Spectrochemistry and Structural Pharmacology laboratory, Department of Chemistry, Faculty of Sciences, University of Tlemcen, PB 119, Tlemcen 13000, Algeria (Algérie),

2 - Faculty of Sciences of Nature and Life, Ibn Khaldoun University, Tiaret (Algérie)

Email : wissemdjamai@gmail.com

Résumé :

Plants, due to their richness in bioactive molecules, are a valuable resource for various sectors such as food, pharmaceuticals, and cosmetics. Algeria, with its diverse flora resulting from its varied climate, offers immense potential for the exploitation of these plants, particularly Azolla, an aquatic fern used as fertilizer and a protein source, owing to its numerous biologically active constituents. The valorization of these plants holds significant promise for aquaculture, as well as the food and pharmaceutical industries. Our study aimed to optimize the extraction methods of biomolecules from the aquatic fern *Azolla pinnata* for various applications. We compared two drying techniques: oven drying and lyophilization. Biomolecules were extracted using ultrasound, reflux, and a combined method, employing three solvents of different polarities: water, 80% methanol, and 90% acetone. We determined the concentrations of carbohydrates, pigments, polyphenols, and flavonoids, known for their antioxidant properties. The antioxidant capacity was evaluated using the DPPH (2,2-Diphenyl-1-picrylhydrazyl) assay for radical scavenging activity and the FRAP (Ferric Reducing Antioxidant Power) assay for reducing power. Additionally, silver nanoparticles were synthesized from the aqueous extract containing high levels of bioactive molecules and characterized using UV-Visible spectroscopy, infrared (IR) spectroscopy, X-ray diffraction (XRD), and scanning electron microscopy (SEM). Our results demonstrated significant quantities of pigments using 80% acetone and polyphenols and flavonoids with 90% acetone, using reflux and oven drying. Characterization revealed an absorption peak for silver nanoparticles at 450 nm, identified functional groups involved in Ag⁺ reduction, and confirmed a face-centered cubic (FCC) crystalline structure. Our results revealed significant quantities of pigments when using 90% acetone and considerable levels of polyphenols and flavonoids, utilizing reflux and oven drying methods. The characterization of the silver nanoparticles showed an absorption peak at 450 nm, identified functional groups involved in the reduction of Ag⁺, and confirmed a face-centered cubic (FCC) crystalline structure.

Mots clés : *Azolla pinnata*, Biomolecules extraction, Antioxidant properties, Silver nanoparticles.

ÉVALUATION DE L'ACTIVITÉ ANTIMICROBIENNE, ANTIBIOFILM DES NOUVELLES α -AMINOPHOSPHONATES

DJENDI MANEL LINA (1), BENZAID CHAHRAZED (1), BERREDJEM MALIKA (2), BAHADI RANIA

1 - laboratoire de microbiologie et biologie moléculaire (Algérie),

2 - Laboratoire de chimie organique appliquée (Algérie)

Email : cbenzaid@gmail.com

Résumé :

La résistance aux antibiotiques reste aujourd'hui un problème majeur de santé publique.

L'augmentation de la résistance aux antibiotiques se traduit dans la pratique hospitalière par une augmentation de la morbidité et de la mortalité et par l'apparition de microorganismes résistants à l'ensemble des antibiotiques disponibles, par création d'un mécanisme de protection.

Les causes de l'émergence de l'antibiorésistance sont multiples, mais l'utilisation excessive et/ou inappropriée des antibiotiques est, sans conteste, la principale raison de cette évolution.

La recherche de nouvelles molécules est devenue une nécessité afin de palier à ce phénomène qui engendre des répercussions sur la santé publique et l'économie.

Cette étude vise l'évaluation de l'effet antimicrobien et l'inhibition de la formation de biofilm de certaines molécules chimiques nouvellement synthétisées de α -aminophosphonates.

L'évaluation de l'activité antimicrobienne de ces molécules néo synthétisées est déterminée d'abord qualitativement par la méthode des puits, puis quantitativement par la détermination des valeurs de CMI avec le test en milieu liquide sur microplaque, les résultats sont ensuite complétés par la détermination de l'activité antibiofilm.

On a utilisé pour cette étude des souches microbiennes qui comprennent des espèces bactériennes comme : *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Klebsiella pneumoniae*, *Serratia marcescens*, *Staphylococcus aureus*, et des espèces fongiques: *Candida albicans*, *Candida kefyr*, *Candida krusei*, *Candida lusitanae* et *Candida tropicalis*.

On constate que les α -aminophosphonates néo synthétisés expriment une activité antimicrobienne très modérée contre la souche *Serratia marcescens* et assez intéressante avec les autres souches bactériennes, alors qu'avec les souches fongiques ces molécules arborent un effet très marqué, ces molécules expriment également un effet antibiofilm intéressant vis-à-vis des souches fongiques plus marqué que celui observé avec les bactéries testées.

Nos résultats montrent que les α -aminophosphonates présentent un remarquable pouvoir antimicrobien et antibiofilm, ces molécules pourraient être utilisées comme agents antimicrobiens dans certaines maladies infectieuses.

Mots clés : Synthèse chimique, antibactériens, antifongiques, antibiofilms.

DEVELOPMENT AND MORPHOLOGICAL, THERMAL, AND MECHANICAL CHARACTERIZATION OF BINARY BLENDS OF POLYOXYMETHYLENE/RECYCLED HIGH IMPACT POLYSTYRENE FROM WASTE ELECTRIC AND ELECTRONIC EQUIPMENT

DJERRAD NOUR ELHOUDA (1), TOUFFIK BAOUZ

1 - process engineering (University of Bejaia, Faculty of Technology, Department of Process Engineering, Laboratory of Organic Materials (LMO) Bejaia, Algeria. Algérie)

Email : nourelhouda.djerrad@univ-bejaia.dz

Résumé :

The study focuses on the development of new polyoxymethylene (POM)/recycled high impact polystyrene (rHIPS) from waste electric and electronic equipment (WEEE) binary blends (POM/rHIPS). With recycling and impact modification of the brittle POM polymer, the blends were prepared in the melt state in an internal mixer. The toughening and the performance effects of rHIPS on the POM were investigated on a series of unmodified POM with different contents of rHIPS (10, 20, and 30 wt.%). The morphological, thermal, and mechanical properties of immiscible binary POM/rHIPS blends were studied using scanning electron microscopy (SEM) for morphological examination, thermogravimetric analysis (TGA) for thermal stability, and tensile mechanical determination. SEM demonstrated that POM/rHIPS blends exhibit a two-phase morphology typical of an immiscible blend in which the rHIPS phase was homogeneously dispersed in the POM matrix as spherical droplets whose dimensions increased with increasing rHIPS amount in the blends. In addition, POM showed a smooth fractured surface characteristic of its brittleness, while the POM/rHIPS blends exhibited rough surfaces, indicating that the fracture mechanism changed from brittle to an energy-absorbing mechanism. The thermal stability analysis by TGA test pointed out that POM/rHIPS blends had better thermal stability than pure POM. Both rHIPS and POM showed a single stage of thermal degradation, while the blends disclosed two decomposition stages. Pure POM appeared to have the lowest onset degradation temperature because POM is thermally unstable. The mechanical properties of the binary POM/rHIPS blends revealed that both tensile strength and modulus decreased with increasing rHIPS, ascribed to the coarse size of the rHIPS domains with poor adhesion to the POM matrix. However, a significant improvement was registered for the elongation at break assigned to the adequate of the soft and rubbery nature of the rHIPS and to the effective developed mechanisms of deformation initiated at low deformation mechanisms such as shear yielding, crazing, and shear banding.

Mots clés : Polyoxymethylene, recycled High Impact Polystyrene, Impact modification, waste electric and electronic equipment (WEEE)

26-27/10/2024

SYNTHESIS AND ANNEALING TEMPERATURE EFFECTS ON TiO₂ THIN FILM PROPERTIES

DOGHMANE HOUSSEM EDDINE (1), NOZHA EL AHLEM DOGHMANE (2), ELFAHEM SAKHER (3)
AND TAHAR TOUAM (1)

1Laboratoire des Semi-conducteurs, Université Badji Mokhtar-Annaba, Annaba 23000, Algérie,

2Laboratoire de Physique des Matériaux, Départ. SM, Faculté MISM, Université de Guelma,

3Laboratory of Saharan Natural Resources, Faculty of Science and Technology, University of
Adrar,

National Highway No. 06, Adrar 01000, Algeria

Email : h.doghmane@yahoo.fr

Résumé :

Over the last few decades, titanium dioxide (TiO₂) has drawn tremendous attention due to its outstanding chemical, electrical and optical properties, such as non-toxicity, good chemical stability, excellent mechanical durability, wide band gap, high refractive index and high transparency over a broad wavelength range including the visible and near-infrared. In this work, the RF magnetron sputtering technique has been used to prepare TiO₂ thin films on glass substrates at room temperature. The study showed that the properties of TiO₂ films strongly depend on the synthesis parameters and preparation conditions. Among these parameters, heat treatment temperature has a significant effect on the microstructure, morphology and optical properties of the films and plays a crucial role in defining their performance for potential applications. Hence, the dependencies of the structural, morphological and optical properties on the annealing temperature have been systematically investigated. XRD spectra have shown that all the TiO₂ thin films are polycrystalline having anatase phase only with a preferential orientation of (101). Moreover, increasing annealing temperature has been found to improve the crystallinity and crystallite growth. The Raman studies have confirmed that TiO₂ films have crystallized in the tetragonal anatase phase and their crystal quality has been enhanced with annealing. AFM images have revealed that the as-deposited TiO₂ film displayed a homogeneous and smooth surface consisting of small grain size particles, while increasing the annealing temperature resulted in larger grain size and rougher surfaces. The UV-visible spectroscopy analysis has shown that the as-deposited TiO₂ film is highly transparent with an average transmittance of more than 75 % in the visible region. With increasing annealing temperature a decrease in the average transmittance and a blue shift in the direct optical band gap from 3.50 to 3.56 eV have been observed.

Mots clés : TiO₂ Films, RF Sputtering, Annealing Temperature, Structure and Morphology, Optical Properties.

26-27/10/2024

PROPRIÉTÉS STRUCTURALES ET ÉLECTRONIQUES DE LA PHASE WURTZITE ZnO DOPÉ EN ALUMINIUM

DOGHMANE NOZHA EL AHLEM 1, HOUSSEM EDDINE DOGHMANE (2), NOUR EL IMENE ZEGHOUM (3), ELFAHEM SAKHER (4), MALIKA DOGHMANE (1), AND SABAH CHETTIBI (1)

1Laboratoire de Physique des Matériaux, Départ. SM, Faculté MISM, Université de Guelma, Algeria,

2Laboratoire des Semi-conducteurs, Université Badji Mokhtar-Annaba, Annaba 23000, Algeria, Laboratory of Metllic Semiconducting materials, University of Biskra, 07000, Algria

3Laboratory of Saharan Natural Resources, Faculty of Science and Technology, University of Adrar, National Highway No. 06, Adrar 01000, Algeria

Email : nea_doghmane@yahoo.com

Résumé :

Afin de développer de nouvelles structures permettant de répondre à l'amélioration du niveau de vie des populations, de nouvelles approches basées sur des semi-conducteurs peu coûteux, efficaces, respectueux de l'environnement et possédant de bonnes propriétés physico-chimique deviennent une priorité mondiale et un domaine de recherche très intéressant. Ainsi, l'oxyde de zinc pur, ZnO, et dopé, reste un matériau de base pour de nombreuses applications : photocatalyse, écrans électroniques transparents et optoélectronique à courte longueur d'onde. Dans ce contexte, en utilisant le package Wien2k, nous étudions numériquement les propriétés structurales et électroniques de la phase wurtzite ZnO dopé en aluminium, AZO, à différentes concentrations. Les résultats obtenus ont montré que : (i) les paramètres de la cellule AZO diminuent avec le dopage entraînant une diminution du volume de la supercellule, (ii) similairement au ZnO pur, le gap d'énergie est également direct pour l'AZO et (iii) le gap optique augmente avec le dopage. Ces variations sont dues à la grande différence d'électronégativité et de rayons atomiques des atomes de Zn et d'Al Ces résultats pour de nouvelles perspectives d'applications.

Mots clés : ZnO, AZO, Propriétés structurales, Propriétés électroniques, Dopage

SYNTHÈSE, CARACTÉRISATION STRUCTURALE ET ÉLECTRIQUE D'UN MATÉRIAU AVANCÉ (TYPE OXYDE PYROCHLORE): APPLICATION DANS LES PILES À COMBUSTIBLE SOFC.

DRA RAFIK EL ARSLENE (1), DRA AMIRA GHISLAINE (2), RAMDANI NADIA (3), MEDJAHDI MALIKA (3)

- 1 - Departement of energy and process engineering, DJILLALI LIABES University, Sidi Bel Abbes, Algeria. (Algérie),
- 2 - Departement of Biology Sciences, DJILLALI LIABES University, Sidi Bel Abbes, Algeria. (Algérie),
- 3 - Departement of energy and process engineering, DJILLALI LIABES University, Sidi Bel Abbes, Algeria. (Algérie)

Email : aarslene@yahoo.fr

Résumé :

le but de ce travail est la synthese d'un materiau avancé sous forme d'une solution solide de type pyrochlore $\text{Bi}_{1,5-x}\text{Ca}_x\text{Sb}_{1,5}\text{CuO}_{7-\delta}$ par réaction à l'état solide céramique conventionnelle avec $0 \leq x \leq 0,4$. Les échantillons ont été caractérisés par diffraction des rayons X sur poudre (XRPD), microscopie électronique à balayage (SEM) et mesures de conductivité électrique afin de confirmer leur application dans les piles à combustible à électrolyte solide (SOFC) ou comme electrode dans des piles à combustible microbienne. La formation d'une phase unique de pyrochlore a été confirmée pour toutes les fractions x. La variation de la résistivité électrique en fonction de x de tous les échantillons, mesurée au moyen d'un dispositif à quatre sondes à température ambiante, indique que ces échantillons restent des isolants. Les mesures de conductivité électrique à haute température à différentes fréquences à l'aide d'un dispositif à deux électrodes nous permettent de constater la conductivité électrique maximale de $4,7 \cdot 10^{-3} \text{ S.cm}^{-1}$ qui a été atteinte à $x = 0,2$ générant une énergie d'activation de 0,14 eV ce qui leur rend des candidats favorable autant qu'électrolyte solide dans des piles à combustible. Pour cette fraction, en particulier l'affinement structural par Rietveld du diffractogramme des rayons X de la poudre correspondante a confirmé le groupe d'espace $\text{Fd-}3\text{m}$ cubique typique avec un paramètre de cellule de $a = 10.4089(1) \text{ \AA}$.

Mots clés : Matériaux avancés, Pyrochlore, Piles à combustible, Bismuth, affinement Rietveld, Conductivité électrique.

IN SILICO ANALYSIS OF HETEROCYCLIC MOLECULES APPLIED TO DRUG DESIGN

GHAMRI MARIEM,

Faculty of Sciences, Department of Common Base Science and Technology, University of Batna 2,
05078, Batna, Algeria

Email : m.ghamri@univ-batna2.dz

Résumé :

Aiming to develop new substances with potential biological activity against cancer cells, we have considered studying Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) on the hydantoin nucleus, which can be described as a "master key," as it is a crucial nucleus in many compounds acting on various targets to achieve diverse pharmacological properties.

The objective was to predict the biological activity and selectivity of new molecules. To achieve this, a series of thirty-nine hydantoin derivatives based on PTP1B inhibitors with their inhibition concentration values (IC₅₀) [1] were analyzed. This was done using a combination of various physicochemical, steric, electronic, and structural molecular descriptors obtained through Density Functional Theory (DFT) with the hybrid functional basis set (B3LYP) and 6-31G++(d,p) and 6-311G++(d,p) basis sets from Becke. [2]

The dataset was subjected to statistical analyses including Multiple Linear Regression (MLR) and Artificial Neural Networks (ANN). The applicability domain of these models was examined using both simple and leverage-based approaches to detect outliers and influential compounds. The effects of different descriptors on activity were described and utilized to study and design new compounds with higher activities compared to existing ones.

Mots clés : DFT, hydantoin, QSAR, Tumor.

APPLICATION OF NANOCOMPOSITE MATERIALS TO THE EXTRACTION OF LANTHANUM(III)

GHITRI FERIEL¹, BELKHOUCHE NASEREDDINE (1), OUKEBDANE KHALIL (1), FEDDANE SOUAD (1)

¹Separation and Purification Technologies Laboratory, Department of Chemistry - Faculty of Science, University of Tlemcen – Algeria

Email : ferielghiti13@gmail.com

Résumé :

In recent years, the use of nanocomposite materials has attracted considerable interest due to their particular, sometimes unique, physical and chemical properties, and can be applied in a wide range of fields, including the production of new materials used in medicine, energy and applied ecology, particularly when they can be used as adsorbents and photocatalysts, as well as material for the manufacture of environmental monitoring devices. The aim of our work is to apply a metal oxide-based nanocomposite as an adsorbent in the extraction of lanthanum(III) from an aqueous medium. In order to determine the optimum conditions for extraction, various parameters were studied: stirring time, the effect of pH, the effect of initial lanthanum(III) concentration, the effect of adsorbent quantity and the effect of temperature.

The results showed that 20 minutes were sufficient for a quantitative extraction at an optimum pH of 5.6. The adsorption of lanthanum(III) was best described by pseudo- second-order kinetics. The Langmuir isotherm was well suited to adsorption equilibrium measurements compared to the Temkin, Freundlich and Dubinin Radushkevich isotherms. Thermodynamic studies showed that the adsorption system was spontaneous at room temperature and endothermic. All these results make magnetic nanocomposit a suitable adsorbent for practical application and can be exploited for the development of purification and extraction.

Mots clés : Materials, Nanocomposite, Lanthanum(III), Extraction.

ÉTUDE COMPARATIVE DE L'IMPACT DE L'INCORPORATION DE CARBONATE DE CALCIUM (CaCO_3) ET DE PERLITE EXPANSÉE SUR LES PROPRIÉTÉS PHYSICO-CHIMIQUES DU POLYÉTHYLÈNE HAUTE DENSITÉ (PEHD)

GOUISSEM LINDA (1,2),

1 - Université Ferhat-Abbas Sétif 1 [Sétif] (Algérie),

2 - Laboratoire Préparation, Modification et Application des Matériaux Polymériques Multiphasiques (Algérie)

Email : linda.gouissem@univ-setif.dz

Résumé :

Les plastiques ont révolutionné notre vie quotidienne en devenant omniprésents dans une multitude de produits, allant des vêtements et des emballages alimentaires aux stylos et aux chaises. Bien que récents, ils ont radicalement modifié notre mode de vie et la gamme de produits disponibles. Produits sous forme de poudres, granulés ou lacets, les plastiques sont rarement utilisés purs et sont souvent modifiés par des additifs pour des propriétés spécifiques comme la résistance aux UV, la flexibilité ou la réduction des coûts de production. Ces modifications élargissent considérablement leur champ d'application. Dans l'emballage, l'ajout de charges minérales réduit les coûts sans altérer les propriétés mécaniques. Des charges telles que l'oxyde de magnésium, le carbonate de magnésium et les composés de calcium sont couramment utilisées dans les secteurs de l'alimentation, de la cosmétique, de la pharmacie et de la chimie. Le carbonate de calcium (CaCO_3) est particulièrement apprécié en raison de sa faible solubilité dans l'eau et de ses propriétés avantageuses. Dans notre étude, nous avons exploré les effets du CaCO_3 et de la perlite expansée sur les propriétés du polyéthylène haute densité (PEHD). L'Omyalite 90T, une forme traitée de CaCO_3 , est connue pour sa bonne dispersion dans les matrices polymères. La perlite expansée, obtenue par traitement thermique de la perlite naturelle, est utilisée généralement dans l'isolation et l'horticulture. Malgré ces applications, son potentiel comme charge minérale dans les composites polymères reste inexploité, offrant une opportunité de recherche pour de nouveaux matériaux composites. Quatre formulations de mélanges PEHD/charges ont été préparées avec des taux de charge variant de 5 % à 20 % en volume. Ces mélanges ont été réalisés à l'aide d'un plastographe Brabender, à 220°C et 30 tr/min. Les résultats ont montré une augmentation de la viscosité des mélanges, restant dans des limites acceptables pour une transformation aisée. Le module d'élasticité des composites PEHD/ CaCO_3 a présenté une augmentation significative dès 5 % de CaCO_3 (866 MPa), par rapport au PEHD pur (806 MPa). Pour les composites PEHD/Perlite, une augmentation linéaire du module d'élasticité a été observée, passant de 739 MPa à 5 % de perlite à 963 MPa à 20 %, dépassant ainsi le PEHD dès 15 % de perlite (868 MPa). L'allongement à la rupture a augmenté avec 5 % et 10 % de CaCO_3 , indiquant une meilleure flexibilité et une capacité d'élongation accrue. Pour les composites PEHD/Perlite, la variation est aléatoire, atteignant 90 % à 5 % de perlite, supérieure au PEHD pur (84 %). La contrainte à la rupture a diminué au-delà de 10 % de charge pour les deux types de charges, réduisant la résistance mécanique. L'analyse thermique par calorimétrie différentielle à balayage a révélé une légère augmentation de la température de fusion pour les deux types de charges. Enfin, l'analyse par Microscopie Électronique à Balayage a montré une bonne dispersion des charges à des taux modérés, mais une dispersion moins homogène avec des agglomérats à 20 %. Les surfaces fracturées des échantillons variaient selon le type de charge, avec les échantillons PEHD/Perlite présentant des surfaces fracturées ou impactées, suggérant un comportement ductile fragile. En conclusion, l'ajout de CaCO_3 et de perlite expansée au PEHD améliore les propriétés mécaniques et thermiques tout en réduisant les coûts de production. Cependant, une bonne dispersion des charges est essentielle pour éviter la formation des agglomérats à des taux élevés. Ces résultats ouvrent la voie à de nouvelles applications industrielles et soulignent l'importance de poursuivre les recherches sur les composites polymères pour optimiser leurs performances.

Mots clés : Composites, Perlite expansée, PEHD, CaCO_3 , charges

CORROSION RESISTANCE AND ELECTROCHEMICAL PERFORMANCE OF Ti-6Al-xNb ALLOYS IN PBS SOLUTION

GUERRAB FAHIMA (1,2), MECHACHETI SAAID (1), FELLAH MAMOUN (3)

1 - Tribology, materials surface and interfaces group, laboratory of foundry, Annaba University (Algérie),

2 - Chemistry Department, ABBES Laghrour - Khenchela University P.O 1252, 40004, Algeria. (Algérie),

3 - Mechanical Engineering Department, ABBES Laghrour- Khenchela University, Algeria. (Algérie)

Email : halafahima@yahoo.fr

Résumé :

Titanium and its alloys are predominant choices for use as biomaterials in human implants. In this study examined the corrosion behavior of titanium alloy Ti-6Al-7Nb and compared it to samples that were used and had varying percentages of niobium Ti-6Al-xNb ($x=0,2,5$). This study aimed to assess the corrosion behavior of the materials using the analysis of open circuit potential (OCP) techniques, electrochemical impedance spectroscopy (EIS), and potentiodynamic polarization. After being submerged for 120 minutes in a PBS solution at temperature 37°C to replicate a physiological environment, polarization experiments were carried out. Very low current densities were found for the relative to Ti-6Al-xNb, for the Ti-6Al-7Nb alloy, suggesting the creation of a stable passive layer. is caused by the material's surface developing a thin layer of metal oxides, which, through direct reactivity with most alloys, provides protection against the action of aggressive substances in the physiological media. This technique demonstrated the strong corrosion resistance of Ti-6Al-7Nb, which is consistent with a reasonably stable passive regime. It prevents the electron transfer reactions needed to keep the biomaterial's bulk metal dissolved.

Mots clés : Biomaterials, Ti, 6Al, 7Nb, Titanium alloys, Biomedical, corrosion resistance, PBS solution

26-27/10/2024

ÉTUDE DE L'EQUILIBRE ET DE LA STABILITE MECANIQUE DU (Ba₂SmSbO₆) EN UTILISANT LE CODE WIEN2K AVEC LA METHODE DES ONDES PLANES AUGMENTEES LINEARISEES (LAPW).

GUESMIA AISSA (1), BOUADJEMI BOUABDALLAH, ZITOUNI ALI

1 - Laboratoire de Modélisation et Simulation en Sciences des Matériaux, University Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem, Algérie (Algérie)

Email : **aissaguesmia33@gmail.com**

Résumé :

Résumé : Dans ce travail nous allons étudier les propriétés structurales, électroniques, magnétiques et élastiques du double pérovskite (Ba₂SmSbO₆) en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec un potentiel total (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code Wien2k. Le potentiel d'échange et de corrélation a été traité par deux approximations PBE-GGA et GGA+U. Comprendre le ferromagnétisme de type p dans le composé double pérovskite peut offrir de nouvelles possibilités pour le développement de nano-structures ferromagnétiques à base de B.

Mots clés : DFT, LAPW, propriétés structurales, full heusler, propriétés électroniques, ab initio, wien2k

26-27/10/2024

ETUDE D'ACTIVITÉ ANTIOXYDANTE DE QUATRE EXTRAITS DES FEUILLES DE ZIZIPHUS SPINA-CHRISTI (L) DE LA RÉGION DE SOUF (EL-OUED)

GUEZZOUN NASSIMA (1,2), SELMANE MEHDI (2) (1), KHEZZANI BACHIR (2) (1), ZEMMOULI NAOUAL (2) (1)

1 - Département de Biologie, Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie, Université d'El Oued, Algérie (Algérie),

2 - Laboratoire de Biologie, Environnement et Santé, Université d'El Oued, Algérie (Algérie)

Email : nassimag39@gmail.com

Résumé :

Cette étude porte sur l'activités antioxydante de quatre extraits (hexane, dichlorométhane, méthanol et eau) des feuilles de Ziziphus spina-christi. Nous avons utilisé trois méthodes d'analyse différentes; notamment la capacité antioxydante totale, le piégeage du radical DPPH et réduction de fer, pour déterminer de quels extraits ont une capacité antioxydante. Les rendements d'extraction varient de 1% à 17%, le méthanol donne la valeur la plus élevée avant l'hexane, l'eau et le dichlorométhane. Les activités antioxydantes varient considérablement entre les différents extraits de la plante utilisée dans cette étude. En effet, la capacité antioxydante total de l'extrait de méthanol est plus élevée que celles des autres extraits avec une valeur de 302.59 ± 0.0006 mg EAS/g de matière sèche. En outre, les activités antioxydantes des tests DPPH et de réduction du fer les plus fortes ont été observées dans l'extrait de méthanol qui ont présenté par CI50 et la CE50 les plus faibles avec une valeur de 336.04 ± 0.94 ug/ml et de 126.85 ± 0.12 ug/ml respectivement. Les présents résultats suggèrent que l'extrait de méthanol des feuilles de Ziziphus spina-christi de la région de Souf est une excellente source des composés en tant qu'agents antioxydants pourrait être utilisée dans la biotechnologie industrielle. Mots clés : Activités antioxydantes - Extrait de méthanol - Ziziphus spina-christi - Biotechnologie industrielle - Région de Souf

Mots clés : Activités antioxydantes, Extrait de méthanol, Ziziphus spina, christi, Biotechnologie industrielle, Région de Souf

RHEOLOGICAL AND WATER VAPOR PERMEABILITY PROPERTIES OF PLA/PCL-MOF COMPOSITES

GUIRA MERIEM (1), KERAKRA SAMIA (1), HABI ABDERRAHMANE (1)

1 - Université Abderrahmane Mira, Faculté de Technologie, Laboratoire des Matériaux Organiques (LMO), Route de Targa Ouzemour, 06000, Bejaia, Algeria (Algérie)

Email : meriem.guira@univ-bejaia.dz

Résumé :

Efforts to elaborate materials with novel structures, and potential engineering applications with biodegradability are intensifying daily. The incorporation of MOFs into biodegradable polymers is a recent research endeavor that has many applications, including those in medical and environmental remediation. The aim of this work is to study the effect of the incorporation of the Zn (BDC) MOF on the morphological, rheological, and barrier properties of the blend PLA/PCL. The obtained composites showed significant enhancements in terms of storage and loss modulus of the PLA/PCL matrix, indicating a high degree of MOFs dispersion. The SEM micrographs of the different composites demonstrate a good dispersion of the MOF in the blend matrix as function as the amount of MOFs is added. PLA/PCL filled blends exhibited higher barrier properties than the pristine blend as function as the percentage of MOFs is incorporated.

Mots clés : PLA/PCL blend, Zn (BDC) MOF, SEM, water vapor permeability properties

26-27/10/2024

SILICE MÉSOPOREUSE DOPÉE AVEC AGNPs ET CuO POUR LA RÉDUCTION CATALYTIQUE DES POLLUANTS ORGANIQUES DANS L'EAU.

HABECHE FATIMA (1,2), BOUHADJAR BOUKOUSSA (1,3), BENALI FADILA (1), MOKHTAR ADEL (1,4), HACHEMAOUI MOHAMED (1,5)

- 1 - Laboratoire de Chimie Des Matériaux LCM, Université Oran1 Ahmed Ben Bella, BP 1524, El-Mnaouer, 31000 Oran, Algeria (Algérie),
- 2 - Département de Génie des Procédés, Institut des Sciences et Technologies, Université Ahmed Zabana, 48000 Relizane, Algérie (Algérie),
- 3 - Département de Génie des Matériaux, Faculté de Chimie, Université des Sciences et de la Technologie Mohamed Boudiaf, BP 1505, El-Mnaouer, 31000 Oran, Algérie (Algérie),
- 4 - Département de Génie des Procédés, Institut des Sciences et Technologies, Université Ahmed Zabana, 48000 Relizane, Algérie (Algérie),
- 5 - Département des Sciences des Matériaux, Institut des Sciences et Technologies, Université Ahmed Zabana, 48000 Relizane, Algérie (Algérie)

Email : habecheamel@yahoo.fr

Résumé :

La pollution de l'eau est devenue l'une des principales menaces pour l'environnement mais aussi pour la santé humaine , En effet, de nombreuses substances chimiques et organiques provenant des activités industrielles, agricoles ou domestiques atteignent directement ou indirectement les eaux. Ces eaux usées chargées sont souvent rejetée dans le milieu naturel sans traitement efficace au préalable, ce qui peut avoir des effets néfaste sur l'écosystème et las santé humaine. Les colorants font partie des polluants contenues dans les déchets industriels et les eaux usées. Dans ce travail, nous avons préparé des nouveaux matériaux pour élimination et la réduction pour la réduction des colorants suivants des eaux usées tel que le Bleu de méthylène (MB), Rouge du Congo (CR), Méthyle Orange (MO) et Orange G (OG) . . Les nouveaux matériaux préparés à base de la silice mésoporeuse MCM-41 a été préparée par une méthode hydrothermale puis modifiée par des espèces de cuivre et d'argent (en utilisant différents pourcentages de Cu (0, 1,0.05, 0.01). Ces derniers sont caractérisés par une surface spécifique efficace importante et une très forte porosité et une bonne stabilité thermique. Les matériaux obtenus ont été caractérisés par différentes méthodes : XRD, XRF, FTIR, XPS, EDX/SEM et TEM. . L'activité catalytique de différents matériaux ont été réalisées sur un spectrophotomètre UV-VIS et a montré que le catalyseur Ag-Cu-MCM-41(0,05) était le plus efficace que les autres matériaux dans lequel le temps de dégradation obtenue pour les colorants est très important .Notres matériaux sont également facile à récupérer via un processus d'une simple filtration et peut être réutilisé trois fois avec une augmentation de temps de réaction.

Mots clés : les colorants, MCM, 41, Ag, Cu, MCM, 41, réduction catalytique.

VALORISATION DES DÉCHETS LIGNO-CELLULOSIQUES (NOYAUX DE DATTES) DANS L'ÉLIMINATION DES COLORANTS DE L'EAU

HACHANI RAHIMA (1),

1Département de socle commun de sciences et technologie, Faculté de technologie, Université de Mostapha Ben Boulaid – Batna2, Algérie

Email : rahima.hachani@univ-batna2.dz

Résumé :

L'objectif de cette étude est de valoriser un matériau ligno-cellulosique local en l'occurrence les noyaux de dattes brutes (N.D) en tant qu'adsorbant à faible coût pour l'adsorption d'un colorant anionique le Rouge Congo (RC) et d'un colorant cationique le Bleu de Méthylène (BM) à partir d'une solution aqueuse. La caractérisation structurale et texturale de ce matériau, a montré son aptitude à éliminer des substances polluantes de la solution aqueuse. L'application des N.D en adsorption a été menée en batch dans les conditions optimisées suivantes : une concentration initiale en colorant de 100 mg/L, temps de contact à l'équilibre de 120 min, une température de 20 °C, un pH 2 pour le RC, pH 5 pour le BM et une concentration des N.D de 1 g/L. Pour le RC et le BM respectivement, la capacité d'adsorption correspondant à ces conditions est d'environ 69,81 mg/g et 93,47 mg/g et peut atteindre 99,42 mg/g et 50 mg/g en augmentant la force ionique de la solution de colorant par du CaCl₂ 0,05 M. Ces résultats expérimentaux, sont bien modélisés en adsorption par l'isotherme de Freundlich et en cinétique par les modèles du pseudo-deuxième ordre et d'Elovich. L'ajustement des modèles a été confirmé par les faibles valeurs du test Chi-carré (χ^2) et du coefficient de corrélation R² près de l'unité. Les paramètres thermodynamiques indiquent que le processus d'adsorption est endothermique et non spontané pour les températures étudiées. Les tests d'adsorption-désorption ou de régénération ont montré que les N.D présentent l'inconvénient de la perte d'efficacité ou usure, comme la majorité des matériaux adsorbants. Sur la base de tous ces résultats, les N.D pourraient être utilisés comme un adsorbant potentiellement efficace à faible coût et répondant aux critères environnementaux de développement durable.

Mots clés : Adsorption; Rouge Congo; Bleu de Méthylène ; Noyaux de dattes; Modélisation.

26-27/10/2024

RAMAN MICROSCOPIC ANALYSIS OF DETERIORATED PHOTOVOLTAIC CELL IN DESERT AREAS

HACHEMI NADIR *1, EL FAHEM SAKHER (1), MESSAOUDA CHAIB (1) FAYÇAL BAIRA (2) RACHID TIGRINE (1)

1 Department Of Material Science, Laboratory Of Energy Environment And Information (LEESI) Adrar, Algeria

2 Department of Sciences and technology, Faculty of technology, University of Batna 2, Alleys 53, Constantine Avenue. Fésdis, Batna 05078, Algeria

Email : hach.Nadir@univ-adrar.edu.dz

Résumé :

Raman microscopic analysis has emerged as a valuable tool for studying the deterioration of photovoltaic cells in desert environments. This non-destructive technique provides insights into various degradation mechanisms affecting solar panels exposed to harsh desert conditions. Research has shown that Raman spectroscopy can detect surface damage caused by sand abrasion, identify changes in crystalline structure due to extreme heat, and reveal polymer degradation from intense UV radiation. It also helps in observing corrosion effects from occasional moisture and identifying contaminants on cell surfaces. Studies have demonstrated that different photovoltaic materials exhibit distinct degradation patterns under desert conditions, all of which can be characterized using Raman microscopy. This research is crucial for improving the design and durability of photovoltaic cells deployed in desert areas, ultimately enhancing their long-term performance and efficiency in these challenging environments.

Mots clés : photovoltaics , Raman microscopic, material degradation .

26-27/10/2024

SYNTHÈSE ET ACTIVITÉ ANTIFONGIQUE DE QUELQUES 2-1,2,3-TRIAZOLINES BICYCLIQUES

HACHEMI YASMINE RAHMA (1), DAHOUI KHALFA MOHAMED (1), DIB SOULEF (2), HAMADOUCHE MOHAMMED (1)

1 - Laboratoire de Chimie Fine, Univ. Oran 1 (Algérie),

2 - Laboratoire de Biologie des Micro-organismes et Biotechnologie, Univ. Oran 1 (Algérie)

Email : yasmine.h31@gmail.com

Résumé :

Représentant un volet très déterminant en chimie organique, les hétérocycles azotés sont très étudiés du fait de leurs similitudes avec plusieurs molécules naturelles bioactives 1. Par ailleurs, les hétérocycles pentagonaux triazotés sont depuis longtemps explorés de par leurs différentes voies synthétiques et de leurs propriétés biologiques 2. Notre étude a pour objectif de réaliser une synthèse verte de quelques (1,2,3)-triazolines bicycliques par réaction one-pot et par activation aux micro-ondes puis, de démontrer leur potentiel antifongique contre la levure *Candida Albicans*.

Mots clés : Azides organiques, énamines, Réaction multicomposés, cycloaddition 1, 3, dipolaire, triazolines, activité biologique

A NEW NUMERICAL SIMULATION OF CONTAMINANT TRANSPORT IN TWO-DIMENSIONAL POROUS MEDIA

HADDAD KHOULA 1, ABDELHAK GHEID (1); DJAMEL HADDAD (2); KAFIA OULMI (3)

1- Laboratory of Sciences and Technics of Water and Environment, MohamedCherifMessaadia University, B.P 1553, Souk Ahras 41000. Algeria.

2- Laboratory (LESEI), Faculty of Engineering, University of Batna, 5000. Algeria.

3- Department of Chemistry, University of Batna, 5000. Algeria.

Email : khawlahaddad11@yahoo.com

Résumé :

The purpose of this work was to find a new form for the Non-equilibrium model of two-dimensional dispersion, with the consideration the two velocities horizontal and vertical. The basic equation describing this process is the continuity equation which states that mass is conserved. The filtration through porous media is modelled with an empirical relation called Darcy's law. The sensitivity of the model is represented in the correlation between variables (pressure, velocity ,concentration), which gives a performance of the model.

Present study shows that the distribution of the field is not homogeneous, it is variable in every point of the domain(X,Z). The results obtained allow us to predict the behavior over time of a contaminated groundwater layer and the distribution of the pollutant in the soil and its concentration .The problem will be solved numerically by using a numerical approach based on the finite volume method with the aid of the FORTRAN program.

Mots clés : Numerical simulation, Leaching, Pollutant, Groundwater, two-dimensional.

THERMAL CHARACTERIZATIONS IN FINISH TURNING OF AISI 1045 CARBON STEEL

HAMADI BILLEL (1,2), ACHOUR TOUFIK (1,2), CHAOUR MOHAMED (1,2), BOULEKROUNE SOFIANE (1,2), BOUCHERMA DJAMEL (1,2), CHERRAD LOTFI (1,2)

1 - Center of Research in Mechanics (CRM), P O Box 73B, Constantine 25000, Algeria (Algérie),

2 - Research Center in Industrial Technologies (CRTI), P.O. Box 64 Cheraga 16014. Algiers.

ALGERIA. (Algérie)

Email : billelhamadi@yahoo.fr

Résumé :

Machining is a surface-generating process that consists in creating a new surface by removing material, which results in the formation of chips using a cutting tool. The shape of the chip and the mechanisms by which it is formed have a direct impact on the quality of the machined components. Our experimental study focuses on the thermomechanical phenomena occurring during chip formation in material removal processes, specifically in turning operations. To investigate this, we conducted dry turning tests on AISI 1045 steel components with a CVD-coated carbide. We used an infrared camera and optical microscope to examine the thermal aspects within the cutting zone and to analyze chip morphology. The results obtained have contributed to a better understanding of chip formation processes during dry turning operations on AISI 1045 steel.

Mots clés : CVD, Coated Carbide, Thermomechanical analysis, Chip morphology, Turning.

26-27/10/2024

IMPACT OF IRON CONTENT ON THE PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED Ti-6Al-XFe ALLOYS

HAMADI FOUZIA (1,2), FELLAH MAMOUN , MEDJALDI MALIKA

1 - Mater Sciences Department (Abbes Laghrour; University of khenchela, Algeria Algérie),

2 - Abbes Laghrour; University (Abbes Laghrour; University of khenchela, Algeria; Algérie)

Email : fouzia.hamadi@univ-khenchela.dz

Résumé :

This research aims to explore how different levels of iron content (0, 2, 4, 6, and 10 wt%) affect the structural and tribological properties of a nanostructured ternary alloy Ti-6Al-XFe which was produced through high energy milling. Various characteristics of the alloys, such as lattice parameters, powder morphologies, relative density/porosity, and microhardness, were examined using X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), surface profilometry, and micro durometer. The crystallite size was determined using the W-H method, and the micro strain resulting from the diffusion of iron atoms in the lattice was also calculated. Tribological testing was conducted using an oscillating tribometer under wet conditions, mimicking a human body environment with Phosphate Buffered Saline (PBS) solution at a neutral pH of 7.4 and varying applied loads of 2, 6, and 10 N. The results indicated that the addition of Fe had a significant impact on the structural properties of the alloys, resulting in a decrease in lattice parameter (a) as the Fe content increased from 2.9493 Å. Additionally, With a Fe content of 10 wt%, the average grain size significantly increased from 6.965 nm (0 wt% Fe) to 44.42 nm. The wear test results indicated a notable decrease in friction coefficient and wear rate, attributed to the development of protective films like TiO₂.

Mots clés : biomaterial, Titanium, PTH, crystallite size

26-27/10/2024

DETERMINATION OF STRUCTURAL STABILITY, ELASTIC, THERMAL AND HALF METALLIC BEHAVIOR OF CoZrVZ

HAMADI ZINEB (1,2), FATIHA BESSAHA , FATIMA BENDAHMA

1 - Hamadi Zineb (Algérie),

2 - Laboratory of Technology and Solid Properties, Abdelhamid Ibn Badis University,
Mostaganem, Algeria (Algérie)

Email : zinebhamadii@gmail.com

Résumé :

Energy plays an important role in the development of countries. Currently, thermoelectric materials such as Heuslers alloys directly convert residual thermal energy into useful electrical energy. These materials could play a crucial role in the prevention of the energy crisis, as well as in the reduction of greenhouse gas emissions, ie by serving as a source of green energy. In this context, our work consists of studying the thermoelectric performance of a Heusler material, namely CoZrVZ. The semi-classical theory of Boltzmann implemented in the BoltzTraP code is applied to study the thermoelectric properties (TE). The high value of the figure of merit was achieved to make CoZrVZ the compound a promising candidate for TE applications.

Mots clés : Heusler material, Greenhouse effect, Energy crisis, Thermoelectricity, Boltzman.

26-27/10/2024

THEORETICAL EXPLORATION OF ENHANCED ANTIOXIDANT ACTIVITY IN COPPER COMPLEXES OF TETRAHYDROXYSTILBENES: INSIGHTS INTO MECHANISMS AND MOLECULAR INTERACTIONS

HAMADOUCHE SALIMA*, HAFIDA MEROUANI, ABD ALGHANI MAY, NADIA OUDDAI, MANAWWER ALAM, LUCA MICOLI, ALESSANDRO ERTO AND YACINE BENGUERBA

Email : salima.hamadouche@univ-batna.dz

Résumé :

A theoretical investigation was conducted using DFT/PW91/TZP/DMSO calculations on a complete set of exhaustive lists of 18 compounds resulting from the complexation of trans-2,4,3',5'-tetrahydroxystilbene (T-OXY) and cis-2,4,1',3'-tetrahydroxystilbene (C-OXY) with copper metal cations (Cu^+ and Cu^{2+}). The ligand-binding sites are the critical points of Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM) analysis on neutral and deprotonated ligands. Various mechanisms, including hydrogen atom transfer (HAT), sequential proton loss electron transfer (SPLET), single electron transfer followed by proton transfer (SET-PT), and bond dissociation energy (BDE(E0)) calculations, were employed to quantify the antioxidant activity. The BDE(E0) mechanism emerged as the most suitable approach for such analyses to evaluate the departure of hydrogen atoms since the results show the HAT mechanism is the most likely occurring. Particularly intriguing were the anionic Cu^+ complexes with ligands adopting trans configurations and deprotonated conformations, displaying superior antioxidant activity compared to their counterparts. Remarkably, a single ligand within the Cu^+ complex exhibited exceptional antioxidant prowess, yielding a BDE(E0) value of 91.47 kcal/mol. Furthermore, a complex involving two deprotonated ligands demonstrated antioxidant activity of 31.12 kcal/mol, signifying its potential as a potent antiradical agent, surpassing T-OXY by a factor of 3.91 and even surpassing the antioxidant efficiency of Vitamin C.

Mots clés : Antioxidant activity, copper complexes, DFT, BDE(E0), HAT, SPLET, SET-PT

EXTRACTION ET ANALYSE PHYSICO-CHIMIQUES D'UNE HUILE ESSENTIELLE DE L'ARMOISE BLANCHE ET ÉVALUATION DE LEURS EFFET SUR LES NEMATODE A GALLES

HAMAIDI FATIMA ZOHRA, RIGHI KADA RIGHI, ASSIA FATIHA, MAISARA MUKHAIMAR

1 - Laboratoire de recherche sur les systèmes biologiques et géomatique (Algérie)

Email : hamaidizohra09@gmail.com

Résumé :

Les plantes aromatiques sont depuis longtemps utilisés en lutte biologique pour leurs huiles essentielles qu'on peut extraire. L'armoise blanche est une plante médicinale et aromatique qui pousse généralement à l'état sauvage mais se cultive très bien au jardin, elle est appelée couramment 'chih', c'est l'armoise la plus connue en Algérie. En effet la plante présente un taux de cellulose beaucoup moins élevé que ne laisse préjuger son aspect (17 à 33%), la matière sèche apporte entre 6 et 11% de matière protéique brute 72% est constituée d'acides aminés. Notre travail de recherche consiste à faire une extraction et analyse physico-chimiques d'une huile essentielle d'*Artemisia herba helba* et évaluer leurs effets sur les nematodes à Galles *Meloidogyne*. L'espèce d'*Artemisia herba helba* a été récoltée et séchée dans la wilaya de souk haras, le processus d'extraction a été réalisé selon la méthode d'hydrodistillation qui consiste à utiliser l'eau et la température. Parmi les analyses physiques réalisées la densité et l'indice de réfraction, concernant les analyses chimiques on a le pH, indice d'acide et la polarité. D'après les résultats obtenus concernant l'effet nématicide de cette huile qui était testé à différentes concentrations on conclut que l'armoise blanche a un effet sur la mortalité des larves de 2^{ème} stades de *Meloidogyne* en enregistrant une mortalité presque totale à une concentration de 800 µl qui est une dose très élevée.

Mots clés : *Artemisia herba helba*, huile essentielle, analyse chimique, Nématode

ROLE OF LANTHANUM DOPING ON STRUCTURAL AND OPTICAL PROPERTIES OF BaTiO₃ NANOPARTICLES SYNTHESIZED BY SOLGEL METHOD.

HAMDI DOUNIA (1), TALANTIKITE-TOUATI DJAHIDA

1 - Laboratoire de Genie de L'environnement (LGE) (Bejaia, Algeria), Faculté de Technologie (Bejaia 06000, Algeria Algérie)

Email : **hamdidounia14@gmail.com**

Résumé :

Barium titanate (BaTiO₃: BTO) is a semiconductor of perovskite structure, with a great material potential mainly due to its wide band gap which is very useful in electronic and optoelectronic applications . These properties can be improved by doping BaTiO₃ with rare Earth and especially with lanthanum (La³⁺). In this work, pure and doped barium titanate (BaTiO₃: x La) powders with varying La³⁺ content (x= 0, 2, 4, 6, 8, and 10 wt %) were synthesized by sol-gel technique and annealed at 800 °c /2h. The characterization of the structural and optical properties of these samples was performed by X-ray diffraction (XRD), Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) and UV-Visible spectrophotometry. X-ray diffraction and infrared spectroscopy confirmed the formation of BaTiO₃, the results showed that all samples crystallized under the cubic structure and allowed the determination of the crystallite size that was in the range of 29-48 nm. The band gaps of the samples were estimated from the UV-vis absorption and the effect of La³⁺ doping on the structural and optical properties was discussed in this study.

Mots clés : solgel synthesis, BaTiO₃, La³⁺ doping, Optical properties

SYNTHÈSE ET CARACTÉRISATION D'UN BIO-POLYMÈRE COMPOSITE POUR LA DÉPOLLUTION DES EAUX POLLUÉES.

HATTALI AHLEM (1), BOURAS OMAR (1), HASSAM KAOUTHER (1), KERKAR RAIHANA (1)

1 - laboratoire eau, environnement et développement durable(2E2D) (Algérie)

Email : **bensariahlem@gmail.com**

Résumé :

Ce travail est dédié à la synthèse d'une nouvelle génération des billes composites et magnétiques à base d'(oxy)hydroxydes de fer, de nanoparticules magnétiques et d'alginate de sodium destinée à la dépollution des eaux. Les billes préparées ont été caractérisées par des méthodes physico-chimiques pour déterminer le diamètre, la densité, le taux d'humidité, le taux de gonflement et le pH_{pzc}, des méthodes diffractométriques (DRX, FX), spectroscopiques (IRTF) et microscopiques (MEB). Les effets de temps de contact (adsorbant-adsorbat) ainsi que de la masse d'adsorbant ont été étudiés dans les tests de sorption du vert de méthyl. La modélisation de la cinétique de sorption par emploi des modèles (Pseudo Premier Ordre, Pseudo Second Ordre et Diffusion Intra Particulaire) ainsi que celle des isothermes de sorption par les modèles de Langmuir, Freundlich et Temkin ont été effectuées.

Mots clés : alginate de sodium, ferrofluid, (oxy)hydroxydes de fer, sorption, vert de méthyl.

EXPERIMENTAL STUDY OF THE EFFECT OF ROUGHNESS ON THE RELATIVE HEIGHT OF THE HYDRAULIC JUMP THRESHOLD DEVELOPED IN A COMPOSITE RECTANGULAR CHANNEL WITH A ROUGH MINOR BED.

HERRI IBTISSAM (1), KATEB SAMIR (2), GHOMRI ALI (3), KHECHIBA HAROUN (1), BESSER DJAMEL (1)

1 - Research Laboratory in Development of Renewable Energy in Arid Zones (UDERZA), University of El Oued, Department of Hydraulics and Civil Engineering University of El Oued. Algeria (Algérie),

2 - Research Laboratory in Exploitation and Development of Natural Resources in Arid Zones, University of Kasdi Merbah–Ouargla. Department of Hydraulics and Civil Engineering University of Ouargla. Algeria (Algérie),

3 - Research Laboratory in Underground and Surface Hydraulics, University of Biskra, Department of Hydraulics and Civil Engineering University of El Oued. Algeria (Algérie)

Email : i.herri@ensh.dz

Résumé :

This scientific study aims to experimentally analyze the variation of the relative characteristic S/h_1 as a function of the Froude number Fr , in the context of the development of the hydraulic jump in a rectangular channel with a composite cross-section and a rough minor bed. The study focuses on the effect of the roughness of the minor bed on this characteristic of the hydraulic jump. By analyzing experimental measurements, it is possible to develop an empirical approach of the form $f(S/h_1, Fr, \epsilon/D)$. An experimental analysis of this relationship is necessary to adjust it and highlight the effect of relative roughness (ϵ/D). This experimental approach will facilitate the design of hydraulic structures.

Mots clés : roughness, hydraulic jump, composite rectangular channel, minor bed roughness, energy dissipation basin.

THEORETICAL STUDY OF THE DEGRADATION MECHANISMS OF CEFADROXIL BY (AOP) PROCESSES AND KINETICS AND TOXICITY.

IBRIR N. (1), R. MASMOUDI (1), S. KHETTAF (1), A. DIBI (1)

Laboratory of Chemistry and Environmental Chemistry (LCCE)1
Department of Chemistry, Faculty of Matter Sciences, University of Batna1, Algeria

Email : nawel.ibrir@univ-batna.dz

Résumé :

Emerging contaminants such as pharmaceuticals that cannot be completely removed by traditional biological treatments are ubiquitously present in water bodies with detected concentrations ranging from ng L⁻¹ to mg L⁻¹. This type of Pollution is now recognized as an environmental concern in many countries in recent years. In this study, we investigated the degradation kinetics of a model pharmaceutical, cefadroxil (CDX), that it is an antibacterial antibiotic of the beta-lactam family of the 1st generation cephalosporin group via hydroxyl radical (•OH) and also the stability of the radicals generated as a result of H abstraction and OH addition. Moreover, the ecotoxicity assessments of CDX and its byproducts are estimated.

This study contributed to a better understanding on the degradation mechanisms of CDX and proposed the possibilities of the elimination of pharmaceuticals by applying AOP processes during wastewater treatment. We also calculated the thermodynamic behaviors for reactions of CDX/CDX- with radical (•OH) using the Density Functional Theory (DFT) with the hybrid functional B3LYP and 6-31+ G (d,p) basis set with CPCM solvation model.

Many molecular parameters have been studied to identify the reactive sites, our study has focused on the local and the global reactivity descriptors explaining the chemical reactivity, The study located also the reactive sites of cefadroxil on the basis of frontier electron densities HOMO and LUMO for each site. Further, DFT method was applied to investigate thermodynamics and kinetics of radical (•OH)oxidation of CDX and CDX-, including the enthalpies change (ΔH_{rxn}), free energy change (ΔG_{rxn}), and RSE for all the possible reaction pathways and indicate that the most common degradation pathways that include hydroxylation, decarboxylation, demethylation, and dealkylation.

Mots clés : DFT; Cefadroxil, Advanced oxidation processes, degradation mechanism, by-products.

LES SECRETS PHYTOCHIMIQUES DE LA TOMATE SÉCHÉE : UNE EXPLORATION DES COMPOSÉS BIOACTIFS

IDOUGHI KHOULOU, CHENNA HOUSSEM, FEKNOUS NESRINE, BOUMENDJEL MAHIEDDINE (1),
MESSARAH MAHFOUD (1)

1 - Laboratoire de Biochimie et de Toxicologie Environnementale (Faculté des Sciences,
Université Badji-Mokhtar, Annaba, B.P.12, 23000, Algérie Algérie)

Email : idoughikhouloud@gmail.com

Résumé :

La tomate séchée est un aliment populaire, utilisé dans de nombreuses cuisines à travers le monde. Outre son goût distinctif, elle est également reconnue pour ses propriétés nutritionnelles et ses bénéfices pour la santé, en partie dus à sa richesse en composés phénoliques et flavonoïdes, qui sont connus pour leurs effets antioxydants. Cette étude vise à évaluer l'effet de séchage sur la composition phytochimique de la tomate séchée et son potentiel antioxydant. Deux échantillons de tomates fraîches ont été soumis à un processus de séchage direct au soleil (à l'air libre), puis analysés pour déterminer les taux de phénols totaux et de flavonoïdes par des méthodes spectrophotométriques standard. L'activité antioxydante a été évaluée à l'aide de différentes méthodes in vitro, le test du DPPH (2,2-diphényl-1-picrylhydrazyle) et le test de FRAP (ferric reducing antioxidant power). Les résultats obtenus montrent une augmentation significative des taux de phénols totaux et de flavonoïdes dans les tomates séchées par rapport aux tomates fraîches. De plus, une augmentation notable du pouvoir antioxydant a été observée dans les tomates séchées, comme indiqué par les tests in vitro. Cette augmentation des composés phénoliques et flavonoïdes dans les tomates séchées est cohérente avec les études antérieures, qui suggèrent que le processus de séchage peut concentrer ces composés. Cette augmentation de la valeur nutritionnelle et de l'activité antioxydante pourrait avoir des implications positives pour la santé humaine, en renforçant la capacité de l'organisme à lutter contre les dommages oxydatifs. En conclusion, cette étude démontre que le séchage des tomates conduit à une augmentation significative des phénols totaux, des flavonoïdes et du pouvoir antioxydant. Ces résultats soulignent l'importance de la tomate séchée comme source potentiellement riche en composés bioactifs bénéfiques pour la santé.

Mots clés : phytochimie, tomate séchée, phénols et flavonoïdes, activité antioxydante, DPPH, FRAP

MYRTUS COMMUNIS L.: PHYTOPOWER

ISSAADI OUARDA,

1 - Research Laboratory of Biochemistry, Biophysics, Biomathematics and Scientometrics (L3BS)
Faculty of Natural Sciences and Life, University of Bejaia, (Algérie)

Email : ouarda.issaadi@univ-bejaia.dz

Résumé :

The study on *Myrtus communis* L. extracts, collected from North East Algeria, aimed to evaluate their antioxidant and antifungal properties. The leaves and fruits were identified and processed into fine powders, with chemicals sourced from Sigma for the analyses. Phenolic compounds were extracted using methanol, and their contents were measured by various established methods. The antioxidant activities were assessed through FRAP, DPPH, ABTS+, and hydrogen peroxide scavenging assays, while the antifungal activities were tested in vitro against *Aspergillus niger* and *Botrytis cinerea* using essential oils extracted by hydrodistillation. The results indicated that leaf extracts generally contained higher polyphenol, flavonoid, and flavonol content compared to fruits. The content of condensed tannins showed no significant difference between leaves and fruits but varied among samples from different locations. Anthocyanins were predominantly higher in fruits. The antioxidant assays revealed that both leaf and fruit extracts exhibited strong reducing power and scavenging activities, with no significant differences between them. However, geographical origin influenced the antioxidant capacity, highlighting the role of environmental factors in biosynthesis. The antioxidant activity was closely linked to the phenolic content, suggesting their contribution to the overall antioxidant properties. In terms of antifungal activity, the essential oils demonstrated strong efficacy, particularly against *Botrytis cinerea*, achieving total inhibition. *Aspergillus niger* was sensitive to both leaf and fruit extracts, though *Botrytis cinerea* showed resistance to some extent. The potent antifungal effects were attributed to the phenolic compounds in *Myrtus communis* L., known for their broad-spectrum antifungal properties. In conclusion, the study underscored the significant antioxidant and antifungal potential of *Myrtus communis* L. extracts. The findings suggested that the geographical origin plays a crucial role in determining the phytochemical content and biological activities of the plant. These properties indicate potential applications of the extracts in pharmaceuticals and as natural preservatives.

Mots clés : *Myrtus communis* L, Antioxidant properties, Antifungal activities, Phenolic compounds

DEVELOPMENT AND ANALYSIS OF ECO-FRIENDLY BENTONITE CLAY APPLICATION IN ADSORPTION OF CATIONIC AND ANIONIC DYES

JDIDI MARWA (1,2), BOUMEDIENE BOUNACEUR (1), NEJI BESBES (2) AND AMINA SARDI (1,3)

1 Macromolecular Physical Chemistry Laboratory, Department of Chemistry, University Oran1, AB. P.O. Box 1524, Oran, 31000, Algeria.

2 Laboratory of Composite Materials and Clay Minerals, Group of Green and Applied Organic Chemistry, National Center for Research in Materials Science, Technopole of Borj Cedria, Soliman, B.P 73, 8027, Tunisia.

3 University Hassiba Ben Bouali, Faculty of Exact Science and Computer Science, Department of Chemistry, Ouled Fares, 02010 Chlef, Algeria.

Email : **Jmarwa359@gmail.com**

Résumé :

Improving water quality is one of the major concerns of all living species. In recent years, a significant increase in pollution has been observed in the industry field. The presence of dye in waste water causes sustaitial threats to the environment [1,2], and has negative impacts not only on human health but also on health of other organism that are part of the ecosystem.

This study addresses the last developments in physical, chemical eco-fiendly biological and advanced strategies for the efficient removal of dye pollution in the environment.

Algeria surfactant-modified (Maghnite H⁺) clay originary of northwest of Algeria, was investigated for the availability of methylene Blue (MB) dye removal from aqueous solution [3,4]. It has been the subject of many research [5]. At the beginning, surfaces of bentonite clays were activated by an acid solution of selected concentration. Then, activated bentonite was modified using intercalation of surfactants cationic (Hexadecyltrimethylammonium bromide (HTAB) by an exchange reaction [6]. The next step, the intercalation of poly (vinyl alcohol) (PVA) [7]. Besides, the structural, textural and surface properties of clays before and after modification have been characterized by diffraction des rayons (DRX) and infrared spectroscopy (IR). In addition, Batch sorption experiments were carried to evaluate the influence of pH, contact time, initial dye concentration, and temperature: assess parameters that influence the adsorption process. Also, to understand the interaction of dye with adsorbent, Langmuir isotherm model was applied [8]. Finally, the results indicate that thesynthesize composite could be employed as low-cost material for the removal of dyes from wastewater: excellent adsorbent for cationic dyes.

Mots clés : Bentonite, Acid treatment, Adsorption ,dye removal, Waste water treatment, Environmental safety .

ENHANCING PHOSPHATE REMOVAL PERFORMANCE FROM WATER USING ZNAL-LDH@BIOCHAR COMPOSITE

KARA RACHA (1), HECINI LYNDIA (2), DHIRAR BEN SALEM (1), FOUZIA TOUAHRA (3), NOUREDDINE ROUAHNA (4), ABDELKADER OUAOUAK (1,4)

- 1- Research Laboratory in Subterranean and Surface Hydraulics, University of Biskra, PO Box 145, Biskra, 07000, Algeria.
- 2- Scientific and Technical Research Center for Arid Zones CRSTRA, University of Biskra, PO Box 145, Biskra 07000, Algeria³
- 3- Research Centre in Analytical Chemistry and Physics (CRAPC), BP 248, Algiers 16004, Algeria.
- 4Hydraulic and Civil Engineering Department, University of El-Oued, PO Box 789, El Oued, 39000, Algeria.

Email : racha.kara@univ-biskra.dz

Résumé :

Phosphorus (P) is a fundamental component of plant development and reproduction. Meanwhile, the excessive discharge of P from agricultural pollution and domestic sewage into the aquatic environment affects the problem of eutrophication, posing a serious threat to aquatic ecosystems. Adsorption, a common method widely used for removing phosphate from wastewater, is favored for its ease of use, high efficiency and low cost. Composites of layered double hydroxides and biochar, as a type of promising adsorbents, have been attracting more and more attention.

In our study, we selected the Palm Fibers to prepare biochar, and we synthesized ZnAl-LDH@biochar that can efficiently adsorb P via the coprecipitation method, which included calcination at 500 °C for 4 hours. The obtained ZnAl-LDH@biochar had surface area of 62,85 m²/g and was characterized using elemental analysis, TGA, XRD, FTIR and MEB. Batch adsorption studies were performed for the removal of P from aqueous solutions by varying the parameters such as initial solution pH, initial P concentrations and contact times. The experimental results showed that the adsorption of P on ZnAl-LDH@biochar composite was pH-dependent with the maximum P adsorption found in the pH range of 2-4. The adsorption data were then fitted by model equations such as Langmuir, Freundlich and Temkin isotherms and it was found that the Langmuir isotherm model best fitted the adsorption data with a maximum monolayer adsorption capacity of 24,67 mg/g. Overall, it can be concluded that LDH@Biochar can be an alternative economic material to more costly adsorbents used for anionic micropollutants removal in wastewater treatment processes.

Mots clés : layered double hydroxide, biochar, composite, phosphorus, adsorption, wastewater

26-27/10/2024

ACTIVITÉS ANTIFALCÉMIANTE ET ANTI-HÉMOLYTIQUE DE TROIS PLANTES MÉDICINALES AU NIGER : ANNONA SENEGALENSIS L., BOSCIA SENEGALENSIS (PERS.) LAM. ET AMPELOCISSUS AFRICANA (LOUR.) MERR.

KASSOUM DJATAOU BAHARI, HASSANE BOUREIMA (1), SALEY KARIM (2), IBRAH LANDI (3), ABDOULAYE OUSMANE (1) HAMIDOU MAIDAGI (1)

Enseignant-Chercheur, Assistant Chimie Analytique et Bromatologie. Département de Pharmacie, Faculté de Sciences de la Santé (FSS) Université Dan Dicko Dankoulodo de Maradi (UDDM/Niger)

Email : kassoumdb@gmail.com

Résumé :

L'objectif est d'évaluer la phytochimie et d'établir l'activité antifalcémiant et anti hémolytique ainsi que la toxicité aiguë de ces trois plantes. Il s'agit d'une étude prospective expérimentale, notre matériel végétal est constitué de : feuilles et écorce des racines d'*Annona senegalensis* L., feuilles et écorce des racines de *Boscia senegalensis* (Pers) Lam. et racines d'*Ampelocissus africana* (Lour) Merr.

Une seule méthode d'extraction est utilisée (macération à éthanol 80%) pour les cinq échantillons. L'étude phytochimique a été faite grâce aux réactions de caractérisation en tube. Le taux en polyphénols et flavonoïdes a été déterminé respectivement par la méthode de Folin-Ciocalteu et de trichlorure d'aluminium. Les effets antifalcémiants et anti hémolytique ont été établis avec les hématies falciformes (SS) en présence de métabisulfite de sodium. Le test limite de la directive OCDE (2022) a été adopté pour la détermination de la toxicité.

Le rendement d'extraction éthanolique d'ERBS, FBS, ERAS, FAS et RAA est respectivement de 8.2%, 15.4%, 21.1%, 26% et 26%. Les chromatogrammes obtenus nous indiquent que l'éthanol solubilise plus les échantillons que l'eau. L'étude phytochimique révèle en général la présence des alcaloïdes, tanins, flavonoïdes, triterpènes, glycosides cardiotoniques, saponines et des composés réducteurs. Tous les échantillons ont montré un effet antifalcémiant mais les feuilles d'*Annona senegalensis* montrent le pourcentage d'activité antifalcémiant le plus élevé (89.55%) à 50mg/ml. L'effet anti hémolytique a été mis en évidence dans tous les échantillons par l'inhibition de l'hémolyse en présence d'un hémolysant. Les résultats de la toxicité suggèrent que les extraits aqueux des feuilles d'*Annona senegalensis* et l'écorce des racines de *Boscia senegalensis* étaient non toxiques pour les rats.

Mots clés : *Annona senegalensis*, *Boscia senegalensis*, *Ampelocissus africana*, activité antifalcémiant, toxicité, Maradi Niger.

INFLUENCE OF VARIOUS TYPES OF METAL-ORGANIC FRAMEWORKS (MOFs) ON THE STRUCTURE AND WATER VAPOR BARRIER PROPERTIES OF PBAT

KERAKRA SAMIA (1), BADIAA BOUIDER (1), GUIRA MERIEM (1), PONÇOT MARC , HABI ABDERRAHMANE (1)

- 1 - Université Abderrahmane Mira, Faculté de Technologie, Laboratoire des Matériaux Organiques (LMO), Route de Targa Ouzemour, 06000, Bejaia, Algeria (Algérie),
2 - Université de Lorraine, CNRS, IJL, Nancy, France (France)

Email : samia.kerakra@univ-bejaia.dz

Résumé :

The search for innovative materials that combine eco-friendly attributes and potential engineering applications is expanding every day. Polymer/metal-organic framework (MOF) composites are a current area of study because of their wide variety of potential uses. In this study, the structure-property relationships of PBAT/M-MOF composites (M = Cu, Zn, Li, and Fe) were investigated. Various types of MOFs were synthesized at room temperature and then incorporated into poly(butylene adipate-co-terephthalate) (PBAT) in a solution state to prepare composites. The obtained composites were examined using Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), thermogravimetric analysis (TGA), and atomic force microscopy (AFM). The results demonstrated a good dispersion of various MOFs within the PBAT matrix, leading to enhanced barrier properties.

Mots clés : MOFs, PBAT, nanocomposite, barrier properties.

26-27/10/2024

IN SILICO DRUG DISCOVERY OF NOVEL DIAMINODIHYDROTRIAZINE CHEMICALS AS POTENTIAL ANTIMALARIAL AGENTS BASED ON 3D-QSAR, ADME/T AND DRUG-LIKENESS EVALUATION

KHELFA NEDJLA 1,*, SALAH BELAIDI (1), SAMIR CHTITA (2)

1Group of Computational and pharmaceutical Chemistry, LMCE Laboratory, Department of chemistry, Faculty of sciences, University of Biskra, 07000, Biskra, Algeria

2Laboratory of Analytical and Molecular Chemistry, Faculty of sciences Ben M'Sik, Hassan II University of Casablanca, Sidi Othmane, Box 7955, Casablanca, Morocco.

Email : nadjla.khalifa@univ-biskra.dz

Résumé :

Plasmodium falciparum dihydrofolate reductase (PDHFR) as emerged as a hopeful therapeutic target for antimalarial treatments. Thus, the purpose of this study is to forecast potential new malaria medications. In the present paper, a three-dimensional quantitative structure-activity relationship (3D-QSAR), In silico ADMET and pharmacokinetic study and molecular docking were applied to investigate the binding between PDHFR and diaminodihydrotriazine inhibitor to design novel antimalarial agents. The best 3D-QSAR models were performed using Comparative Molecular Similarity Indices Analysis (CoMSIA) with high values of Q^2 of 0.553, as well as values of R^2 = 0.981, respectively. Y-randomization and external validation were used to assess the models' prediction power using a test set of 9 chemicals with a projected determination coefficient R_{pred}^2 of 0.787. Furthermore, the ADMET and drug likeness profiles of high potent compounds were analyzed with a good outcomes. This study provides leadership in to design of new potent molecules.

Mots clés : Diaminodihydrotriazine, PDHFR, 3D-QSAR, CoMSIA, ADMET, drug likeness.

LE ROLE DE L'ACIDE OXALIQUE DANS L'ISOLEMENT DE L'ACIDE ASCORBIQUE DE PETROSELINUM CRISPUM

KOLLI ELHADJ (1), AIMENE YASSINE (2), KEDJADJA ALLAOUA (3), ZEROUAL SAMIR (4)

1 - Laboratoire des Silicates, Polymères et des Nanocomposites, Université 08 Mai 1945 Guelma 24000 (Algérie),

2 - Laboratoire de Chimie Physique, Université 08 Mai 1945 Guelma 24000 (Algérie),

3 - Département de chimie, Faculté des Sciences, Université 20 Aout 1955 Skikda 21000 (Algérie),

4 - Laboratory of Genetics, Biotechnology and Valorization of Bio-resources, Faculty of Exact Sciences and Nature Sciences and the Life, University Mohamed Khider, Biskra (Algérie)

Email : kollielhadj@gmail.com

Résumé :

La vitamine C ou l'acide ascorbique, est une vitamine nécessaire pour la croissance, le développement et le maintien de notre santé, elle est reconnue comme un grand puissant antioxydant et joue un rôle important dans la protection des cellules contre les dommages causés par les radicaux libres [1], elle est présente dans les agrumes, les fruits, les légumes frais et les plantes [2]. L'isolement de la vitamine C à l'état pur nécessite un mode opératoire particulier, car elle est facilement oxydée par le dioxygène de l'air. A cet effet, nous avons procédé à l'extraction du matériel végétal frais et broyé des parties aériennes de *Petroselinum crispum* avec de l'eau distillée en utilisant le protocole indiqué par Jidimma A. W, basé sur l'acide oxalique comme un facteur auxiliaire [3], ce protocole nous a permis de préparer un extrait très riche en acide ascorbique. Pour confirmer la présence de la vitamine C dans notre extrait nous avons effectué une analyse par le spectrophotomètre infrarouge (IR), cette analyse montre la présence des fonctions représentant dans la structure de l'acide ascorbique notamment la longueur d'onde à 1621 cm⁻¹ qui correspond à la vibration d'élongation des alcènes. Cette méthode confirme bien la présence de la vitamine C dans notre extrait d'une façon majoritaire et elle n'est pas oxydée par le dioxygène de l'air. Références [1] Eunjoo L.; Hun-Young P.; Sung-Woo K.; Jisu K.; Kiwon L., Vitamin C and glutathione supplementation: a review of their additive effects on exercise performance, *Physical Activity and Nutrition*. 2023; 27, 036-043. [2] Thomas K.; Vitamin C: From nutrition to oxygen sensing and epigenetics, *Redox Biology*. 2023, 63, 102753. [3] Jidimma A. W.; Joseph A. L.; Alexander O. E.; Chukuka A., A comparative study: The effects of oxalic acid in the extraction and isolation of ascorbic acid (vitamin c), *anal chem ind j*, 2021, 21, 172.

Mots clés : Acide ascorbique, Acide oxalique, *Petroselinum crispum*.

26-27/10/2024

THEORETICAL STUDY OF THE STRUCTURAL, ELECTRONIC AND ENERGETIC PROPERTIES OF GLDA-ALKALI METAL COMPLEXES.

LAKEHAL SALIMA (1), LAKEHAL AICHA (2), CHERMETTE HENRY (3)

1 - Earth and Universe Sciences Institute, University of Batna2, Batna, Algeria (Algérie),

2 - Faculty of Technical Sciences, University of Batna2, Batna, Algeria (Algérie),

3 - University of Lyon, Claude Bernard Lyon 1 University, Institute of Analytical Sciences, CNRS UMR 5280, 69622 Villeurbanne Cedex, France (France)

Email : lekehal-salima@yahoo.fr

Résumé :

N,N-Dicarboxymethyl glutamic acid (GLDA) is an important chelating agents.. Non-covalent interactions between GLDA complexed with alkali metals Li^+ , Na^+ , K^+ and Rb^+ , were investigated with density functional theory using PBE-D3 functional. Conformational possibilities of GLDA were explored with a varying number of carboxylic pendant arms of GLDA in close proximity to the ions. It is found that the case in which four arms of GLDA are interacting with ions is more stable than other conformations. The objective of this study was to explore the electronic structure properties upon complexation of alkali metals Li^+ Na^+ , K^+ and Rb^+ with a GLDA chelator. Interaction energies and relaxation energies, show that the stability of GLDA, complexed with alkali metals decreases down the group of the periodic table. Implicit water solvation affects the complexation of GLDA—ions leading to decreases in the stability of the complexes.

Mots clés : GLDA, chelating, density functional theory.

26-27/10/2024

THEORETICAL STUDY OF THE STRUCTURAL, ELECTRONIC AND ENERGETIC PROPERTIES OF GLDA-ALKALI METAL COMPLEXES.

LAKEHAL SALIMA (1), AICHA LAKEHAL (2), HENRY CHERMETTE (3)

1 Earth and Universe Sciences Institute, University of Batna2, Batna, Algeria

2 Faculty of Technical Sciences, University of Batna2, Batna, Algeria

3 University of Lyon, Claude Bernard Lyon 1 University, Institute of Analytical Sciences, CNRS UMR 5280, 69622 Villeurbanne Cedex, France

Email : lakehal.salima@yahoo.fr

Résumé :

N,N-Dicarboxymethyl glutamic acid (GLDA) is an important chelating agents.. Non-covalent interactions between GLDA complexed with alkali metals Li^+ , Na^+ , K^+ and Rb^+ , were investigated with density functional theory using PBE-D3 functional. Conformational possibilities of GLDA were explored with a varying number of carboxylic pendant arms of GLDA in close proximity to the ions. It is found that the case in which four arms of GLDA are interacting with ions is more stable than other conformations.

The objective of this study was to explore the electronic structure properties upon complexation of alkali metals Li^+ , Na^+ , K^+ and Rb^+ with a GLDA chelator. Interaction energies and relaxation energies, show that the stability of GLDA, complexed with alkali metals decreases down the group of the periodic table. Implicit water solvation affects the complexation of GLDA—ions leading to decreases in the stability of the complexes.

Mots clés :

3D PRINTING OF POLYMER COMPOSITES BASED ON PHOTSENSITIVE RESIN BY STEREOGRAPHY SLA

LAMIRI LEILA (1), BOUSSAHA BOUCHOUL (1), MOHAMED HAMIDOUCHE (1), ABDELGHANI KENZOUR(1), HASSAN HAMMOUCHI (1), RADHIA KHOUATRA (1), KHEMLICHE HAMZA, OUFIA BELGHERBI (1), ASSIA TOUNSI (1), KATIB HAMLAOUI (1)

1 - Research Center in Industrial Technologies (CRTI), P.O. Box 64 Cheraga 16014. Algiers.
ALGERIA. (Algérie)

Email : **lamiri.lila@yahoo.fr**

Résumé :

The Additive manufacturing (AM) alias 3D printing technology in the fabrication of advanced polymer composites is becoming increasingly evident, where they were used widely in several industries such as structural composites, thermal packaging, electrical devices, optoelectronics, biomedical implants and energy storage. AM technologies commonly use polymers and composites, these polymers deposited layer-by-layer using Computer Aided Design (CAD). In this study we used Stereolithography (SLA) was the most popular rapid prototyping technique, and this system builds a solid piece from a CAD model by sketching the cross section of the product with a laser beam that cures liquid photopolymer simultaneously. The specimens had been printed based on 3DM ABS resin using the DLP Station 5-405 method. The optical and mechanical properties of ABS specimens printed.

Mots clés : 3DM ABS resin, Stereolithography 3D printing, mechanical properties

LES CARACTÉRISTIQUES PHYSIQUES ET LA COMPOSITION MINÉRALE DE L'ARGILE JAUNE NATUREL

LARKAT KARIMA (1), BENYAHIA AZZEDINE , DEGHEFEL NADIR , ALLAL MEFTAH

1 - Laboratoire des matériaux inorganique LMI département de chimie, faculté des sciences, université Mohamed Boudiaf – M'sila, Algérie. (Algérie)

Email : karima.larkat@univ-msila.dz

Résumé :

L'argile est utilisée dans différents domaines, tels que le bâtiment, la pharmacie, l'agriculture, etc., ce qui incite les spécialistes et les scientifiques à étudier les caractéristiques physicochimiques des argiles et leur composition minérale afin d'améliorer leur utilisation dans leurs domaines propres. Étant donné l'importance de cette étude dans le domaine d'application, nous avons cherché à examiner la composition minérale des argiles naturelles et leurs caractéristiques physicochimiques. Les caractéristiques physicochimiques analysées révèlent qu'une argile jaune avec un pH de 7,42 est produite, sans doute en raison de sels solubles et basiques, comme des bicarbonates ou des silicates de métaux alcalins, qui sont généralement présents dans la composition de l'argile. L'argile jaune a une valeur d'humidité (H %) plus basse (1,36 %), ce qui suggère qu'elle n'est pas hygroscopique. L'argile jaune (1,52 %) présente une légère augmentation de l'indice de gonflement Ig. Les échantillons d'argile sont classifiés en sable fin, sable moyen et sable grossier en fonction de leur granulométrie et de leur diamètre. FTIR a permis de déterminer la méthode de caractérisation de l'argile en accord avec les résultats de l'analyse. On peut confirmer l'existence de kaolinite et de quartz (en observant des signatures de vibration de déformation de liaison Si-O et d'élongation Si-O du quartz à 470,4 cm⁻¹, 712 cm⁻¹ et 798,4 cm⁻¹). Kaolinite ou quartz du groupe Si (à 1025 cm⁻¹). L'analyse thermogravimétrique ATG a été utilisée pour surveiller la stabilité thermique de l'argile, ce qui a contribué à observer la diminution de la masse de l'échantillon en fonction de la température (la perte totale d'argile jaune était d'environ 5,56 %). Les phases minérales présentes dans un échantillon peuvent être identifiées par diffraction des rayons X (DRX) et, si cela est possible, déterminées qualitativement par les minéraux argileux. Les échantillons ont subi des études de diffraction des rayons X.

Mots clés : l'argile, propriétés physico, chimiques, compositions minéralogique.

**ETUDE TECHNICO-ÉCONOMIQUE COMPARATIVE DE LA SYNTHÈSE DE DEUX
INHIBITEURS DE CORROSION DE TYPE SULFONATES DE PÉTROLE OBTENUS
SÉPARÉMENT AVEC L'OLÉUM ET L'ACIDE SULFURIQUE.**

KAHINA LAZELA 1,2, ABDELLAH KHELIFA (1), OMAR BOULEDROUA (2) ET SALAH EDDINE AOUADI (1)

1 - Laboratoire de Génie Chimique, Faculté de Technologie, Université de Blida 1, BP 270 09000, Blida, Algérie. (Algérie)

Email : lazela1996kahina@gmail.com

Résumé :

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la synthèse des sulfonates de pétrole comme inhibiteurs de corrosion : il s'agit de sulfonates de gasoil (SGO) et sulfonates de reformat (SRF) obtenus à partir du gasoil (GO) et de reformat (RF) en utilisant séparément deux réactifs de sulfonation directe : oléum (33%) et acide sulfurique concentré (98%). Différents rapports pétrole/réactif ont été testés dans des conditions identiques. Les méthodes spectroscopiques (infrarouge, FTIR et ultraviolet, UV) ont été employées pour valider les structures des produits obtenus. D'autres propriétés caractéristiques telles que : CMC et la solubilité ont été évaluées par des techniques appropriées. Les résultats obtenus montrent que, en considérant des rapports analogues, de ([100 g de pétrole] / [10 mL de réactif]), les rendements obtenus avec l'oléum sont plus élevés qu'avec l'acide sulfurique, néanmoins la consommation en oléum est nettement plus coûteuse. Enfin, nos expériences montrent consécutivement que l'emploi d'une quantité d'acide sulfurique de coût comparable donne lieu à des rendements franchement plus importants. Autrement dit, dans le cas du SGO, un rapport de ([100 g de GO] / [10 mL de réactif]), donne un rendement de 8,71% avec H₂S₂O₇ et 4,01% avec H₂SO₄, alors qu'avec une quantité de H₂SO₄ ayant un coût identique à celui de 10 mL de H₂S₂O₇, à savoir 104,8 mL, le rendement obtenu est de 58,1%. La conclusion est encore plus frappante pour le cas de SRF. les tests de caractérisation : CMC, solubilité, FTIR et UV ont montrés des propriétés identiques quant à tous les produits obtenus avec différents rapports de réactifs.

Mots clés : synthèse organique, sulfonates de pétrole, sulfonation, oléum, acide sulfurique concentré, aspect technico, économique.

ETUDE THÉORIQUE DES COMPLEXES BIMÉTALLIQUES À BASE DE TITANE

LEBBAL SAMEH,

Department of Sciences and technology, Faculty of technology, University of Batna 2, Alleys 53,
Constantine Avenue. Fesdis, Batna 05078, Algeria

Email : sa.lebbal@univ-batna2.dz

Résumé :

L'analyse rationnelle des paramètres géométriques et électroniques des composés bimétalliques à base de titane et ruthénium a été effectuée au moyen de la DFT et l'AIM[1]. Les résultats théoriques ont montré que la réduction affectait un seul centre métallique ; le titane.

La comparaison des trois modèles a permis de montrer que la substitution du cyclohexyl aidait la molécule à être plus facilement réductibles.

L'effet de l'allongement du pont carboné et la substitution du phényle est insignifiante dans l'analyse spectroscopique.

Mots clés : DFT ,AIM, paramètres géométriques, titane.

**IDENTIFICATION AND INVESTIGATION OF POLYSACCHARIDES IN MEAT PRODUCTS
WITH HISTOCHEMICAL TECHNIQUES**

LEKEHAL SALIHA (1*), SALIMA LAKEHAL (2)

1 ESPA Laboratory, department of veterinary sciences, Institute of veterinary science and agricultural sciences, university of Batna 1, Algeria.

2 Institute of earth and universe Sciences

Email : **saliha.lakehaluniv-batna.dz.**

Résumé :

Meat consumption has increased significantly over the world in recent years. Because of the economic worth of meat, it is conceivable to incorporate less attractive components in meat products. To describe the nutritional value of meat products, it is important to know its elements of composition. Outside of the meat and fats, various additives can be observed on the labels meat products among other starch.

The objective of this study is to use histochemical techniques to detect specific additives that have been added fraudulently, particularly starch. As a result, twenty different meat products were chosen at random to be studied using a variety of histochemical techniques on sections of paraffin-processed. The PAS-Calleja histochemical methodology has effectively established itself as a unique method of identifying sugar addition fraud. While the Lugol-Calleja staining is specialized to starch analysis.

Mots clés : meat products, control, histochemistry, polysaccharides.

COMPLEXES OF EDDM AND EDDG

LEMMOUCHI MERIEM (1),

1 - Ecole national des énergies renouvelables Batna (Algérie)

Email : meriem.lemmouchi@hns-re2sd.dz

Résumé :

Complexes of EDDM and EDDG Heavy metal contamination has posed significant environmental challenges for many decades. Metals like lead, mercury, cadmium, and chromium are harmful to living organisms and can cause severe harm to ecosystems and human health. As a solution, aminopolycarboxylic acids (APCs) are extensively employed ligands in coordination chemistry to trap heavy metals. With their multiple coordination sites, APCs can form stable complexes with metal ions, typically soluble in water, easing their application across various domains.[1] However, the reactivity of heavy metals with APC compounds is an active area of research. There are still unresolved questions regarding the kinetics of complex formation and dissociation, as well as the factors influencing their stability. Understanding these reaction mechanisms is essential for optimizing the use of APC complexes in applications for the capture and recovery of heavy metals. [1] Due to the low biodegradability and toxicity of traditional APCs such as EDTA and NTA, it has become highly desirable to substitute them with biodegradable and environmentally friendly chelating agents such as EDDM and EDDG. Currently, several industrial research groups are investigating whether new agents such as EDDS4-, EDDM4-, EDDG4-, etc., can replace the previous generation of chelating agents like EDTA4- and NTA3-. Additionally, they are examining whether the reaction conditions used in various industries that utilize EDTA4- need to be modified to achieve maximum efficiency with easily biodegradable replacement ligands. The answers lie in the predominant chemical speciation in industrial processes and the reaction kinetics between these chelants and metal ions [2]. References [1] Lewis, K. M; Greene, C L; Sattler, S. A.; Youn, B; Xun, L.;Kang, C. The Structural Basis of the Binding of Various Aminopolycarboxylates by the Periplasmic EDTA-Binding Protein EppafromChelativorans Sp. BNC1. Int. J. Mol. Sci. 2020, 21, 3940 [2]: Joanne.S; Whitburn.D.S; Wilkinson & David R. Williams(1999) Chemical speciation of ethylenediamine-N,N'- disuccinic acid (EDDS) and its metal complexes in solution, Chemical Speciation & Bioavailability, 11:3, 85-93, DOI: 10.3184/095422999782775663

Mots clés : EDDM, EDDG, DFT

26-27/10/2024

MECHANISTIC STUDIES OF PHENOLIC ANTIOXIDANT IN REACTION WITH HYDROXYL AND SUPEROXIDE RADICALS

LOUANAS HANANE, DALILA HAMMOUTENE

Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB, BP32 El Alia, 16111 Bab Ezzouar, Alger, Algeria.

Email : hananelouanas@univ-batna2.dz

Résumé :

Free radicals are chemical compounds with unpaired electrons. The most frequently encountered free radicals include superoxide anion radical (O_2^-), hydroxyl radical ($HO\cdot$), alkyl radical ($R\cdot$), alkoxy radical ($RO\cdot$), peroxy radical ($ROO\cdot$) and nitric oxide radical ($NO\cdot$). Owing to the great potential of free radicals to react with various compounds by electron transfer, proton transfer, H-atom abstraction or addition reaction, they are considered responsible for a series of undesired processes, such as aging, material degradation, food deterioration and many diseases [1]. Therefore, much interest has been focused on finding antioxidants to prevent the radical induced impairments in chemical, food and pharmaceutical industries [2].

Hydroxytyrosol and Tyrosol are phenolic antioxidants that exist in a variety of natural sources. The main source in human diet is olive oil [3]. These two molecules are particularly interesting, and they are widely been used in the pharmaceutical field (e.g. the cardiovascular treatment and treatment against aging) because they are good scavengers of Reactive Oxygen Species (ROS) like hydroxyl ($HO\cdot$) and superoxide (O_2^-) radicals [4].

This work is a theoretical study using quantum chemistry methods for studding of the hydroxytyrosol and the tyrosol with the radicalizing reactive species of oxygen ($HO\cdot$ and O_2^-) by considering approaches of the radical towards potentially interesting sites of attacks.

Mots clés : hydroxytyrosol, tyrosol, activity antioxidant, O_2^- , $HO\cdot$, DFT.

26-27/10/2024

ETUDE ÉNERGÉTIQUE PAR LA MÉTHODE DFT-D3/CCPVDZ DE LA RÉACTION DE COMPLEXATION DE P-AMINO BENZOATE DE MÉTHYLE PAR LA α -CYCLODEXTRINE

MADI FATIHA, MADI FATIHA ,NOUAR LEILA BADI SONIA (1)

1 - Laboratoire de Chimie Computationnelle et de Nanostructures, Université du 8 Mai 1945, Guelma (Algérie)

Email : **badisonia2004@yahoo.fr**

Résumé :

Dans ce travail, la fonctionnelle de la théorie de la densité B3LYP-D3 a été utilisée avec la base cc-pVDZ pour étudier la stabilité et les propriétés structurales des p-aminobenzoate de méthyle (G1) et leur complexe d'inclusion avec la α -cyclodextrine (G1@ α -CD) dans le vide et dans l'eau en utilisant le modèle (IEFPCM). Les résultats de l'optimisation géométrique montrent que le complexe formé est stable et énergétiquement favorable et que le cycle aromatique est complètement inclus dans la cavité de cyclodextrine. Ensuite, le calcul des paramètres thermodynamiques montre que la réaction de complexation est exothermique et se produit spontanément à température ambiante.

Mots clés : DFT, D3, paminobenzoate de méthyle, la α cyclodextrine, complexe d'inclusion

CHEMICAL MODIFICATION OF POTATO STARCH USING A WEAK ALKALINE

MAHIEDDINE CHERIFA (1), NADJEMI BOUBEKEUR

1 - LEDTEGE (Algérie)

Email : mahieddinec@gmail.com

Résumé :

Chemical structure of starch as a polymer alcohol assisted to be modified by esterification reaction [1], with using an alkaline catalyst [2] in specific condition to produce acetyl starch. Hence, the extracted starch of the local Spunta potato seeds was modified with anhydride acetic $(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O}$ and catalysed by a stoichiometric amount of sodium bicarbonate in acetic acid at room temperature (25°C). The esterification of potato starch show two impact point in time approval to the high degree of substitution (DS), which was varied in linear correlation $r^2=0.97$ (20min) and $r^2=0.99$ (40min) with p-value

Mots clés : Starch, chemical modification, esterification, anhydrid acetic

AGING SRTUDY OF NEW COMPOSITE

MAKHLOUF AZZEDINE (1), FATIMA ZAHRA MAKHLOUF

1 - Abbès Laghrour University Khenchela (Algérie)

Email : makhlouf_azzedine@univ-khenchela.dz

Résumé :

A composite material is the result of the combination of two or more different materials whose aim is to improve the properties of these components taken each for themselves. Which offers numerous advantages, namely better mechanical properties, lightness, good resistance to corrosive agents, etc. Following the reinforcement, the field of use of composite materials is expanding for different disciplines such as the automobile, aerospace, construction and the sports and leisure sector. But the manufacture of composite materials is not so simple, it is complex and requires know-how and mastery of specific processes, such as the mixing law, lamination, compression molding, to obtain the desired product. The incorporation of natural fibers into organic matrices is part of this trend which aims for a durable and less expensive product. Our work is dedicated to the study of the water absorption of a new composite (Epoxy matrix /% Date Palm Fibers); that is to say: the study of the aging of this composite in a humid environment. Water can penetrate composite materials through the interstices between the fibers and the organic matrix, which weakens the mechanical properties of these materials and subsequently limits their range of application. Significant water absorption can cause undesirable damages such as: chemical degradation, reduction in mechanical strength, increased weight. Controlling water absorption is therefore crucial in manufacturing and recommending the use of surface treatments and protective coating to reduce the water permeability of composite materials. The results of our study showed that water absorption increased with the fiber filler incorporated in the matrix and also with the immersion time in the humid environment. The absorption curves revealed that the absorption process was fast at the beginning of the experiments reaching saturation in an immersion time close to 408 h. Therefore, the use of the RSM approach can reliably predict the evolution of the absorbed water content of biocomposites (Epoxy/% Date Palm Fibers).

Mots clés : Epoxy Matrix, Date Palm Fibers, Composite Material, Water Absorption, RSM.

26-27/10/2024

**SCREEN-PRINTED ELECTRODE MODIFIED WITH PT-NANOPARTICLES AS AN
ADVANCED MATERIAL FOR SIMULTANEOUS QUANTIFICATION OF ASCORBIC ACID
AND DOPAMINE**

MAKHOLOUF FATIMA ZAHRA (1), CHELAGHMIA MOHAMED LYAMINE (1), MAKHOLOUF AZZEDINE (2)

1 - University May 8, 1945 Guelma, Laboratory of Industrial Analysis and Materials Engineering (Algérie),

2 - University Abbes Laghrour Khenchela (Algérie)

Email : fatima.zahra.makhlouf.1998@gmail.com

Résumé :

Ascorbic acid (AA) and dopamine (DA) are essential for human health, playing significant roles as an antioxidant and neurotransmitter, respectively. Excessive AA can lead to cellular damage and gastrointestinal discomfort, while abnormal DA levels are associated with neurological disorders such as Parkinson's and Alzheimer's. Both molecules coexist in biological systems and share similar oxidation potentials, making their simultaneous electrochemical detection challenging. The demand for a sensitive and reliable electrochemical sensor for concurrent AA and DA detection is high, particularly in neurochemistry and biomedical diagnostics. In this study, we present a novel electrochemical sensor that utilizes screen-printed electrodes (SPE) modified with platinum nanoparticles (PtNPs). The PtNPs were characterized by field emission scanning electron microscopy (FE-SEM), energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX), atomic force microscopy (AFM), and various electrochemical methods. The PtNPs/SPE sensor demonstrated excellent sensitivity and selectivity for the simultaneous detection of AA and DA, showcasing enhanced performance compared to traditional sensors with large linear ranges and small detection limits.

Mots clés : Platinum nanoparticles, screen printed electrode, electrochemical sensor, dopamine, ascorbic acid.

GREEN BIOSYNTHESIS OF SILVER NANOPARTICLES USING MACLURA POMIFERA FRUIT EXTRACT

MAKHOLOUF HAMDI (1,2), DJAMAI WISSAM (1), BEN AISSA KHALIDA (1), BRAHIMI MERIEM (1),
DJAMAI IKRAM (1)

1 - Spectrochemistry and Structural Pharmacology laboratory, Department of Chemistry, Faculty of Sciences, University of Tlemcen, PB 119, Tlemcen 13000, Algeria (Algérie), 2 - Ecole Normale Supérieure de Bousaada Cité gazza Bousaada M'sila (Algérie)

Email : hamdi.mekhlouf@gmail.com

Résumé :

Medicinal plants are perceived as effective and play a crucial role in the evolution of medicine and pharmacology. They have been used for centuries and form the basis of traditional healthcare systems in many cultures worldwide. According to the World Health Organisation (WHO 2013), approximately 80% of the global population uses herbal remedies for primary healthcare. This widespread use is attributed to the variety and efficacy of bioactive compounds such as various forms of polyphenols (flavonoids, tannins, terpenes, etc.), sugars, essential oils, and others found in plants, offering solutions for a variety of diseases and health issues. The objectives were to study the potential of *Maclura pomifera* fruit in green synthesis of nanoparticles (NPs). This research focused on extracting bioactive compounds from the fruit of *Maclura pomifera*, including polyphenols, flavonoids, and sugars. The extraction process involved several steps, beginning with the preparation of the freshly collected fruit samples, which were dried at a temperature 45°C, powdered and stocked in darkness, followed by the extraction of the compounds using appropriate solvents. The antioxidant properties of these extracts were then evaluated using two distinct methods: the Ferric Reducing Antioxidant Power (FRAP) assay and the 2,2-Diphenyl-1-picrylhydrazyl (DPPH) assay. The formation of nanoparticles from the aqueous and methanolic extracts was investigated in the second part of this study. This involved synthesizing nanoparticles and subsequently analyzing them using various techniques. UV-Visible spectroscopy was employed to examine the optical properties, infrared (IR) spectroscopy to identify functional groups, X-ray diffraction (XRD) to determine the crystalline structure, and scanning electron microscopy (SEM) to observe the morphology and size of the nanoparticles. The characterization of the silver nanoparticles showed an absorption peak at 450 nm, identified functional groups involved in the reduction of Ag⁺, and confirmed a face-centered cubic (FCC) crystalline structure. These comprehensive analyses provided insights into the properties and potential applications of nanoparticles synthesized from *Maclura Pomifera* fruit. Therefore, this plant and extraction method seems to be attractive for industrial scale production of NPs.

Mots clés : *Maclura Pomifera*, Bioactive compounds, Antioxidant activity, Nanoparticles, Green biosynthesis

**ETUDE DES PROPRIÉTÉS THERMODYNAMIQUES DES ACIDES
AMINOPOLYCARBOXYLATES BIODÉGRADABLES : CALCULS DFT.**

MECHACHTI FATIMA^{1,2}, LAKEHAL AICHA (2), LAKEHAL SALIMA (3, 4)

1- département de chimie, faculté des sciences, université de BATNA1

2- département des sciences techniques, faculté des sciences techniques, université de BATNA2

3- Département des sciences de la terre et de l'univers, Université Batna2

4Laboratoire de chimie des matériaux et des vivants: Activité, Réactivité

Email : fatima.mechachti@univ-batna.dz

Résumé :

Les acides aminopolycarboxylates (APC) sont un ensemble divers de ligands multidentés capables de se coordonner à une large gamme de cations métalliques, ils sont utilisés pour éliminer les métaux lourds du sol et des eaux [1], en diagnostic radiographie et en imagerie par résonance magnétique[2], et en tant qu'agent de blanchiment dans l'industrie photographique[3]. Vu que Les APC sont très polaires et partiellement non dégradables, et ils sont libérés dans l'environnement aquatique en quantités significatives, Le développement de ligand écologiques avec une excellente performance chélatante est l'objectif de la conception de la nouvelle génération d'acides aminopolycarboxyliques. L'acide GLDA(l'acideglutamiqueN,N-bis(carboxyméthyl)tétràsodium),EDDM (ethylendiminodipropanedioic acid) et ISA (L'iminodisuccinate de tétràsodium) sont couramment utilisés comme agents chélateur[4], ces ligands sont de nouvelle génération biodégradable par rapport aux APC classiques[5].

L'objectif de ce travail est l'étude des propriétés thermodynamiques des acides aminopolycarboxylates. De ce fait on a effectué des calculs théoriques en se basant sur la méthode DFT. On a utilisé le cycle thermodynamique pour définir les constantes d'acidités ainsi que les énergies libres. Le logiciel utilisé est le programme ADF (2007). Les résultats obtenus ont montré une bonne corrélation entre les propriétés thermodynamiques et les indices de réactivités [6].

Mots clés : Aminopolycarboxylates, DFT, EDDM, GLDA, ISA, ΔG .

26-27/10/2024

COMBINING ELECTRODIALYSIS AND Pb/PbO₂ ANODIC OXIDATION FOR FAST OXIDATION OF ORGANIC POLLUTANTS AND ENHANCED MEMBRANE ANTI-FOULING ACTIVITY

MEHELLOU AHMED (1*), RACHID DELIMI (2), LAMIA ALLAT (2), RIDHA DJELLABI (3), ABDELKRIM REBIAI (1) AND CHRISTOPHE INNOCENT (4)

1 Laboratory of applied chemistry and environment (LCAE), Department of Chemistry, Faculty of Exact Sciences, University of El Oued, 39000, El Oued, Algeria.

2 Department of Chemical Engineering, Universitat Rovira i Virgili, 43007 Tarragona, Spain.

3 Laboratory of Water Treatment and Valorization of Industrial Wastes, Badji-Mokhtar University, BP 12, Annaba 23005, Algeria.

4 European Institute of Membranes, University of Montpellier II, Montpellier, France.

Email : a.mehellou@yahoo.fr

Résumé :

Electrodialysis (ED) process has some limitations which mainly due to the ion-exchange membranes (IEM) proprieties. Among them, there is problem of membranes fouling by adsorption of organic matters during the process. In this work, a new combination of electrodialysis/anodic oxidation (ED-AO) on Pb/PbO₂ electrode was achieved, in order to realize a simultaneous degradation of methyl orange (MO) azo-dye and mitigation of the AMX membrane fouling. The new applied ED configuration is based on the successive circulation of MO feed solution into the electrode compartments.

MEB-EDS characterization of the prepared Pb/PbO₂ electrode indicated that the PbO₂ layer was successfully formed on a lead plate surface. The AMX membrane fouling by MO in ED process has been confirmed and identified via MEB-EDS and FTIR analysis. Besides, the AMX membrane fouling mitigation, the decolorization and mineralization of MO solution, were all improved significantly by coupling of AO to the ED. Consequently, the improvement of MO degradation has reduced the cell electrical resistance (CER).

The investigation of operating parameters effects on ED-AO process showed that the increase of applied current density and supporting electrolyte (Na₂SO₄) concentration increases significantly the decolorization and COD removal efficiencies. In addition, MO degradation is strongly favored at lower pHs. Indeed, the improvement of MO degradation leads to mitigating the AMX membrane fouling and reducing successively the CER. In the other hand, the reuse of prepared Pb/PbO₂ electrode remained effective for ten cycles, except for a slight regression in COD removal observed from the seventh cycle.

Mots clés : Electrodialysis, Anodic oxidation, Pb/PbO₂ electrode, AMX membrane fouling mitigation and Methyl orange degradation.

SYNTHESE DE NOUVEAUX TYPES D'AGENT ACYLATION

MELAIS NEDJMA (1,2), RAHMA ACHOURI (1,2), WASSILA YAHIA (2,3), LOUISA ARIBI-ZOUIOUECHE (1)

1 - Eco-compatible Asymmetric Catalysis Laboratory (LCAE), Badji Mokhtar Annaba-University, B.P 12, 23000 Annaba, Algeria (Algérie)

2 - 20 august 1955 University – Skikda, Algeria (Algérie),

4 - Laboratoire Physico-Chimie des Surfaces et Interfaces. Université 20 août 1955 Skikda Bp 26 Route El-Hadaiek 21000 Algeria (Algérie)

Email : nmelais@yahoo.fr

Résumé :

Nous avons élaboré une nouvelle voie de synthèse pour la production de nouveaux types d'agents acylants qui présentent un intérêt dans différents domaines, en mettant l'accent sur le développement d'une chimie durable. Les résultats obtenus sont nouveaux et présentent un intérêt dans plusieurs domaines. L'utilisation de ces esters vinyliques pourrait être utile pour optimiser les DCE (Dédoublent Cinétique Enzymatique) et mieux comprendre les interactions entre le substrat, l'enzyme et l'agent acylant. Ce travail a abouti à une nouvelle méthodologie qui peut être utilisée comme un outil pour la séparation des énantiomères après une résolution cinétique. Les esters vinyliques sont préparés avec un excellent rendement (>99%) et peuvent être utilisés comme agents acylants pour divers alcools. Les produits de cette réaction sont facilement séparables par simple lavage acide.[1]

[1] (a)Melais, N., Boukachabia, M., Aribi-Zouioueche, L., Riant, O. (2015). Easy preparation of enantiomerically enriched heteroaromatic alcohols through lipase-catalyzed acylation with succinic anhydride under unconventional activation. *Bioprocess and biosystems engineering*, 38(8), 1579-1588. (b)Alalla, A., Merabet-Khelassi, M., Aribi-Zouioueche, L., Riant, O. (2014). Green Synthesis of Benzamides in Solvent- and Activation-Free Conditions. *Synthetic Communications*, 44(16), 2364-2376.

Mots clés : Synthèse, esters vinyliques, catalyse enzymatique.

26-27/10/2024

**SYNTHÈSE ET CARACTÉRISATION DES 2-AMINO -5-ARYLIDÈNE IMIDAZOL-4-ONES ET
CALCULS DFT ET DOCKING MOLÉCULAIRE**

MERDJA KHEDIDJA (1), DEBDAB MANSOUR

1 - Laboratoire de synthèse et catalyse (LSCT), Université Ibn Khaldoun-Tiaret, Tiaret 14000,
Algérie (Algérie)

Email : merdja.khadidja@gmail.com

Résumé :

Le travail que nous présentons s'inscrit dans le cadre des travaux de recherche concernant la synthèse de nouveaux dérivés d'imidazoline-4-one analogues de la leucettamine B. Dans le premier cas, une réaction de transamination et dans le second cas, il s'agit d'une réaction de S-alkylation , la dernière étape concernant la réaction de substitution Soufre/Azote. L'intégrité structurelle des composés synthétisés a été confirmée à l'aide de spectroscopies RMN et MS. Les calculs théoriques par DFT de ces composés ont révélé des distinctions dans la réactivité et la stabilité, tandis que les études de docking moléculaire ont élucidé les valeurs d'affinité de liaison et les interactions des composés dans le site actif de la protéine HMGCS2.

Mots clés : imidazol, 4, one.DFT.docking moléculaire

PREDICTION DE L'ADSORPTION DYNAMIQUE DE COMPOSES ORGANIQUES PAR RESEAUX DE NEURONES ARTIFICIELS (RNA)

MESELLEM YAMIN 1*, ABDALLAH ABDALLAH EL HADJ (2), MAAMAR LAIDI (3), SALAH HANINI (3), MOHAMED HENTABLI (3)

1 Department de Socle Commun Sciences et Technologie, Faculté de Technologie, Université Batna 2, Batna, Algérie.

2 Faculté des Sciences, Université Saad Dahleb de Blida, Somaa, Blida 1, Blida, Algerie.

3 Laboratoire des Biomatériaux et Phénomènes de Transport, Université Yahia Fares de Médéa, Médéa, Algérie.

3,3 Laboratoire de Contrôle Qualité, Département Physico-Chimique, Antibiotique Sidal de Médéa, Médéa, Algérie.

Email : y.mesellem@univ-batna2.dz

Résumé :

L'élimination des polluants organiques ou la réduire de leur concentration relative dans les eaux usées industrielles est une importance capitale pour les technologies de traitement modernes, en particulier la technologie d'adsorption dynamique. La conduite dynamique d'une colonne à lit fixe est décrite en fonction de la courbe de percée résultant de l'analyse du système adsorbant-adsorbat. Dans ce travail une stratégie de modélisation basée sur la technique des réseaux de neurones artificiels (RNA) multicouche a été adoptée afin de décrire le phénomène de l'adsorption dynamique pour prédire la concentration réduite de 15 polluants organiques sur de charbon actif multi-caractéristiques dans différentes conditions opératoires. Selon la nature de problème les paramètres d'entrées et de sortie ont été choisis. Huit paramètres d'entrées tirés de la littérature correspondent aux masse molaire (M) de l'adsorbat, concentration initiale (C0), le débit volumique (Q), la surface spécifique (As) de l'adsorbant, le diamètre des particules (dp), la hauteur du lit (H), le diamètre moyen des pores (Dp) et temps (t). La sortie désirée est la concentration réduite (C/C0) de l'adsorbat étudié. Les résultats obtenus montrent la grande capacité d'estimation de modèle neuronal conçu avec un coefficient de corrélation (R=0,997) et la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (REQM=0,029). Une analyse de la sensibilité de l'importance relative des variables d'entrée sur la sortie montre que tous les paramètres d'entrées ont une influence considérable sur la concentration réduite. Où ils ne pouvaient pas être négligés. Enfin, une interface utilisateur graphique conviviale a été conçue à partir des paramètres RNA optimisés afin de faciliter l'utilisation de modèle conçu.

Mots clés : Réseau neuronal artificiel ; Adsorption dynamique ; Polluants organiques.

ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR AND MICROSTRUCTURE CHARACTERIZATION OF 5356 ALUMINUM WELDING BEAD MANUFACTURED BY COLD METAL TRANSFER (CMT)

MESSAOUDI MERIEM *1,, SAMAH BOUDOUR (1) , LYNDIA BEDDEK (2) , OUAFIA BELGHERBI (1) , ASSIA TOUNSI (1)AND HAMZA KHEMLICHE (1)

1 Research Center in Industrial Technologies CRTI, P. O. Box 64, Cheraga 16014, Algiers, Algeria

2 Materials Physics and Chemistry Laboratory (LPCM), Mouloud Mammeri University Tizi-Ouzou, Algeria

Email : **m.messaoudi@crti.dz**

Résumé :

Cold Metal transfer (CMT) welding technique is a clean and economic process in arc welding when comparing with traditional arc welding processes. This present work investigates the microstructure characterization and electrochemical corrosion of the 5356 Aluminum welding bead samples were manufactured by cold metal transfer (CMT) process using CNC machine and ER5356 filler wire which 1.0 mm diameter. These materials are also being studied in the context of arc-wire additive manufacturing. Further, the microstructure and corrosion behavior in different zone of 5356 Aluminum welding bead were analyzed by X-ray diffractometer (XRD) to identify the different phases obtained, scanning electron microscopy (SEM) and corrosion test. The X-ray diffraction exhibited of 5356 Aluminum welding metal is essential composed with α -Al phase and present of Al₃Mg₂ seconder phase. The electrochemical corrosion testing revealed that the corrosion performance of the welding metal sample was best this is by formation of a passive layer or protective on the surfaces.

Mots clés : Weld bead; 5356 Aluminum; CMT; Additive manufacturing; Microstructural.

26-27/10/2024

EBOV ENTRY GLYCOPROTEIN INHIBITION: A COMPUTER-AIDED DRUG DISCOVERY APPROACH

MESSAOUI MOHAMED MOUADH 1*, MEBARKA OUASSAF (1)

1: Laboratory of Molecular Chemistry and Environment LMCE, Mohamed Khider University of Biskra - Algeria

Email : **mohamedmouadh.messaoui@univ-biskra.dz**

Résumé :

The Ebola virus is an extremely dangerous virus that can cause severe and potentially fatal illness in humans and animals. Entry mechanism is vital for effective pathogenic infections by nature, the current work aims to employ virtual screening and molecular docking of tetrahydrocurcumin derivatives, noting that curcumin analogues are known for their wide biological activity spectrum including antiviral activity. Geometry optimization of both acquired legends and protein preparation was succeeded via the Schrödinger suites 2020-3, interaction maps between the legend and the binding sites were visualized using Biovia discovery studio 2024. Pharmacokinetic profile was predicted using pkcsn server.

Noting that Tomerifene included ligand was used as control molecule found in the targeted protein structure with identifier PDB_ID: 5JQ7.

The docking score was a bit challenging, since only four ligands managed to score average XP score via the glide docking tool, reporting -5.315, -5.165, -5.072, and -5.029 Kcal/mol for CID_20372201, CID_17756535, CID_102048856, and CID_129864119 respectively comparing to control ligand with -2.711 Kcal/mol docking score. Pharmacokinetic prediction uncovered that despite the possible metabolic inhibition activity of all molecules, only CID_17756535 manifested the least inhibiting behavior of all ligands. Additional DFT study was executed to confirm molecular docking stability using NBO to calculate further quantum properties of the proposed lead molecule CID_17756535.

Mots clés : Viral entry protein, Molecular Docking, Ebola virus, ADMET, virtual screening

STRUCTURAL AND OPTICAL PROPERTIES OF SPIN-COATED Ga₂O₃ THIN FILMS

MESSEDDER LOBNA, LOUIZA ARAB (2), AND NOUREDINE SENGOUGA (3)

1 Université de Biskra, Sciences de la matière, Laboratory of Metallic and Semiconducting Materials, Algeria .

2 Université de Biskra, Sciences de la matière, Laboratory of Metallic and Semiconducting Materials, Algeria .

3 Université de Biskra, Sciences de la matière, Laboratory of Metallic and Semiconducting Materials, Algeria .

Email : Lobna.messeddek@univ-biskra.dz

Résumé :

This study used the Sol-Gel process to create β -Ga₂O₃ thin films on different substrates. The research also examined the structural and optical characteristics of these films to understand their performance and potential improvements for various applications.

Mots clés : Ultrawide-bandgap semiconductors, Sol-Gel method, Gallium oxide films.

CHARACTERIZATION OF PHOSPHATE COATINGS ON HIGH CARBON STEEL FOR STRAND FABRICATION

MEYSSOUNE MERIEM (1), ZIDANI MOSBAH , BOUTEFNOUCHET HAFIDA , MECHACHTI SAID

1 - National Higher School of Technology and Engineering, Department of mining and metallurgy,
23005, Annaba, Algeria (Algérie)

Email : m.meyssoune@etu.ensti-annaba.dz

Résumé :

Phosphate coatings on high carbon steel are essential for improving corrosion resistance and durability in challenging industrial settings. This talk explores the thorough analysis of these coatings using sophisticated methods such as scanning electron microscopy (SEM) and X-ray diffraction (XRD). The SEM examination shows that the phosphate layer has a consistent and dense structure, and the XRD investigation confirms the existence of crystalline phases that are typical of phosphate compounds. The study assesses important factors such as the physical structure, chemical makeup, thickness, ability to stick to surfaces, and ability to resist corrosion of the coatings. The purpose of this inquiry is to improve coating techniques and boost the performance of high carbon steel in industrial applications. This will contribute to the advancement of materials engineering and surface technology

Mots clés : Pearlitic steel, Coating, Phosphate, Zinc, Resistance, SEM

**STUDY OF THE ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF DRAWN HARD STEEL WIRES
INTENDED FOR THE MANUFACTURE OF STRANDS**

MEYSSOUNE MERIEM (1), ZIDANI MOSBAH , BOUTEFNOUCHET HAFIDA , MECHACHTI SAID

1 - National Higher School of Technology and Engineering, Department of mining and metallurgy,
23005, Annaba, Algeria (Algérie)

Email : **m.meyssoune@etu.ensti-annaba.dz**

Résumé :

This research explores the corrosion characteristics of pearlitic steel subjected to different levels of mechanical deformation and exposure to sulfate solutions. Through systematic experimentation and analysis, it was observed that increasing degrees of mechanical deformation significantly escalate the susceptibility of pearlitic steel to corrosion. This phenomenon is attributed to the alteration of surface morphology and the introduction of microstructural defects during deformation, which serve as initiation sites for corrosion processes. Moreover, the presence of sulfate solutions exacerbates corrosion rates, particularly in areas where the steel contains higher concentrations of residual stresses and mechanical flaws. The study elucidates that these defects act as preferential sites for localized corrosion, accelerating degradation mechanisms such as pitting and stress corrosion cracking. Insights gained from this investigation underscore the critical interplay between mechanical processing history, material defects, and environmental exposure in influencing the corrosion behavior of pearlitic steel. These findings are pivotal for advancing corrosion mitigation strategies and enhancing the durability and reliability of pearlitic steel components in industrial applications, particularly where exposure to sulfate-rich environments is prevalent.

Mots clés : Pearlitic steel, corrosion, Deformation, Resistance, electrochemical

26-27/10/2024

CHEMICAL BONDING TOPOLOGY IN INTERMETALLIC COMPOUNDS WITH THE Mo_2FeB_2 STRUCTURE

MILOUD ABID OUSSAMA (1),

1 - Belhadj Bouchaib University Ain Temouchent (Algérie)

Email : miloudabidoussama@hotmail.fr

Résumé :

The investigation of intermetallic compounds with the Mo_2FeB_2 structure (space group $P4/mbm$) has attracted substantial interest in recent years, attributed to their diverse and intriguing physical properties, including superconductivity, heavy fermion behavior, Kondo lattices, and magnetocaloric effects. In this study, we conducted a thorough evaluation of the magnetic ordering of f-shells along the a and c axes and performed an in-depth analysis of the electron density using the quantum theory of atoms in molecules. We meticulously identified and characterized all symmetry-inequivalent critical points (CPs) and assessed the degree of metallicity by examining the flatness of the electron density.

Mots clés : intermetallic compounds, magnetic ordering, quantum theory of atoms in molecules

SYNTHÈSE D'UN POLYMÈRE INORGANIQUE À BASE DE SÉDIMENT DRAGUÉ : L'ÉTUDE DE L'EFFET DE LA MOLARITÉ DE L'HYDROXYDE DE SODIUM

MOUAISSA MOHAMED SALAH (1), MAROUF HAFIDA (1), ALI-DAHMANE TEWFIK (2), BENOSMANE AHMED SOFIANE (3), CHALABI YOUSSEUF (1)

- 1 - Laboratoire de Structures intelligentes SSL, Université Belhadj Bouchaib Ain Temouchent (Algérie),
- 2 - Laboratoire de Chimie des Matériaux L.C.M., Université d'Oran 1 Ahmed Ben Bella, BP-1524 El-Mnaouer, 31000 Oran, Algeria. (Algérie),
- 3 - Department of Civil Engineering, Laboratory of Materials LABMAT, ENPO Maurice Audin, BP. 1523, El Mnaouer, Oran 31000, (Algérie)

Email : mohamed.mouaissa@univ-temouchent.edu.dz

Résumé :

Les géopolymères sont des polymères inorganiques utilisés comme géomatériaux composites, sont largement employés dans la construction et l'ingénierie civile car les géopolymères peut réduire considérablement les émissions de CO₂ en utilisant comme alternative au ciment conventionnelle. Cette étude analyse l'impact de la concentration de l'hydroxyde de sodium (NaOH) sur la synthèse de géopolymères à partir de sédiments dragués, en mettant l'accent sur la résistance à la compression et de flexion des échantillons et l'examen microstructural. Par ailleurs, l'utilisation maximale de sédiments de dragage pour la synthèse de géopolymères s'inscrit dans une démarche de valorisation des déchets, favorisant ainsi le développement durable et l'économie circulaire ainsi on cherche des résultats promoteurs en terme de performance mécanique et de durabilité et autre objectif de ce travail c'est la mise en place des géopolymères synthétiser dans le domaine de matériaux construction tel que brique géopolymères et mortier de réparation. L'augmentation de la concentration de NaOH, allant de 6 à 14 M dans la solution d'activation est essentielle pour le processus de géopolymérisation et la dissolution de la source aluminosilicate. Les échantillons ont été préparés avec des sédiments calcinés et un rapport massique liquide/liant de 0,8. Les analyses par diffraction des rayons X et spectroscopie infrarouge ont confirmé la formation de gels géopolymères N-A-S-H et C-A-S-H. Les résultats montrent que la meilleure résistance à la compression est 13,5 MPa, obtenue avec une concentration de NaOH de 12 M, tandis que la plus faible résistance à la compression est 7 MPa, observée pour une concentration de 6 M.

Mots clés : Polymère inorganique, L'hydroxyde de sodium, Sédiments dragués, Développement durable, Microstructure.

EXOPOLYSACCHARIDES MICROBIENS : AGENTS POTENTIELS POUR L'ÉLIMINATION DES MÉTAUX LOURDS ET LA PRÉSERVATION DE L'ENVIRONNEMENT

MOUMENE NADJETTE (1), MALKI Wafa (1), ARAB MOUNIA (1,2), KLOUCHE KHELIL NIHIL (1)

1 - Laboratoire de Microbiologie Appliquée à l'Agro-Alimentaire, au Biomédical et à l'Environnement, Département de Biologie, Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie, Université de Tlemcen. (Algérie),

2 - Faculté des Sciences Biologiques, Université des Sciences et de Technologie Houari Boumediene, Alger. (Algérie)

Email : nadjette.moumene97@gmail.com

Résumé :

Au cours de ces dernières décennies, une nouvelle classe de produits microbiens, tels que les polysaccharides, a acquis une importance industrielle significative. Un intérêt croissant a été porté aux exopolysaccharides microbiens (EPS) en raison de leurs propriétés souhaitables essentiellement leur biocompatibilité avec l'environnement. En plus de leur application dans le domaine des industries alimentaires, pharmaceutiques et cosmétiques, ces biomolécules étaient bien connues pour leur efficacité dans la bioremédiation des eaux et des sols contaminés par des métaux lourds. Les techniques physico-chimiques conventionnelles présentent de nombreux inconvénients principalement la création de boues toxiques dans l'environnement. Par conséquent, les EPS sont devenues une solution alternative grâce au rôle primordial qu'ils jouent dans la bioremédiation des métaux lourds. Dans cette communication, nous mettons en évidence la capacité des EPS microbiens et leur implication dans la biosorption des métaux lourds, le traitement des déchets et la préservation de l'environnement. Les souches productrices sélectionnées ont été inoculées dans un milieu liquide pour une production des EPS, qui ont ensuite été extraits et purifiés. L'aptitude des EPS à réduire la disponibilité des métaux a été testée. Ces biopolymères ont montré des résultats prometteurs dans le traitement des sols contaminés par des métaux lourds, car ils peuvent immobiliser les ions de ces derniers, en réduisant leur biodisponibilité. Ils sont également utilisés dans la production de bioplastiques. Ceux-ci ont l'avantage d'être biodégradables et peuvent être utilisés pour l'emballage de divers produits et en agriculture. De plus, les EPS ont des applications potentielles dans l'industrie pétrolière en tant qu'agents de récupération du pétrole. En conclusion, nous pouvons déduire que les EPS représentent une solution fondamentale pour surmonter les problèmes soulevés par les méthodes physico-chimiques conventionnelles. Pour cela, des recherches supplémentaires sont utiles dans le but d'optimisation de leur production à échelle industrielle pour des diverses applications.

Mots clés : Exopolysaccharides, Métaux Lourds, Bioremédiation, Environnement

26-27/10/2024

SUNTHESE ET CARACTERISATION ESTERS AMINOPHOSPHONATES : APPLICATION BIOLOGIQUE

MOUMENI OUAHIBA (1,2),

1 - laboratoire d'electrochimie des matériaux moléculaires et des complexes(LEMMC) (Algérie),

2 - Département Génie des procédés, Faculté de Technologie, Université Ferhat Abbas Sétif-1- (Algérie)

Email : moumeni_wah@yahoo.fr

Résumé :

Dans ce travail on a synthétisé des esters α -aminophosphonates via la réaction de Kabachnick-Fields. Dans un premier temps, les structures chimiques des molécules synthétisées ont été caractérisé par les méthodes chromatographiques et spectroscopiques (UV-Vis et IR). Dans un deuxième temps, et afin d'exploiter et valoriser ces molécules, on a fait des tests, in vitro, en vue d'évaluer son pouvoir antioxydant par deux méthodes par DPPH et FRAP. Les résultats des tests de ces activités biologiques réalisés sur ces molécules synthétisées montrent que ces produits sont biologiquement actifs et peut être utilisé ultérieurement dans d'autres applications.

Mots clés : Organophosphorés, Synthèse, DPPH, Kabachnick, Fields.

FERROCENE IMIDAZOLIUM SALTS

NEGHMOUCHE NACER SALAH (1), KHELEF ABDELHAMID (1)

1 - Université Hamma lakhdar d'El oued, 39000 El Oued, Algérie (Algérie)

Email : neghmouchenacer-salah@univ-eloued.dz

Résumé :

In this work, a series of ferrocene methyl alkyl imidazolium compound salts were prepared, with a focus on the Imi C₂H₅ derivative, and their electrochemical properties and biological activities were studied. The preparatory steps included synthesizing the compound from ferrocene methyl and imidazole, and using an alkylation reaction with an ethyl group to form the salt. The chemical structure of the compound was analyzed using spectroscopic techniques such as Fourier-transform infrared (FTIR) and ¹H NMR spectroscopy. To study the electrochemical behavior of the compound, cyclic voltammetry was employed to analyze its oxidation and reduction behaviors. The results showed that the electronic effects of the imidazolium group on ferrocene significantly influenced the oxidation and reduction properties of the compound. Additionally, Imi C₂H₅ exhibited antifungal activity against *Alternaria* sp., and demonstrated antibacterial activity against MRSA, highlighting its potential as a new and effective antibiotic against antibiotic-resistant bacteria. The findings call for further studies to elucidate the mechanisms underlying the biological activity of this compound and to assess its efficacy in various medical applications.

Mots clés : salts, ferrocene, MRSA, *Alternaria*, imidazolium, cyclic voltammetry, antifungal activity, antibacterial activity

ETUDE DE L'INHIBITION DE CORROSION PAR L'EXTRAIT AQUEUX DES PARTIES AÉRIENNES DE SOPHORA

OUACHE RACHID (1,2), FAYÇLE BAIRA (2), SAFA CHAIRA (3), HASSINA HARKAT (1,2)

- 1- Laboratoire de physio-toxicologie, pathologie cellulaires et moléculaires-biomolécules (LPTPCMB), Université de Batna-2, Batna, Algérie.
- 2- Département de SC-ST, Faculté de Technologie, Université de Batna-2, Batna, Algérie
- 3- Département de Pharmacie, Faculté de Medecine, Université de Batna-2, Batna, Algérie

Email : r.ouache@univ-batna2.dz

Résumé :

La majorité des métaux et des alliages placés dans différents environnements sont affectés par différentes formes de corrosion, uniforme ou localisée. En effet, la corrosion est l'attaque nuisible d'un métal par réaction chimique ou électrochimique avec son environnement [1,2].

Sophora japonica appartient à la famille des fabacées qui compte environ 52 espèces, dix-neuf variétés et sept formes largement réparties en Asie, Océanie et les îles du Pacifique. Allant des graminées aux arbres (*Sophora japonica* L.), ses deux sous-genres sont *sophora* (fruit charnu déhiscent et mésocarpe incomplet) et *styphnolobium* (fruit charnu indéhiscent et mésocarpe complet) [4,5].

Ce travail porte sur la détermination l'étude de l'inhibition de la corrosion de l'acier en milieu corrosif NaCl 35 g/l par l'extrait méthanolique de partie aérienne de *sophora japonica*.

L'évaluation de l'activité anticorrosion de l'acier en milieu NaCl 35g/l a été étudiée par des mesures gravimétriques et les tests électrochimiques. Les résultats obtenus ont montré que l'efficacité inhibitrice de la corrosion atteint une valeur maximale d'environ 91 % après l'ajout de 1300 ppm de l'extrait méthanolique de partie aérienne de *sophora japonica*.

Mots clés : *sophora japonica* , activité anticorrosion, métabolites secondaires, acier, inhibiteur de corrosion, perte de masse, polarisation, tafel.

SIZE EFFECT OF Ni/MgO NANOCOMPOSITES ON ANTIBACTERIAL ACTIVITY

OUAFAK N. (1,2), N.KEGHOUCHE (1),H.GUENDOUZ (3)

- (1) Laboratoire Microstructures et Défauts dans les matériaux, Université Constantine 1, Route de Ain El Bey, 25000, Constantine, Algeria
(2) Research Center in Industrial Technologies CRTI, P.O. Box 64, Cheraga, 16014, Algiers, Algeria
(3)Mechanics Research Center CRM, Constantine,

Email : nourouaf@gmail.com

Résumé :

Increasing pathogen resistance has become a serious threat to medical science in the treatment of several human diseases. More than 70% of bacterial infections are now resistant to the conventional/traditional antibiotics used to treat the infection. As an alternative way, metal and metal oxide nanoparticles have recently been shown to have antimicrobial activity against a wide range of bacterial strains, particularly those resistant to antibiotics. It is with this in mind that we studied metal-oxide nanocomposites, namely Ni-MgO, in order to test their antibacterial performances against the two strains, *E. coli* (G-) and *S. aureus* (G+).

In a first part, we optimized the synthesis conditions of Ni/MgO samples. These were prepared in two stages: the first consisted of fixation by ion exchange of Ni²⁺ ions on the MgO support ([Ni]/[MgO]=5% by weight); the second the samples were calcined (T = 100-700°C).

We studied the structural properties of the samples thus prepared. X-ray diffraction revealed that, on the one hand, the synthesis conditions are favorable for the hydration of MgO to Mg(OH)₂. On the other hand, the interaction of nickel with magnesium oxide leads from the impregnation stage to the formation of intermetallic phases Ni₂Mg, NiMg₂ and Mg_{6.33}Ni. These Ni-Mg and Mg (OH)₂ phases were observed both in the impregnated sample and those calcined at T ≤ 300°C. On the other hand, at T ≥ 350°C, all these phases disappear to the detriment of MgO and a new NiO-MgO phase.

We tested the antibacterial properties of MgO and Ni/MgO impregnated and calcined at 300°C and 400°C against two bacteria: *E. coli* and *S. aureus*. In general, when antibacterial agents are active, their activity increases with their concentration. This study revealed that MgO is toxic against *E. coli* and inactive against *S. aureus*. An opposite behavior is observed for Ni/MgO calcined at 400°C. Concerning the other two antibacterial agents, impregnated Ni/MgO is somewhat active against both bacteria while Ni/MgO calcined at 300°C has the greatest toxicity against both bacteria.

Mots clés : Nanoparticles ; XRD ; NiMg₂ ; Ni/MgO ; antibacterial activity.

ETUDE D'UNE PLANTE MÉDICINALE

OUELBANI RAYENE (1), BENSARI SOUHEIR (1), MOKRANI EL HACEN (1)

1 - Laboratoire de Biochimie Appliquée, faculté SNV, université de Constantine 1 (Algérie)

Email : rayene.ouelbani@gmail.com

Résumé :

Ce travail vise à étudier la composition phytochimique et l'activité antibactérienne de la partie souterraine d'*Asphodelus microcarpus* Salzm. et Viv., une plante médicinale méditerranéenne présentant des vertus médicinales, selon la littérature et selon les herboristes de la région. Les extraits ont été obtenus par extraction solide-liquide ensuite l'extrait brut est soumis à une extraction liquide-liquide utilisant des solvants de polarité croissante : éther de pétrole, acétate d'éthyle et méthanol. Le Screening phytochimique par Chromatographie sur Couche Mince a révélé la présence des anthrones et anthranols, des flavonoïdes, des saponines, des terpènes, des tanins et des acides phénoliques. Le dosage quantitatif du contenu en polyphénols totaux, en adoptant la méthode de Folin-Ciocalteu a montré que l'acétate d'éthyle est l'extrait présentant la plus grande quantité de polyphénols ($101,54 \pm 0,72 \mu\text{g/mL}$). De même, la teneur en flavonoïdes dosée par la méthode d' AlCl_3 avec une valeur de ($192,25 \pm 0,44 \mu\text{g/mL}$), ce qui indique une quantité considérable en flavonoïdes dans cet extrait. L'activité antibactérienne des extraits a été testée par la méthode de diffusion sur disque ainsi que l'ensemencement dans un milieu liquide, contre 4 souches bactériennes à Gram- et à Gram+ à savoir : *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Bacillus subtilis*, et *Staphylococcus aureus*. Seuls les extraits acétate d'éthyle et méthanol à des concentrations élevées (150 mg/mL et 200 mg/mL) ont montré une inhibition modérée sur *E. coli* et *S. aureus*. Ce pendant Les extraits d'*Asphodelus microcarpus* Salzm. & Viv.,montrent une variation dans leur efficacité contre différentes bactéries en milieu liquide, l'extrait méthanolique a montré une meilleure efficacité contre *E. coli* avec une CMI plus faible (50 mg/mL) comparée à l'extrait de l'AcOEt. En revanche, pour *P. aeruginosa* et *B. subtilis*, les deux extraits (AcOEt et MeOH) semblent avoir une efficacité similaire, avec une CMI de 100 mg/mL. Pour *S. aureus*, l'extrait AcOEt est plus efficace que l'extrait méthanolique présentant une CMI de 150 mg/mL.

Mots clés : Plante médicinale, extraction, activité antibactérienne, *Asphodelus microcarpus*, métabolites secondaires.

26-27/10/2024

MOLECULAR DOCKING OF SOME FUROCHROMENE AS ANTI CANCER POTENIEL

RABAHI AMAL, ABDELDEJBAR HASNIA (2), BAYMOUT MASSINISSA (1), GUERFI AYA-INSAF (2), BOUHOUROU HOURIA (1), KESRAOUI NASSIMA (1) (2), SAIDOUN AICHA (1), BENOSMANE NADJIB (1)

- 1 - Applied Organic Chemistry Laboratory (Heterocycles Group), Fac. of Chemistry, Univ. of Sciences and Technology, BP32, El-Alia 16111 Bab-Ezzouar, Algiers, Algeria. (Algérie),
2 - Research Centre in Analytical Chemistry and Physics (CRAPC), BP 248, Algiers 16004, Algeria (Algérie)

Email : amal_rabahi@yahoo.fr

Résumé :

(2E)-1-(6-hydroxy-4,7-dimethoxy-1-benzofuran-5-yl)-3-phenylprop-2-en-1-one 4a-c were synthesized via the Knoevenagel reaction of (6-hydroxy-4,7-dimethoxy-1-benzofuran-5-yl) ethanone 2 with aromatic aldehyde 3a-c. The synthesized furochromene compounds were evaluated for their potential optical properties investigated in different solvents by UV/vis absorption and fluorescence spectroscopy at room temperature (298 K). These compounds 4a-c can be used as fluorescent probes in biology. Note that our molecules were characterized by UV-Vis, FT-IR, mass spectroscopy and NMR. In addition, in order to develop furochromene-based drugs for preclinical research, the anticancer potential of our targeted compounds was investigated using molecular docking. This latter, was performed to estimate the binding affinities of the ligands studied 4a-c to different human tumor cell lines: the HepG2 liver cancer cell line, A549 lung carcinoma and HCT116 colorectal cancer. The results of the docking study and ADMET analysis showed that the molecules studied may be promising structures with the potential to act as drug candidates.

Mots clés : furochromene, anticancer, docking study

26-27/10/2024

MULTICOMPONENT, EFFICIENT APPROACH FOR THE SYNTHESIS OF BIOLOGICALLY ACTIVE 4-AMINO-5-CYANO-PYRIMIDINE DERIVATIVES

RACHA AMIRA BENOUNE,*⁽¹⁾, RAOUF BOULCINA² AND ABDELMADJID DEBACHE³

¹Department of chemistry/faculty of exact science, University of frères Mentouri - Constantine 1, Algeria

²Department of chemistry / Faculty of Technologie, University of Batna 2, Algeria

³Department of chemistry/faculty of exact science, University of frères Mentouri - Constantine 1, Algeria

Email : rachamira96@gmail.com

Résumé :

pyrimidines is well known nitrogen containing heterocyclic component finding prominent applications in the field of medicinal and pesticide chemistry. Many of the pyrimidines derivatives have obtained considerable attention as main building blocks for drug discovery.

Additionally, the synthesis of pyrimidine analogs has gained renewed interest due to their various biological properties such as anti-depressant, anti-inflammatory, antimicrobial anti-obesity, antihypertensive, anti-inflammatory agents, analgesics and anticancer. Their derivatives are also reported as strong DNA binders. Therefore, a substantial attention has been focused on the development of biologically important new pyrimidine-fused heterocycles.

Among the pyrazole derivatives, 4-amino-5-cyano-pyrimidine exhibit a broad spectrum of pharmaceutical and biological activities including anti-cancer, antimicrobial , antiviral , anti-inflammatory , anti-angiogenic and anti-allergic etc.

Multicomponent reactions (MCRs) are known as a powerful tool for the construction of novel and structurally complex molecules in a single pot ensuring high atom-economy, good overall yields and high selectivity, lower costs, shorter reaction times, minimizing waste, labor, energy, and avoidance of expensive purification processes. It has been established that MCRs are generally much more environmentally friendly, and offer rapid access to large compound libraries with diverse functionalities. In this context, we herein report an efficient one-pot synthesis of a series of novel highly substituted, functionalized and biologically active 4-amino-5-cyano-pyrimidine.

Mots clés : Pyrimidine, 4-amino-5-cyano-pyrimidine, green synthesis, multicomponent reactions.

FROM WOOD WASTE TO BIOPOLYMER

RAIS ZINEB (1), ALMI SANA (1), ADJAL FATIMA (1), CHARIF MAJDA (1)

1 - Université Mohamed Khider de Biskra (Algérie)

Email : zineb.rais@univ-biskra.dz

Résumé :

The increased attention in using natural biopolymer fibres to reduce synthetic polymer pollution, and to exploring different resources of biodegradable natural fibres with low cost, low weight, and high biodegradability. Therefore the productions of biodegradable materials play a major role to save the environment. The most abundant renewable biopolymer fibre available in nature is cellulose. In this study, the extraction of cellulose from wood waste past with mechanical and chemical methods such as grinding, sieving, de-waxing with soxhlet method, delignified with alkali treatment, and bleached with acid hydrolysis in order to remove non-cellulosic components. This biomass contain 11.02% of extractible materials and inorganic materials , 23.40% of lignin , 30.04% of hemicellulose and 35.54% of cellulose. Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy, X-ray diffraction (XRD), UV-vis, scanning electron microscopy (SEM), and thermogravimetric analysis (TGA) results prove the successful extraction of cellulose fibres. The wood waste biomass and the extraction process have a major contribution to cellulose's crystallinity, structure, and morphology. The preparation of biopolymer films with different ratio of cellulose extracted from wood waste, agar, and glycerol show different texture of films. The physical, chemical, mechanical and biological parameters such as the tensile strength, the hardness, solubility in water, and biodegradability test indicate that the percentage of cellulose has a direct influence on this properties of biopolymer cellulosic films.

Mots clés : cellulose, biopolymer, extraction.

26-27/10/2024

SYNTHESIS, BIOLOGICAL ACTIVITY, CHIRAL SEPARATION AND ABSOLUTE CONFIGURATION ASSIGNMENT OF IMINOFLAVANS

REBIZI MOHAMED NADJIB (1,2),

1 - Mohamed Nadjib Rebizi (Algérie),

2 - Organic Chemistry and Natural Substances Laboratory, Faculty of Exact Sciences and Computer Science, University of Djelfa, PO Box 3117, Djelfa 17000, Algeria (Algérie)

Email : rebizi-nadjib@hotmail.fr

Résumé :

Some iminoflavan derivatives were synthesized by simple condensation in position C4 of the flavanone. All new compounds were characterized by using UV-Vis, IR and NMR as spectroscopic techniques. A chiral chromatographic analysis of racemic mixtures was performed by direct chiral high-performance liquid chromatography using Chiralcel® OD-H (Daicel) as chiral stationary phase, and online coupled with electronic circular dichroism (ECD) detector. The correlations of experimental ECD traces with quantum chemical ECD calculations with time-dependent density functional theory made it possible to elucidate the absolute configuration for each enantiomer, and establish the elution order. Furthermore, molecular docking was performed to analyse the binding modes of R- and S-isomers. All isolated isomers of compounds under investigation reproducing even ECD curves. We demonstrated, however, that the use of ECD spectroscopy, both in online approach HPLC-CD and ECD spectroscopy instrument can easily, unambiguously, and without any complication simulate all curves; but VCD analysis failed for these compounds, making the use of VCD not ideal to assign their absolute configuration in a reliable way. All iminoflavan derivatives have been evaluated for their antibacterial activities. Most of the synthesized derivatives were found to be active against *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis*, *Listeria monocytogenes* and *Staphylococcus aureus*. Activity of iminoflavans was found to be higher than the initial materials flavanone. Investigated compounds having substituents like Cl, OMe and OH at the starting amine exhibited enhanced activity and the presence of electronegative groups in the studied compounds showed a direct relationship to the antibacterial activity.

Mots clés : ECD spectroscopy, HPLC, chiral chromatographic analysis .

**THEORETICAL INVESTIGATION OF THE ELECTRONIC AND MECHANICAL
STRUCTURAL PROPERTIES OF THE ANTI-PEROVSKITE PbBX_3 WITH $\text{X}=\text{Ru, Sn, Lu}$**

REFICE LAMOURI (1), BENAMER ALI (1)

1 - Laboratoire de Mathématique et Physique Appliquées (Algérie)

Email : refice.lamouri@ens-bousaada.dz

Résumé :

We did an ab initio calculation which is based on density functional theory (DFT). We calculate the structural, electronic, mechanical and optical properties of compounds (PbBRu_3 , PbBSn_3 and PbBLu_3) using the CASTEP code, in the generalized gradient approximation (GGA), and the Local Density Approximation (LDA), to calculate the exchange and correlation potential (V_{xc}) for calculating structural properties , electronic properties , elastic properties (elastic constants, the elastic modules and optical properties (dielectric coefficient, refraction index and absorption coefficient ...), and the results obtained agree experimental results available.

Mots clés : Intermetallic compounds, Ab initio calculations, Elastic properties

L'HUILE ESSENTIELLE D'ORIGAN : UNE ALTERNATIVE POTENTIELLE AUX ANTIBIOTIQUES

ROUANE ASMA (1), HEZIL DJAMILA (2), MOUHOUB FAIZA (2,3), BELBLIDIA HASSINA (3), SI-DEHBI FARIDA (2), SELMANI CHERIFA (2), AMEDJKOUH HAFIDA (2,4), CHABANE DJAMILA (2)

1 Université de M'Hamed Bougara de Boumerdès, Faculté des Sciences, Département de Biologie, Laboratoire de Valorisation et Conservation des Ressources Biologiques (VALCORE), 35000 Boumerdès, Algérie.

2 Université des Sciences et de la technologie Houari Boumediene, Bab Ezzouar, Faculté des Sciences Biologiques, Laboratoire de recherche sur les zones arides (LRZA), 16 111 Alger, Algérie.

3 Université de M'Hamed Bougara de Boumerdès, Faculté des Sciences, Département de Biologie, 35000 Boumerdès, Algérie.

4 Université Saad Dahlab de Blida 1, Département de biologie, Faculté des Sciences de la nature et de la vie, Blida, Algérie.

Email : rouaneasma8@gmail.com

Résumé :

L'Algérie est un réservoir de ressources biologiques diversifiées, notamment en plantes aromatiques et médicinales spontanées. Parmi celles-ci, «*Origanum vulgare* L.» de la famille des Lamiaceae, est largement utilisé par la population algérienne à des fins alimentaires et thérapeutiques pour traiter diverses pathologies, grâce à ses composés bioactifs. Cette étude contribue à la valorisation phytochimique et biologique de l'origan sauvage de la région de Boumerdès. Les expérimentations ont été réalisées sur la partie aérienne de l'O. vulgare récoltée de la région de Boumerdès en Mai 2023. Un screening phytochimique a été effectué sur la poudre de la partie aérienne de plante, suivi par l'extraction des huiles essentielles par hydrodistillation (Clevenger) à partir des parties fraîches de plante. L'évaluation de la bioactivité antibactérienne de l'huile essentielle a été réalisée par la méthode de diffusion sur un milieu gélosé solide, en comparaison avec l'antibiogramme. Les résultats obtenus de l'étude phytochimique a permis d'identifier différentes classes métaboliques bioactives avec l'abondance des composés phénoliques. De plus, l'hydrodistillation a révélé un rendement d'extraction de 1,6 %. Par ailleurs, un effet antibactérien fort de cette huile essentielle a été révélé contre les bactéries cliniques Gram négatif testées responsables d'infections urinaires. Ceci, peuvent confirmer l'utilisation potentielle de cette plante en tradi-traitements de diverses maladies. En conclusion, l'huile essentielle de l'origan sauvage testé prouve un pouvoir antibactérien prometteur et peut être utilisé comme un antibiotique naturel puissant pour traiter les infections urinaires d'origine bactérien. Ces résultats préliminaires encouragent la valorisation des huiles essentielles de l'*Origanum vulgare* L. dans le domaine pharmaceutique diversifiée.

Mots clés : *Origanum vulgare* L., Lamiaceae, Huile essentielle, Activité antibactérienne, Infections urinaires.

26-27/10/2024

FRONTIER MOLECULAR ORBITALS AND LOCAL REACTIVITY DESCRIPTORS OF HETEROPOLYOXONIOMBATES

SAHLI RABAH (1), SAAL AMAR (2)

1 - Laboratoire Chimie théorique Computationnelle et Photonique, USTHB (Algérie),

2 - département de chimie, UMMTO (Algérie)

Email : rabah-sahli@outlook.com

Résumé :

Polyoxoniobates, a class of polyoxometalates composed of niobium and oxygen atoms, have gained significant attention in recent years due to their intriguing structural diversity and versatile applications in catalysis, materials science, and environmental remediation. Frontier molecular orbitals and Fukui functions provide insight into local reactivity of these complex clusters and their stability, which is essential for tailoring their chemical behavior for specific applications. In the present work, four distinct heteropolyoxoniobates, namely P_2Nb_4 , As_2Nb_4 , P_4Nb_6 , $P_2Se_2Nb_6$ comprising the same addenda niobium atom and different heteroatoms (As, P, Se) were chosen to study their Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO) and Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO) as well as their electrophilic and nucleophilic attack sites through local reactivity descriptors such as : Fukui functions, dual descriptor, and hypersoftness. Single point calculations were carried out on neutral, cationic, and anionic state of molecules, using Density Functional Theory (DFT) through combination of M06 functional and mixed basis sets «6-31G(d,p), LanL2DZ ». Hirshfeld charges were used to obtain reactivity descriptors.

Mots clés : Polyoxoniobates, DFT, Reactivity descriptors

INVESTIGATION OF PHYTOCHEMICAL AND ANTIOXIDANT PROPERTIES OF EXTRACTS FROM WILD MYRTLE BERRIES (*MYRTUS COMMUNIS* L.)

SALHI RIM (1), AMESSIS NADIA (1), BOUIZAR ROUKIA (2), AGABI RANIA , BOULAHILIB CERINE YASMINE , GUENAOU NAWEL , AYAD RABHA (3), OUCHEMOUKH SALIM

- 1 - Laboratoire de Biomathématique, Biochimie, Biophysique et Scientométrie (Algérie),
2 - Laboratoire de biomathématiques, biochimie, biophysique et scientométrie (3BS), Département des sciences alimentaires, Faculté des sciences de la nature et de la vie, Université Abderrahmane Mira de Bejaia. (Algérie),
3 - Ayad (Algérie)

Email : rim.salhi@univ-bejaia.dz

Résumé :

Myrtus communis L. (Myrtaceae family) is one of the most used plants in traditional medicine. The medicinal properties of *M. communis* are mainly due to its richness in biologically active secondary metabolites. Anthocyanins, flavonoids and fatty acids are the main phytochemicals in berries. Numerous studies have provided evidence for the potential biological activities of this species. In this study, the content of phenolic compounds, flavonoids, anthocyanins and the antioxidant activity of hydroalcoholic extracts of mature *Myrtus communis* fruits obtained by two extraction methods (conventional maceration and ultrasound assisted extraction) were studied. The two extracts were characterized in terms of content of total polyphenols, flavonoids, total monomeric anthocyanins and antioxidant activities (DPPH, ABTS and phosphomolybdenum assay). Maceration gave values significantly ($p < 0.05$) lower than those given by sonication. The latter led to a higher yield of bioactive compounds as well as the highest anti-oxidant activity values. These results suggest that the ultrasound assisted extraction is a more productive extraction method of bioactive compound extraction compared with the conventional method.

Mots clés : *Myrtus communis* L., Polyphenols, anthocyanins, antioxidant activity, DPPH, ABTS.

26-27/10/2024

MINERAL CONTENTS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF HONEY FROM KANO - NIGERIA AGAINST ESCHERICHIA COLI AND PSEUDOMONAS AERUGINOSA

SALIHU A. KIYAWA (1), ASMA'U HASSAN (2)

1,2Department of Chemistry, Yusuf Maitama Sule University, PMB 3220, Kano – Nigeria

Email : salihkiyawiy@gmail.com

Résumé :

Honey is produced in Africa, Asia and Europe. It contains mineral elements of varying contents depending on its botanical and geographical origin. It is used as food and traditional medicine to cure varying illnesses. JENWAY atomic absorption spectrophotometer model 6705 was used to determine the calcium, magnesium and zinc contents in the samples from 6 different sampled localities numbered A to F. The results showed that a highest value for calcium concentration was recorded in sample A with 63.00 mg/L and the lowest in sample C with 17.96 mg/L which are all within the permissible limit set by WHO of 75 mg/L. Values recorded for magnesium showed the highest A with 25.25 mg/L and the lowest in sample C with 14.87 mg/L which are all within the permissible limit set by WHO 50 mg/L. The highest concentration of zinc was found in sample A with 0.472 mg/L and the lowest concentration in sample C with 0.179 mg/L which are all within the permissible limit set by WHO of 5.0 mg/L. In the same vein, results obtained here are found to be much higher than most reported by other researchers. A disk diffusion assay was used to measure zones of inhibition to determine the antibacterial properties of the honey. Ampicillin was reconstituted by dissolving 0.5 g powder in a 1 ml of DMSO. The prepared dilution of the antibiotic was used for antibacterial test and served as a positive control. Cultures of gram-negative *Pseudomonas aeruginosa* and *Escherichia coli* were used. The test microorganisms were isolates obtained from the University Clinic. 28 g nutrient agar dissolved in 1 liter of distilled water was autoclaved for 15 minutes at 121°C. 20 ml of the sterilized nutrient agar was transferred into petri-dishes. The petri-dishes were allowed to cool and solidify. The standardization of culture was done according to the 0.5 McFarland standard corresponding to approximately 1.0×10^8 cfu / ml. This was done for the control bacteria. Each disc was kept at 16 mm from the edge of the plate to prevent overlapping of zones. Ampicillin was used as positive control. The plates were incubated at 37°C for 24 hours. The growth inhibition zones were measured with a transparent ruler. Sample A demonstrated antibacterial activity against two clinical isolates with zone of growth inhibition ranging from 8 mm to 10 mm. The maximum and minimum zones of inhibition were observed against *P. aeruginosa* 10 mm and *E. coli* 8 mm respectively. Sample D demonstrated antibacterial activity against two clinical isolates with zone of growth inhibition ranging from 7 mm to 9 mm. The maximum and minimum zones of inhibition were observed against *P. aeruginosa* 9 mm and *E. coli* 7 mm respectively.

Mots clés : Honey, minerals, antibacterial, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, disk diffusion assay. Kano.

26-27/10/2024

ENHANCING NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES WITH ORTHO-CARBORANE CLUSTERS: A COMPUTATIONAL STUDY

SAMSAR DJAMILA (1, 2), DOUNIAZED HANNACHI (3).

1 Institut D'Hygiène et Sécurité Industrielle, Université de Batna 2.

2 Laboratoire de Chimie des Matériaux et des Vivants: Activité, Réactivité, Université El-Hadj Lakhdar, Batna, Algérie.

3 Faculté des Sciences de la matière, Département de Chimie, Université de Batna-1, Algérie

Email : d.samsar@univ-batna2.dz

Résumé :

Ortho-carborane clusters stand out among the various carborane types as a subject of intense scientific interest. These clusters are characterized by their unique icosahedral structure, composed of C₂B₁₀ units with two adjacent carbon atoms. Their popularity in research stems from three key factors: exceptional thermal stability, high chemical resilience and ready availability from commercial sources. The combination of these properties - a distinctive molecular architecture, remarkable durability, and ease of acquisition - has cemented ortho-carborane clusters as a cornerstone in carborane research.

Moreover, this cluster stands out as an optimal electron-accepting entity due to its pronounced ability to withdraw electrons inductively from carbon substituents. In this research, we explore a range of ortho-carboranyl-based luminophores, each modified with functionalized biphenyl units substituted with groups like -CF₃, -F, -H, -CH₃, -C(CH₃)₃, -OCH₃, and -NH₂, identified as 1C-7C and 1C'-7C'. In parallel, we examine a similar series of luminophores, denoted as 1M to 7M, which possess the same biphenyl substituents but are devoid of the o-carboranyl cluster. This comparison aims to evaluate the influence of the o-carboranyl cluster on the nonlinear optical (NLO) properties of these luminophores through detailed quantum calculations.

In our comprehensive analysis, compounds ranging from 1C to 7C showcased enhanced charge transfer capabilities when compared to the series 1C'-7C' and 1M-7M. The latter series displayed similar patterns in key parameters such as transition dipole moment, Ghost-hunter index, Sr, D, H indexes, and local electron percentage (LE%). Additionally, these compounds exhibited notable electron transfer between fragments, as well as substantial second and third order nonlinear optical (NLO) responses in both static and dynamic states. Upon further investigation into the linear and NLO properties of the studied compounds, it was discerned that o-carboranyl clusters, when linked via Ph-Ph-NH₂, exhibit significantly higher values of $\alpha_0 = 278$, $\chi_0 = 5094$, $\chi_{HRS} = 2202$ and $\chi_0 = 336121$ a.u. in tetrahydrofuran (THF). This finding underscores the remarkable influence of o-carboranyl clusters on the optical properties of the compounds.

Mots clés : Ortho-carborane clusters, Nonlinear optical (NLO) , Optical properties.

THE STUDY OF STRUCTURAL AND OPTICAL PROPERTIES OF MG DOPED NiS NANOSTRUCTURED THIN FILMS BY SPRAY PYROLYSIS TECHNIQUE.

SBAIHI AMIRA (1), BENRAMACHE SAID (2), BENBRIKA CHAIMA (3), ZIDANE ABDERRAOUF (4)

- 1 - Laboratory of Semiconductor and Metallic Materials (University of Biskra (07000), Biskra, Algeria Algérie),
2 - Laboratoire des Matériaux, des Énergies et de l'Environnement, University of Biskra 07000, Algeria (Algérie),
3 - Applied Chemistry laboratory (LCA) (Algérie), 4 - Observatoire national de l'environnement et du développement durable, Biskra 07000, Algeria (Algérie)

Email : amira.sbaihi@univ-biskra.dz

Résumé :

The spray pyrolysis technique (SPT) was used to deposit thin films of pure nickel sulfide (NiS) doped with magnesium Mg at different ratios (2%, 4%, 6% & 8%) at a temperature of 250 °C on glass substrates. to study the structural properties of the prepared thin films, an X-ray diffraction device (XRD) was used. it was found that all polycrystalline thin films had a hexagonal structure in conformity with the ICSD card with a preferred (010) peak orientation, We determined that NiS thin films crystallite size decreased with the increase of Mg concentration in the range of 22.148 nm to 14.015 nm. Furthermore, the existence of the Ni-S chemical bond in 632 cm⁻¹ was confirmed using fourier transform infrared spectroscopy FTIR at room temperature. However, Optical investigations using UV absorption spectra revealed a suitable rise in the band gap of nickel sulfide thin films through a violet shift in the UV spectra with increasing magnesium content, where the band gap energies of the films range from 0.945 eV to 0.952 eV with varying magnesium content.

Mots clés : Nickel sulfide (NiS), spray pyrolysis technique (SPT), Magnesium, doped, Nanostructured.

**COMPOSITE OF POLYAMIDE11 (P11) /POLYPYRROLE FOR CORROSION
PROTECTION OF CUPRONICKEL (90/10) IN A 3.5% NaCl SOLUTION**

SEID LAMRIA1*, BELGHERBI OUAFA (1, 2), SOBHI NOUR ELHOUDA (1), AROUI LINDA (1) ,
CHOUDER DALILA (1)

1 Laboratoire d'Energétique et d'Electrochimie du solide. Département de Génie des Procédés.
Faculté deTechnologie. Ferhat Abbas University, 19000 Sétif, Algeria

2 Research Center in Industrial Technologies CRTI, P.O.Box 64, 16014 Cheraga, Algiers, Algeria

Email : belgherbiwafia@gmail.com

Résumé :

This study investigates the inhibition of cupronickel (90/10) corrosion by composite material PA11/PPy with 5 wt.% pyrrole in aggressive NaCl 3.5% environments using electrochemical impedance spectroscopy and potentiodynamic polarization measurements. The results show that the corrosion inhibition efficiency of cupronickel in NaCl 3.5% solution improves significantly with the composite, achieving an optimal efficiency of 94.2% with the PA11/PPy composite containing 5 wt.% pyrrole. The inhibitors primarily function anodically, with materials forming a protective layer on the cupronickel surface, as observed by optical microscopy.

Mots clés : corrosion; cupronickel; NaCl 3.5%; inhibitor; composite materials; PA11/PPy.

EVALUATION DES TENEURS EN COMPOSÉS PHÉNOLIQUES DES RACINES ET DES FEUILLES DE *SCORZONERA CORONOPIFOLIA*

SELADJI MERYEM, YEZLI FAYÇAL, BENAMMAR CHAHID, BELARBI MERIEM BOUKLIKHA SELMA GHIZLENE, DIB HANANE, BOUAZIZ SAFIA (1)

1 - Laboratoire des produits naturels, département de biologie université Abou bakr Belkaid Tlemcen (Algérie)

Email : bouklikhaselma@gmail.com

Résumé :

Introduction: *Scorzonera coronopifolia* est une plante de la famille des astéracées, du genre *Scorzonera*. Ce genre comprend environ 90 espèces réparties en Europe, en Asie et en Afrique. Certaines espèces de *Scorzonera* étaient utilisées comme légumes de cuisine et en médecine traditionnelle. Cependant, peu d'études ont été effectuées sur la phytochimie de l'espèce *Scorzonera coronopifolia*. Le but de notre étude est de déterminer la concentration en composés phénoliques de l'extrait hydro-acéto-méthanolique des feuilles et des racines de *Scorzonera coronopifolia*. **Méthodes :** Dosage des polyphénols totaux: a été effectué par la spectrophotométrie selon la méthode du réactif de Folin-Ciocalteu. Les résultats sont en milligramme équivalent d'acide gallique par gramme de matière sèche (mg EAG/g MS). Dosage des flavonoïdes : a été réalisé à partir de la méthode du réactif de chlorure d'aluminium. Les résultats sont en milligramme équivalent de Catéchine par gramme de matière sèche (mg EC/g MS). Dosage des tanins condensés : a été effectué à partir de la méthode de la vanilline en milieu acide. Les résultats sont en milligramme équivalent de Catéchine par gramme de matière sèche (mg EC/g MS). **Résultats :** Les résultats de l'extrait des feuilles ont révélé une teneur de 7.875 mg EAG/g MS en polyphénols, 8.8071 mg EC/g MS en flavonoïdes, et 196.065 mg EC/g MS en tanins. Pour l'extrait des racines on a eu une teneur de 4.98 mg EAG/g MS en polyphénols, 4.376 mg EC/g MS en flavonoïdes et 65.356 mg EC/g MS en tanins. **Conclusion :** Cette étude a montré que l'extrait hydro-acéto-méthanolique des feuilles et des racines de *Scorzonera coronopifolia* a un contenu important en composés phénoliques. En revanche, l'extrait des feuilles est plus riche en polyphénols, flavonoïdes et tanins que l'extrait des racines, suggérant un intérêt potentiel de cette plante.

Mots clés : *Scorzonera coronopifolia*, dosage, extrait hydro, acéto, méthanolique, polyphénols, flavonoïdes, tanins.

ELABORATION ET CARACTÉRISATION DES DÉPÔTS DE CUIVRE SUR L'ACIER INOXYDABLE

SELLOUM DJAMEL (1), ACHI FETHI (2)

1 Laboratoire Croissance et Caractérisation de Nouveaux Semi-conducteurs, département de chimie, faculté des sciences, Université Ferhat Abbas Sétif-1, 19000, Algérie

2 Kasdi Merbah University, Ouargla, 30000, Algeria

Email : achi.fethi@univ-ouargla.dz

Résumé :

Ce travail porte sur l'étude de l'élaboration et de caractérisation des matériaux d'électrodes destinés à une application dans les piles à combustible en utilisant des électrodes à base de Cu. L'anode est élaborée en déposant une couche de cuivre (Cu) sur un substrat en acier inoxydable (AINOX), obtenue par voie électrochimique (électrodéposition). L'originalité de ce travail est de créer des pores dans la surface de cuivre élaborée. Les caractérisations électrochimiques, via la voltammétrie cyclique (CV) et l'analyse chronoampérométrique (CA), ont montré une haute activité et stabilité électrochimique. Les études morphologiques et structurales, réalisées par microscopie à force atomique (AFM), microscopie électronique à balayage (MEB) et diffraction des rayons X (DRX), ont révélé une structure homogène, une morphologie nanométrique uniforme. Ces résultats valident la qualité des dépôts et leur potentiel pour les applications de stockage d'énergie, ouvrant des perspectives pour des dispositifs plus efficaces et durables.

Mots clés : Anode ; Pile à combustible ; Cuivre ; électrodéposition.

PHENOLIC AND FLAVONOID CONTENT AND ANTIOXIDANT EVALUATION OF RED HAWTHORN FRUITS

SIMOUD YASMINE LINA (1), NABET NACIM, SALHI RIM, BENHAMDI AHLEM

1 - University of Bejaia, Laboratory of Biochemistry, Biophysics, Biomathematics and Scientometrics, Faculty of Natural and Life Sciences, 06000, Bejaia, Algeria. (Algérie)

Email : yasmine.simoud@univ-bejaia.dz

Résumé :

Abstract Hawthorns are a large genus of small shrubs and trees belonging to the Rosaceae family, Amygdaloideae subfamily. Several in vitro and in vivo studies have shown that extracts from the leaves and fruits of this species have antihyperglycemic, antihyperlipidemic, antimicrobial, antihypertensive and antiplatelet properties. Nowadays, hawthorn preparations are mainly used as cardioprotective agents. The present study is a contribution in the valorization of local traditional plants growing in the Bejaïa province. The aim of this work was to determine and compare the content of total phenols, flavonoids and antioxidant activity in ethanol extracts obtained with Ultrasound-Assisted Extraction, Soxhlet and Maceration of fruits of the plant species *Crataegus monogyna*, which is known as Red Hawthorn. The content of total phenolic compounds was determined by the spectrophotometric method using Folin-Ciocalteu reagent and the content of flavonoids was determined using aluminum chloride. The in vitro evaluation of the antioxidant activity of the tested extracts was performed using the DPPH method. The amount of total phenolic compounds ranged from 10.95 ± 0.16 to 35.85 ± 1.48 mg GAE/g dw. The ultrasound extract showed the highest content of phenolic compounds (35.85 ± 1.48 mg GAE/g dw). The flavonoid content ranged from 7.65 ± 0.17 to 14.03 ± 0.85 mg EC/g dw, whereby the highest content of flavonoids was found in the maceration extract. The antioxidant activity of the tested extracts has been measured by the percentage of inhibition of the DPPH radical. Based on the obtained results, the variance analysis (ANOVA 1) and the Tukey test indicated that the TPC mean value found in Hawthorn fruits extracted by the ultrasound-assisted method was significantly higher compared to the Soxhlet and Maceration methods. The flavonoid content found in the vegetal material extracted by maceration was significantly higher ($p < 0.05$) higher in ethanolic extracts obtained by ultrasound (72.10 ± 0.25) and Soxhlet (70.68 ± 1.70) and significantly higher than the maceration extract. In conclusion, this study highlighted that the ultrasound-assisted extraction method proved to be the most effective for extracting total phenolic compounds from the fruits of the red hawthorn (*Crataegus monogyna*). However, maceration allowed obtaining the highest levels of flavonoids. Regarding the antioxidant activity evaluated by the DPPH test, the extracts obtained by ultrasound and Soxhlet were slightly more efficient than maceration, but without significant difference.

Mots clés : Antioxidant activity, *Crataegus* spp, polyphenols, Soxhlet, Ultrasound Assisted Extraction

EVALUATING THE EFFICACY OF ASTERACEAE BUTANOLIC EXTRACT AS A GREEN CORROSION INHIBITOR FOR CARBON STEEL IN ACIDIC ENVIRONMENTS USING GRAVIMETRIC ANALYSIS AND THERMODYNAMIC CALCULATIONS.

SIRID REMACHE(1) (2),, ADLENE BENYAMINA(1), MERZOUG BENAHMED(3), AYACHE BOULTIF(4)

(1) Laboratory of Natural Resources and Sensitive Environment Management (LRNAMS)Oum-EL-Bouaghi University, 04000, Algeria

(2) Centre for Scientific and Technical Research in Physico-Chemical Analysis (CRAPC) BP 384, Zone Industrielle Bou-Ismaïl RP 42004 Bou-Ismaïl, Tipaza, Algeria.

(3) Laboratory of Organic Materials and Heterochemistry, (LMOH), Tébessa University, 12002, Algeria.

(4) Laboratory of Applied Chemistry and Materials Technology, Oum-EL-Bouaghi University, 04000, Algeria.

Email : boultif.ayache@univ-ueb.dz

Résumé :

Green corrosion inhibitors represent a promising advancement in the protection of metal materials. With a growing emphasis on eco-friendly alternatives to conventional inhibitors, researchers are increasingly exploring effective and renewable plant extracts for corrosion protection.

In this study, the primary objective was to evaluate the inhibitory action of n-butanol extract (BE) derived from the Asteraceae plant family (APF) on carbon steel (CS) in molar solution medium of chloridryc acid. The corrosion protection performance of the extract was assessed using weight loss methods.

The results indicate that the extract functions as an effective corrosion inhibitor, achieving an impressive inhibition efficiency of 78% at 298K. Moreover, the effectiveness of inhibition generally improves with higher concentrations but decreases as temperatures rise.

The adsorption characteristics of the butanol extract (BE) on the metal surface was observed to adhere to the langmuir isotherm, with calculated thermodynamic parameters (ΔG°_{ads} , ΔH_{ads} , ΔS_{ads}) suggesting a physical, spontaneous, and exothermic adsorption process.

Furthermore, this study underscores the potential of the butanolic extract (BE) from the Asteraceae plant family (APF) as corrosion inhibitors. It provides valuable information on their adsorption behavior and thermodynamic properties, which are essential for developing environmentally friendly corrosion inhibition strategies tailored for acidic environments.

Mots clés : butanol extract, corrosion, green inhibitors, Gravimetric, thermodynamic .

CONTRIBUTION À LA MODÉLISATION DES INTERACTIONS DANS LES BIOMOLÉCULES

SOUFI WASSILA (1),

1 - Université Mustapha Stambouli de Mascara [Algérie] = University Mustapha Stambouli
[Mascara, Algeria] (Algérie)

Email : chimiesoufi@gmail.com

Résumé :

La recherche en biologie ne peut, actuellement, se passer des outils informatiques pour traiter les données produites et optimiser ses avancées .L'un de ces outils est la modélisation moléculaire et plus précisément l'arrimage moléculaire (plus souvent connu sous le terme "docking"). L'emploi initial du "docking" moléculaire a été de prédire et reproduire des complexes protéine-ligand. Le docking est la base de la reconnaissance moléculaire et du type de l'interaction. À chaque protéine cible de structure connue le docking se révèle être la clé dans le design de nouveaux médicaments. Notre travail consiste à étudier l'inhibition des différents enzymes impliquée dans (la maladie de Parkinson) MP avec des différents inhibiteurs par les méthodes de modélisation moléculaire. On a choisi deux programmes de docking moléculaire pour notre travail: Molegro Virtuel Dock et Auto Dock Vina.

Mots clés : Maladie de Parkinson, coumarines, dérivés indoles, catéchols, modélisation moléculaire.

26-27/10/2024

**NEUTRAL AND MULTICHARGED IONS OF ALUMINUM NITRIDE SPECIES:
STRUCTURES, IONIZATION AND DISSOCIATION ENERGIES**

TEKILI ADEL (1), ANTOINE GLORIOD, SAMIRA ABDELLI-MESSACI AND MAJDI HOCHLAF

1 - Faculty of Chemistry, University of Sciences and Technology, Houari Boumediene (USTHB),
BP 32 EL Alia 16111 Bab Ezzouar Algiers, Algeria (Algérie)

Email : tekili7513adel@gmail.com

Résumé :

An ab initio study of $\text{Al}_n\text{N}_m\text{q}^+$ ($n=1-3$; $m=1-3$; $q=0-2$) molecular species have been carried out to investigate their stable equilibrium structures in their lowest respective potential energy surfaces (Figure 1). These molecular species are also characterized spectroscopically via the determination of their vibrational frequencies and accurate energetics, including their relative energies, adiabatic ionization energies, adiabatic double ionization energies and dissociation energies. These electronic computations are performed using the CASSCF/MRCI-F12/aug-cc-pVDZ level after an exploration of these potential energy surfaces using the CASSCF level as implemented in MOLPRO [1]. The set of theoretical data are used to propose plausible explanation of our experimental results obtained in laser induced AlN plasma into nitrogen ambiance [2]. Besides, our work showed that commonly used RCCSD(T) approach is inappropriate due to the multi-configurational character of the molecular species under consideration.

Mots clés : Aluminum Nitride, Laser Produced Plasma, Ab Initio, CASSCF and MRCI.

PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF AN ACTIVATED CARBON

TELHAS DJIHAD (1), HAMDY INES , BOUZID KHADIDJA , REHALI HANANE , BEKIRI FADIA , DJEBABRA SIHEM

1 - 1 Laboratory of LARGHYDE, University of Biskra BP 145 RP, Biskra 07000, Algeria 2
Industrial chemistry Department, University of Biskra (07000), Algeria (Algérie)

Email : djihad.telhas@univ-biskra.dz

Résumé :

With the large consumption of water in several domains. Furthermore, the increase in industrial activities in the world. Therefore, has led to an increase in the amounts of water contaminated with several pollutants, including dyes, heavy metals, and pharmaceutical products. Hence, our research especially focused on the adsorption of water contaminated with dyes, employing plant-derived bio-waste. According to the following stages, the sample was carbonized at the appropriate temperature then activated using NaOH. Following that, infrared (IR) analysis was performed on the samples to distinguish and determine the functional groups that are present in the sample before and after carbonization and activation, and TGA analysis to evaluate both the thermal stability of the material and the presence of volatile components.

Mots clés : charbon, biomass, pollutants, dyes, adsorption

INFLUENCE DE LA TECHNIQUE SUR LES CARACTÉRISTIQUES DES PAPIERS FABRIQUÉS À PARTIR DES SOUS-PRODUITS DES CLADODES

TEMAGOULT Asma 1*, CHERIET KAMEL (2)

1 University Batna 1, Institute of Agriculture and Veterinary Sciences, Food Technology
Department, Laboratory of Food Sciences, 05000, Batna, Algeria

2 LESEI, Laboratory of Industrial Energy Systems Study, University of Batna 2, Algeria

Email : asma.temagoult@univ-batna.dz

Résumé :

Les cladodes d'*Opuntia* sont reconnus comme une matière première riche en fibres, essentielle pour la fabrication de papier. Dans cette étude, deux techniques sont employées pour produire du papier à partir de ces raquettes afin de les valoriser. Ensuite, comparer l'influence du procédé sur la texture et les propriétés physico-chimiques de la pâte obtenue. Le taux de réhydratation du papier à base de la pâte naturelle est supérieur à celui de la pâte chimique. La couleur de cette dernière est plus claire que celle de la pâte naturelle, qui est verdâtre. Les deux types de papier contiennent une quantité significative de fibres et de cellulose. Le test d'étirement a montré que les deux papiers présentent une résistance à la rupture, avec un module de Young plus élevé pour la pâte chimique que pour la pâte naturelle.

Toutes ces caractéristiques techno-fonctionnelles montrent la diversité des possibilités d'utilisation de ce papier, notamment pour les emballages alimentaires et organiques.

Mots clés : Cladodes, valorisation, fibres, papier, texture et caractéristiques physicochimiques.

TRAITEMENT D'UN COMPOSÉ LIGNOCELLULOSIQUE D'ORIGINE VÉGÉTALE PAR KOH POUR AMÉLIORER L'EFFICACITÉ D'ÉLIMINATION D'UN COLORANT CATIONIQUE TOXIQUE D'UNE SOLUTION AQUEUSE

TERKHI MED CHERIF (1,2), BELHADJI KINZA AMEL (2), TERKHI SABRIA (3)

- 1 - Laboratory of Environmental Sciences and Techniques (STEVA), Faculty S.T, Univ. of Mostaganem (Algérie),
2 - Laboratory of Solid Technology and Property, Faculty S.T, Univ. of Mostaganem, Algeria. (Algérie)

Email : meterkhi.univmosta@gmail.com

Résumé :

La lignocellulose est composée de trois biopolymère (lignine, hémicellulose et cellulose) en proportions variables. Elle est très présente dans la paroi des cellules des végétaux. Ses molécules s'organisent en polymères. Dans cette étude on a modifié ce biomatériau lignocellulosique (poudre des feuilles de Ricin commun) par l'hydroxyde de potassium (KOH) pour améliorer l'efficacité d'élimination du bleu de méthylène des solutions aqueuses. Le bioadsorbant a été caractérisé par SEM, DRX et IRTF. Des tests par lots ont été réalisés pour vérifier l'impact de plusieurs paramètres sur le rendement de l'adsorption du bleu de méthylène. Les paramètres d'adsorption étudiés comprennent la concentration initiale de colorant, le pH, le dosage, la cinétique et les isothermes. Le pH_{Hzpc} de la poudre des feuilles de Ricin commun traitée chimiquement était de 7 et le temps d'équilibre de l'adsorption a été atteint après 90 minutes. Les données cinétiques ont été mieux représentées par le modèle du pseudo-second ordre ($R^2=0.999$). La capacité d'élimination maximale prédite par le modèle de Langmuir était de 210 mg de colorant toxique adsorbé par 1 gde biopolymère. Suivant les valeurs d'enthalpie ΔH° , d'entropie ΔS° et d'enthalpie libre ΔG° on a conclu que le processus d'adsorption été exothermique et spontané. Ce travail indique que la poudre des feuilles de Ricin commun traitée par KOH peut être un bioadsorbant efficace pour la dépollution des eaux usées industrielles.

Mots clés : Biopolymère, Feuilles de Ricin, Bleu de méthylène, Bioadsorption, Chimie Verte.

26-27/10/2024

OPTIMIZATION OF Cr(VI) ADSORPTION PARAMETERS USING SPRUCE WASTE BIOSORBENT VIA RESPONSE SURFACE METHODOLOGY

TOBBI OUAFA (1),

1 - Science and technique Department, Faculty of technology, Mostapha Benboulaïd University, Batna 2, Algeria. (Algérie)

Email : o.tobbi@univ-batna2.dz

Résumé :

The optimization of parameters for the retention of hexavalent chromium (Cr(VI)) using spruce waste through the Response Surface Methodology with Box-Behnken Design (RSM-BBD) presents a promising approach for water remediation. In this study, spruce waste, an abundant and cost-effective byproduct of the forestry industry, was converted into an effective biosorbent material for the removal of Cr(VI). Comprehensive analyses were conducted to characterize the physical properties and surface chemistry of the prepared material, revealing an amorphous structure typical of lignocellulosic materials. The optimization of the adsorption process was carried out by evaluating and adjusting factors such as pH, biosorbent dosage, pollutant concentration, and adsorption time. Through the application of RSM-BBD, it was possible to accurately predict and optimize the adsorption process, leading to a significant enhancement in the removal percentage (%R), achieving an efficiency of 100% after optimization. The RSM-BBD model demonstrated excellent predictive quality for data fitting ($R^2 = 0.999$).

Mots clés : optimization, chromium, RSM, BBD, removal.

26-27/10/2024

SYNTHESIS, STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF Co_{7-x}Mn_x(HPO₄)₄(PO₄)₂

TORCHE KHOULOU (1), MHAMED BOUDRAA (2)

- 1 - 1Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale (CHEMS),
Université Constantine-1 25017, Algeria. (Algérie),
2 - Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale (CHEMS),
Université Constantine-1 25017, Algeria. (Algérie)

Email : khouloud.torche@doc.umc.edu.dz

Résumé :

The compound is isotypic with Co and Mn end members of the solid solution Co_{7-x}Mn_x(HPO₄)₄(PO₄)₂ and crystallises in the Fe₇(PO₄)₆ structure type. Elementary analysis, IR spectroscopy, X-ray diffraction, thermal analysis, and magnetic investigation were used to characterise the compound. The three-dimensional framework of MO₆ and MO₅ polyhedra serves as the foundation for the structure. Important interactions upon the molecular packing were performed by the analysis of its Hirshfeld surfaces and compared to the 2D-fingerprint plots.

Mots clés : synthesis, Elementary analysis, IR spectroscopy, X, ray diffraction, thermal analysis, magnetic investigation and Hirshfeld surfaces.

ORGANIC SYNTHESIS OF HYDRAZONES: SPECTRAL ANALYSIS, EVALUATION OF ANTIBACTERIAL ACTIVITY, AND MOLECULAR DOCKING STUDIES

TOUAHRIA YUCEF ISLAM (1),, NADJIB CHAFI (1), ABIR BOUBLIA (2), AMEL BOUDCHICHA (2), OUAHIBA MOUMNI (1) AND YACINE BENGUERBA (4) .

- 1- Laboratory of Electrochemistry of Molecular Materials and Complex (LEMMC). Department of Process Engineering, Faculty of Technology, University of Ferhat ABBAS Setif-1, El-Mabouda campus, 19000 Sétif, Algeria
- 2- Laboratory of Applied Microbiology, Faculty of Natural and Life Sciences, University of Ferhat Abbas
- 3- Laboratoire de Physico-Chimie des Hauts Polymères (LPCHP), D'épartement de G'énie des Procédés, Faculté e de Technologie, Université e Ferhat ABBAS S'etif-1, 19000,
- 4- Laboratoire de Biopharmacie Et Pharmacotechnie (LPBT), Ferhat Abbas S'etif 1 University 19000, S Sétif, Algeria

Email : touahriayoucefiss@gmail.com

Résumé :

The hydrazones were synthesized through a condensation reaction between hydrazines and aldehydes, yielding a range of hydrazone derivatives. The structures of these synthesized compounds were characterized using spectral techniques, including Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy and nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy. FTIR analysis confirmed the presence of the characteristic C=N bond, while NMR provided detailed structural insights, corroborating the successful formation of hydrazone linkages. The synthesized hydrazones' antibacterial activity was evaluated against Gram-positive and Gram-negative bacterial strains using the disc diffusion method. Additionally, minimum inhibitory concentration (MIC) values were determined to quantify their antibacterial potency. To elucidate the molecular basis of the antibacterial effects, molecular docking studies were conducted against bacterial enzyme targets, such as DNA polymerase, to assess the binding affinities of the hydrazone derivatives. The results indicated that certain hydrazones displayed strong interactions with the active sites of these enzymes, suggesting that their antibacterial action may be mediated through the inhibition of critical bacterial enzymes involved in survival and replication.

Mots clés :

PROPRIÉTÉS THERMIQUES DES BIOCOMPOSITES PHBV/LIGNINE ALCALINE

TOUATI NAIMA (1), KAHINA IGGUI LYNDIA ZAIDI, IDRIS ZEMBOUAI

1 - Laboratoire des Matériaux Polymères Avancés (LMPA), Université de Bejaia (Algérie)

Email : tnaima.touati@univ-bejaia.dz

Résumé :

L'objectif de cette étude est l'élaboration et la caractérisation de biocomposites à matrice Poly (3-hydroxybutyrate -co-3 hydroxyvalérate (PHBV) chargée de lignine. Cette dernière est extraite par procédé alcalin à partir du grignon d'olive collecté dans la région d'Amizour (Béjaia). Les biocomposites sont élaborés, à différents taux de charges (1- 2,5 et 5%), par voie fondu dans un mélangeur interne (Brabender) et caractérisés par analyse calorimétrique différentielle (DSC) et analyse thermogravimétrique (ATG). L'analyse de la structure par spectroscopie IRTF et UV montre que la lignine alcaline extraite présente des propriétés structurales similaires aux lignines alcalines rapportées en littérature et extraites à partir d'autres biomasses. L'analyse du spectre IRTF a permis de mettre en évidence la présence de bandes d'absorption caractéristiques des groupements C-O dans les cycles syringyles et guaiaicycles avec un rapport S/G=0,999. L'analyse DSC des biocomposites a montré que l'ajout de la lignine n'affecte pas la température de fusion de PHBV. Cependant, le taux de cristallinité augmente avec l'augmentation de taux de charge. Ces résultats sont confirmés par diffraction aux rayons X et montrent que la lignine a un effet nucléant sur la cristallisation du PHBV. Les résultats de l'analyse thermogravimétrique indiquent que la présence de la lignine à 5% induit une légère augmentation de la stabilité thermique (T10%) d'environ 2°C par rapport au PHBV seul.

Mots clés : Lignine, procédé alcalin, Grignon d'olive, PHBV.

**A HOLISTIC APPROACH TOWARDS CHARACTERIZING THE TAIBET SILICEOUS SAND
(EASTERN ALGERIA) FOR POTENTIAL INDUSTRIAL APPLICATIONS**

**TOUIL MERIEM (1), TOUIL MERIEM , RABIAA BENESSEDDIK , ACHOURI ABDERRAHIM , MEFTAH
NASSIMA (1)**

- 1 - Meriem Touil¹, Nassima meftah², Achouri Abderrahim¹, Rabiaa benesseddik¹ (Algérie),
2 - Development Of New And Renewable Energies In Arid And Saharan Zones, University Of
Ouargla, 30000 Ouargla, Algeria (Algérie),
3 - Department of Physics, Faculty of Exact Sciences, University of El-Oued, 39000 El-Oued,
Algeria (Algérie)

Email : meriemtouil97@gmail.com

Résumé :

Abstract – The present study aims to investigate the physicochemical characteristics of the sand sample from the northeast Algerian Sahara by using Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR), X-ray diffraction (XRD), and Scanning Electron Microscope (SEM/EDX). The XRD and FT-IR analysis confirmed the dominance of Quartz minerals with a high crystalline nature, furthermore, a calcite and feldspar mineral has been detected. The chemical analysis of sand sample by using the EDX technique revealed a high purity of sand sample with 94% of SiO₂ with the presence of a very low amount of other oxides as iron and Aluminum oxides. The scanning electron microscope micrographs show the presence of different shapes and sizes of grains of sand. These results corroborate that this sand has good proprieties for use in photovoltaic applications, but it needs some enrichment to be used for advanced high-tech applications.

Mots clés : Keywords – Quartz, Sand dune, photovoltaic silicon, physicochemical characteristics

QUANTUM CHEMICAL ANALYSIS OF STATIC AND DYNAMIC NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF ALN NANOCAGES

ZAIDI MERIEM (1), DOUNIAZED HANNACHI (2) AND HENRY CHERMETTE (3)

1 Department of Chemistry, Faculty of science, University setif-1, 19000, Setif, Algeria,
Laboratoire de Chimie, Ingenierie Moléculaire et Nanostructures (LCIMN), University Setif 1,
Setif 19000, Algeria.

2 Department of Chemistry, Faculty of science, University batna-1, batna, Algeria,
Laboratoire d'Electrochimie, d'Ingenierie Molecular et de Catalyse Redox(LEIMCR), University
Setif-1, Algeria.

3 University of Lyon, Institute of Analytical Sciences, UMR CNRS 5280, 69622 Villeurbanne
Cedex, France.

Email : zaidimeriem97@gmail.com

Résumé :

Materials marked by considerable first hyperpolarizability values are essential for applications in second harmonic generation attaining frequency doubling. In this study, we investigate two series of nanoparticles, namely $M@b_{64}Al_{12}N_{12}$ and $M@b_{66}Al_{12}N_{12}$, (M from Sc to Zn). The objective is to scrutinize their NLO responses employing calculations based on DFT and TD- nanoparticles methods. These computations are conducted using the 6-311+g(d) level and the sum-over-states approach. The NLO properties of the mentioned nanoparticles are assessed by means of both static and dynamic hyperpolarizabilities ($\beta = \beta$, 1906, 1341, and 1064 nm). These properties are additionally explained on factors such as molecular topology, Waber-Cromer radius, excitation energy, oscillator strengths, transition dipole moment, and one/two-photon resonance effects. The results indicate that the introduction of transition metals into $Al_{12}N_{12}$ leads to a significant rise in both the first and second hyperpolarizabilities. Among the nanoparticles studied, $Sc@b_{64}Al_{12}N_{12}$ exhibits the highest static β_{HRS} , while $Ti@b_{66}Al_{12}N_{12}$ shows the highest $\gamma(0;0,0,0)$. The existence of a closed-quasi-ring structure between the metal and nanocage, accompanied by electron delocalization, augments the β_{HRS}^{∞} values. In the static regime, all nanoparticles display strong dipolar characteristics, with most indicating intramolecular charge transfer transitions. UV-Vis analysis suggests potential application of these compounds in deep ultraviolet laser devices due to their transparency below 200 nm. Our findings suggest that the resonance energy and the significant oscillator strength play an important role in strengthening the dynamic first hyperpolarizability of the nanoparticles under investigation. Furthermore, the hypothesis shows that the increase in first hyperpolarizability β^{∞} is primarily linked to two-photon resonance rather than one-photon resonance. Based on our current understanding, our study introduces new proof that, at static regime ($\beta = \beta$), the first hyperpolarizability of $M@b_{(64/66)}Al_{12}N_{12}$ is correlated with the Waber-Cromer radius of the transition metal. Additionally, in the dynamic regime, the first hyperpolarizability is correlated with the second hyperpolarizability.

Mots clés : hyperpolarizabilities, nanoparticles, DFT.

EVALUATION OF THE DERMATOPROTECTIVE AND ANTIOXIDANT ACTIVITIES OF THE METHANOLIC EXTRACT OF HALOGETON SP

ZEHANI LAMIA (1,2), BOUBEKRI NASSIMA (2,3), KEBBI SARA (2), BOUDRAA KELTOUM (2), DERROUCHE CHAHINEZ(4), TARTOUGA MAYA ABIR (1), SEGHIRI RAMDANE (2)

1 - Département des enseignements communs en sciences de la nature et de la vie, Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie, Université Frères Mentouri Constantine1, Constantine, Algérie (Algérie),

2 - Unité de Recherche Valorisation des Ressources Naturelles, Molécules Bioactives, Analyses Physicochimiques et Biologiques (VARENBIOMOL), Université Frères Mentouri Constantine 1, Algérie (Algérie),

3 - Département de Biologie Animale, Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie, Université Frères Mentouri Constantine1, Constantine, Algérie (Algérie),

4 - Ecole Nationale Supérieure de Biotechnologie Taoufik Khaznadar, Nouveau Pôle Universitaire Ali Mendjeli, Constantine, 25100, Algeria (Algérie)

Email : zehani_lamia@yahoo.com

Résumé :

Medicinal plants have been playing an essential role in the development of human culture as a source of medicines. The current research aimed to verify the antioxidant and photoprotective characteristics of methanolic extract of Halogeton sp. Antioxidant properties of this fraction were assessed using different methods: DPPH, Hydroxyl Radical Scavenging Assay, O-phenanthroline, Reducing Power, and photoprotective effect was estimated by sun protection factor (SPF) assays. Total bioactive contents were determined with a spectrophotometric method. The plant extract showed good antioxidant activity and high total phenolic, flavonoid, and flavonol contents ($220 \pm 09.01 \mu\text{g GAE/mg fraction}$, 80.56 ± 4.25 and $44.25 \pm 3.55 \mu\text{g QE/mg fraction}$, respectively), aiming to highlight the recent advances in current knowledge on Halogeton sp as a source of bioactive flavonoids. Furthermore, the results showed that more than 80 % of DPPH was inhibited by the methanolic extract ($\text{IC}_{50} = 40.33 \pm 3.55 \mu\text{g /mL}$ respectively). However, this extract exhibited a strong reduction of Fe^{3+} with an $\text{A}_{0.5}$ value of ($33.8 \pm 3.25 \mu\text{g/mL}$ respectively) compared with BHA ($\text{A}_{0.5} = 3.64 \pm 0.19 \mu\text{g/ml}$ and $0.93 \pm 0.07 \mu\text{g/ml}$ respectively) and BHT ($\text{A}_{0.5} = 9.62 \pm 0.87 \mu\text{g/ml}$ and $2.24 \pm 0.17 \mu\text{g/ml}$ respectively). In Reducing power assay the antioxydant activity was lower with an $\text{A}_{0.50}$ ($155 \pm 10.2 \mu\text{g/ml}$) compared with standard solution ($\text{A}_{0.50} = 8.41 \pm 0.67 \mu\text{g/mL}$) and Vitamin C ($\text{A}_{0.5} = 9.01 \pm 1.46 \mu\text{g/mL}$). Moreover, Halogeton sp showed high photoprotective activity with the sunprotection factor (SPF) value 38.62 ± 0.56 . As a result, the findings of our work reveal the possibility to use Halogeton sp as an antioxidant and sunscreensing agent in cosmetic formulations.

Mots clés : Halogeton sp, Photoprotective activity, Antioxidant activity, Bioactive contents.

OVERVIEW OF NiTiNOL-BASED SHAPE MEMORY ALLOYS

ZIDANE IMADE (1), MEDDOUR BELKACEM (1), HOUICHA HAROUN (2)

1 - Laboratoire d'ingénierie et sciences des matériaux avancés (Algérie),
2 - Departement of mechanical engineering, university of biskra (Algérie)

Email : zidane.imade@univ-khenchela.dz

Résumé :

This document provides an overview and summary of modern smart materials, specifically shape memory alloys, especially nitinol-based alloys, as they have several unique smart properties that enable us to advance due to their many and varied applications in aerospace, medicine, aviation, and industry.

Mots clés : Smart materials; SMA ; NiTinol; Pseudoelastic ; Superthermal.

26-27/10/2024

DÉVELOPPEMENT UNE STRATÉGIE DE STABILISATION D'HYDROCHLOROTHIAZIDE VIA UN SYSTÈME HYBRIDE TRAITRE COMBINÉE DE B-CYCLODEXTRINES ET L'ARGILE (ACTIVITÉ ET NON ACTIVITÉ)

ZIDANE SALIMA (1,2), H.BOULEGHLEM, H.KHAOUNI, K. BENKHALFFALLAH AND A. GUELIL

1 - University Mohamed BOUDIAF, M'sila (Algérie),

2 - Université Mohamed Boudiaf, BP 166, RP 28000, M'sila, Algérie. (Algérie)

Email : zidane.sabrina@gmail.com

Résumé :

La sélection de molécules actives permettant une formulation nécessitant un minimum d'excipients couramment utilisés et un procédé de fabrication simplifié pour présenter une bonne biodisponibilité, ce qui rend le processus de développement d'un médicament plus rapide, moins complexe et surtout moins coûteux [1]. C'est pourquoi certaines propriétés physico-chimiques sont évaluées très tôt lors de la recherche des molécules actives avant même le choix de la molécule, comme par exemple la solubilité. En conséquence beaucoup d'efforts ont été fait pour augmenter la dissolution des drogues pour cette classe des composés, comme la classe II et la classe IV (y compris l'hydrochlorothiazide (HCTZ) [2] de la classification BCS (Biopharmaceutics Classification System) où les médicaments ont une faible solubilité et une faible perméabilité après administration orale [3]. L'hydrochlorothiazide (HCTZ) est disponible depuis plus de depuis un demi-siècle et reste l'antihypertenseur le plus couramment prescrit dans le monde [4]. En revanche l'HCTZ est très active mais insolubles en milieu aqueux, ce qui rend leur utilisation limitée, pour cette raison on a réfléchi à former un système hybride tertiaire entre l'HCTZ et la β -cyclodextrine [5] et Argile (activité et non activité) (HCTZ: β -CD:Arg). Dans ce contexte, nous avons étudié la solubilité d'HCTZ en présence du facteur de complexation β -CD et du facteur de piégeage Argile et de suivre les résultats obtenus par l'UV-Visible, une comparaison entre les méthodes de formation des complexes et des systèmes hybrides a été réalisé pour déterminer quel type d'argile en présence de β -CD est le plus efficace. Nous avons constaté que le système (HCTZ: β -CD:Arg Activité) est également plus efficace pour atteindre la solubilité d'HCTZ, où la solubilité est amélioré par un facteur de 13.

Mots clés : Hydrochlorothiazide, β , cyclodextrines, argile, stabilisation, système hybride.

OPTICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF ZNO

ZIDANI SARA (1), FAYÇAL BAIRA (2), BAIRA KAOUTHER (1), BENKRIMA YAHMINA (3)

1 department of Food Technology, Laboratory of Food Science (LSA), Institute of Veterinary and Agricultural Sciences, University of Batna 1 Had Lakhdar, Alleys May 19 Biskra Avenue, Batna, 05000, Algeria

2department of Sciences and technology, Faculty of technology, University of Batna 2, Alleys 53, Constantine Avenue. Fesdis, Batna 05078, Algeria

Email : sara.zidani@univ-batna1.dz

Résumé :

The dielectric function and optical properties of zinc oxide (ZnO) nanostructures were investigated by first-principles calculations in the framework of density functional theory (DFT) using the SIESTA code. The calculated lattice constants and internal coordinates are in good agreement with experimental results. The band structure, PDOS, real and imaginary parts of the dielectric function, reflectance and absorbance were calculated. Comparisons with previous studies were also made.

Mots clés : density functional theory, siesta, optical properties, dielectric function.

NOUVELLE PROCÉDURE DE PRÉPARATION DES DÉRIVÉS DE LA QUINAZOLINE.

ZINE DJIHANE (1), BOULCINA RAOUF (2)

1 - Laboratoire de Synthèse de Molécules d'Intérêts Biologiques, Département de Chimie, Faculté des Sciences Exactes, Université de Constantine 1 (Algérie),

2 - Faculté des Sciences et Technologie, Université de Batna 2 (Algérie)

Email : zdjihane98@gmail.com

Résumé :

La quinazoline est une classe importante de composés hétérocycliques. Elle joue un rôle crucial dans les domaines médical et thérapeutique, elle constitue la structure de base de nombreux produits naturels et synthétiques dont l'efficacité a été prouvée dans diverses applications, notamment en tant qu'anti-inflammatoires, anti-oxydants, antimicrobiens, antitumoraux... [1–3] L'objectif principal du présent travail est de développer la synthèse des dérivés de la quinazoline selon une méthode simple et générale en présence d'une large gamme de substrats. Les rendements obtenus sont satisfaisants et l'identification des molécules préparées a été réalisée par les méthodes spectroscopiques RMN ¹H, RMN ¹³C. L'étude de toxicité sur des souches bactériennes et autres propriétés biologiques des composés préparés, ainsi que la détermination de la relation structure- activité, sont envisagés. Références: [1] C. Balakumar, P. Lamba, D. Pran Kishore, B. Lakshmi Narayana, K. Venkat Rao, K. Rajwinder, A. Raghuram Rao, B. Shireesha, B. Narsaiah, Synthesis, anti-inflammatory evaluation and docking studies of some new fluorinated fused quinazolines, European Journal of Medicinal Chemistry 45 (2010) 4904–4913. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2010.07.063>. [2] A. Kumar, P. Sharma, P. Kumari, B. Lal Kalal, Exploration of antimicrobial and antioxidant potential of newly synthesized 2,3-disubstituted quinazoline-4(3H)-ones, Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters 21 (2011) 4353–4357. <https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2011.05.031>. [3] M.N. Noolvi, H.M. Patel, V. Bhardwaj, A. Chauhan, Synthesis and in vitro antitumor activity of substituted quinazoline and quinoxaline derivatives: Search for anticancer agent, European Journal of Medicinal Chemistry 46 (2011) 2327–2346. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2011.03.015>.

Mots clés : quinazoline, hétérocycle, réaction multicomposant.

QSRR-BASED PREDICTION OF RETENTION TIMES FOR 122 VOCs

ZINE MOUNIA,

batna2 University, Algeria

Email : **mounia.zine@univ-batna2.dz**

Résumé :

This paper presents a model for predicting the relative retention times (RTT) of 122 volatile organic compounds (VOCs) using Quantitative Structure-Retention Relationship (QSRR) analysis. Linear and nonlinear QSRR models were developed through Multiple Linear Regression (MLR) and Support Vector Machine (SVM) methods. The dataset was split into training (92 chemicals) and test (30 chemicals) sets using the Kennard-Stone algorithm. Models were built using theoretical descriptors from DRAGON software and optimized with Genetic Algorithm - Variable Subset Selection (GA-VSS). While MLR showed robust performance, the SVM model with a radial basis function (RBF) kernel provided the most accurate predictions, validated by both internal and external methods. Optimal parameters for this model were 17, 0.2, and 0.2.

Mots clés : Relative retention times, descriptors, Volatile Organic Compounds, Multiple Linear Regression (MLR).