

Liste des productions scientifiques (publication, communication, ...)
Année 2019

Laboratoire : Chimie Computationnelle et Nanostructures -LCCN-
Domaine de recherche : Chimie Computationnelle

Publications Internationales								
Titre	Auteurs	Revue	Catégorie de la revue • A ⁺ , A, B- Scopus, B- nonScopus, non classée	Année	Micro domaine	Volume	Page	URL
"Quantitative and qualitative analyses of intermolecular interactions in neutral/deprotonated aspirin@ β -CD inclusion complexes: QTAIM and NBO analyses	Belgacem Bezzina, Rayenne Djemil, Nadja Bensouilah	Journal of Theoretical Chemistry Accounts	A	2019	Chimie analytique	138	43	https://doi.org/10.1007/s00214-019-2429-y
" DFT investigation of host-guest interactions between α -Terpineol and β -cyclodextrin "	Houria Bouchemela, Fatiha Madi, Leila Nouar,	Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry	A	2019	Chimie analytique	95	247-258	https://link.springer.com/article/10.1007/s10847-019-00940-80
" Synthesis and optical properties of novel thermally stable bis-merocyanine dyes "	Nassiba Hayet-Fatiha Madi, Gilbert Kirsch	Journal of Molecular Structure	A	2019	Chimie analytique	1188	185-195	http://www.elsevier.com/locate/molstruc

"Density functional theories study of the interactions between host β -Cyclodextrin and guest 8-Anilinoanthracene-1-sulfonate: Molecular structure, HOMO, LUMO, NBO, QTAIM and NMR analyses"	HIMRI Safia, LAFIFI Ismahan	Journal of Molecular Liquids	A	2019	Chimie analytique	280	218-229	https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.01.019
"Computational study on intermolecular charge transfer complex of 2,2'-bipyridine with picric acid: TD-DFT, NBO and QTAIM analysis"	FatihaMadi, Mohamed Bououdina	Journal of Materials Research Express	A	2019	Chimie analytique	6	7	DOI: 10.1088/2053-1591/ab1507
" Interactions in inclusion complex of β cyclodextrin/l Methionine: DFT computational studies"	Merabet Nora, LafifiIsmahan	Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry.	A	2019	Chimie analytique	96	43-54	DOI https://doi.org/10.1007/s10847-019-00948-0
" DFT INVESTIGATION OF A CHARGE-TRANSFER COMPLEX FORMATION BETWEENp-PHENYLENEDIAMINE AND 3,5-DINITROSALICYLIC ACI "	A. S. Athmani, Fatiha. Madi	Journal of Structural Chemistry	A	2019	Chimieanalytique	60	1906-1916	https://doi.org/10.1134/S0022476619120060

Publications nationales

Titre	Auteurs	Revue	Catégorie de la revue • B-Scopus, B-nonScopus, non classée	Année	Micro domaine	Volume	Page	URL

Communications Internationales

Titre	Auteurs	Intitulé de manifestation	• Proceeding de la conférence indexé dans Scopus(oui/non)	Micro domaine	Année	Volume	Page	URL
" THEORETICAL STUDY OF INTERACTION BETWEEN INHIBITORS AND THE ISOMERIC CoNFIGURATTON OF (ZE)-ENDOXTFEN BY NBO, MEPAND CHARGE TRANSFER "	Largate Leila	Fifth International Conference on Energy, Materials, Applied Energetics and Pollution [ICEMAEP'19] Constantine, Algeria	<i>non</i>	Chimieanalytique	<i>2019</i>	/	/	https://www.umc.edu.dz/index.php/fr/
" Quantitative Conformational Stability Host- Guest Complex of tolfenamic acid with b-cyclodextrin : computational study",	Bouhadiba Abdelaziz	2 ndInternational conference on advanced engineering in petrochemical industry .	<i>non</i>	Chimie analytique	<i>2019</i>	/	/	http://www.univ-skikda.dz/index.php/fr/manifestations-scientifiques
"Computational study of the inclusion complex by quantum methods"	Rahim Mohamed	2 ndInternational conference on advanced engineering in petrochemical industry	<i>non</i>	Chimie analytique	<i>2019</i>	/	/	http://www.univ-skikda.dz/index.php/fr/manifestations-scientifiques

" Molecular Docking Of The Inhibition Of CYP3A4 By Grapefruit Juice"	Rayenne DJEMIL	International Conference on Natural and Applied Science and Engineering (ICNASEN-2019)	<i>non</i>	Chimie analytique	2019	/	/	https://10times.com/icnas/en
"Corrosion inhibition of copper in 1M HNO3 solution by oleic acid: weight loss, electrochemical methods and quantum chemical calculations"	Soraya ,Rayenne DJEMIL	International Conference on Natural and Applied Science and Engineering (ICNASEN-2019),	<i>non</i>	Chimie analytique	2019	/	/	https://10times.com/icnas/en

Communications nationales

Titre	Auteurs	Intitulé de manifestation	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Proceeding de la conférence indexé dans Scopus(oui/non)</i> 	Micro domaine	Année	Volume	Page	URL
"Molecular docking study of ARN2508 as COXS and TAAH inhibitors"	Nadia Lachi	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	Chimie analytique	2019	/	/	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
" La méthylation de l'ADN : Approche théorique"	Lsmahan Lafifi	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et	<i>non</i>	Chimie analytique	2019	/	/	http://lccn.univ-guelma.dz/site

		<i>la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie</i>						s/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
" Characterization theoretical study of the isomeric configuration of (z/e)-endoxifen by FT-IR, NMR and UV	Leila Largate	<i>1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie</i>	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.univ-guelma.dz/site/s/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
"A DFT study of inclusion complexes between lidocaine and β -cyclodextrin in vacuum and in water"	Imane Djellala	<i>1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie</i>	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.univ-guelma.dz/site/s/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
"A DFT study of inclusion complexes of the anti-tumoral drug Emodin with cucurbit[n]uril(n=6,7)",	Imane Djellala	<i>1^{re} Journées d'Etude sur la Chimie et ses Applications (JECA-1-2019) Batna-Algérie</i>	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	
" Curcumin and its Biological Application	Mezari Yasmine, Nouar Leila, Madi Fatiha	<i>1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie</i>	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.univ-guelma.dz/site/s/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_

								sncamm2019%20.pdf
" Etude de la stabilité du complexe de la Curcumine- BétaCyclodextrine	Mezari Yasmine, Nouar Leila, Madi Fatiha	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	Chimie analytique	2019	/	/	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
"Etude par les méthodes quantiques des complexes d'inclusions Taxifoline avec les cyclodextrines naturels"	Mohamed RAHIM	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	Chimie analytique	2019	/	/	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
" Encapsulation of flavonoid Fisetin with β -cyclodextrin: spectral and molecular modeling studies"	FaresDjebihahBouhadiba , M Rahim	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	Chimie analytique	2019	/	/	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
"Structural and vibrational properties of 4-amino-n-pyrimidin-2yl-benzene sulfonamide: A computational study"	Selma Amrani	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	Chimie analytique	2019	/	/	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_

								sncamm2019%20.pdf
<i>''DFT investigation of charge transfer complex formation between p-phenylenediamine and 3,5-dinitrosalicylic acid''</i>	Ali Salah Athmani	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
<i>''Etude théorique de l'inclusion du pyrazol dans la βéta-cyclodextrine'', ''Etude théorique de l'inclusion du pyrazol dans la βéta-cyclodextrine''</i>	HouriaBouche mella	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
<i>Activité antioxydante de l'huile d'olive</i>	ChekattiLeyla	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.unguelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
<i>''Détermination des interactions intermoléculaires dans le complexe d'inclusion : vanilline/βéta-cyclodextrine''</i>	Meriem Gharibi, Madi Fatiha, Nouarleila,	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf

" Etude par docking moléculaire de l'inhibition des CYP3A4 par le jus de pamplemousse "	BENCHEIKH Bohra	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
" Etude théorique de l'oxydation atmosphérique de la butadiène "	DJEMIL Rayenne	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
" Etude du mécanisme réactionnel de l'oxydation de l'acide linoléique par les méthodes de docking moléculaire "	RAHMOUNI Halima ,DJEMIL Rayenne	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
Etude théorique des propriétés structurales et électroniques d'une molécule bioactive (base de schiff)"	HADJAR Samah	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	<i>/</i>	<i>/</i>	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf

" Etude computationnelle spectroscopique d'untriazacyclohexane"	A.Zaboub Fatiha. Madi	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	/	/	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf
"Etude par modélisation moléculaire des molécules bioactives (flavonoids)	HADJAR Samah	1^{er} Séminaire National sur la Chimie Appliquée et la Modélisation moléculaire Guelma, Algérie	<i>non</i>	<i>Chimie analytique</i>	<i>2019</i>	/	/	http://lccn.univ-guelma.dz/sites/lccn.univ-guelma.dz/files/Recueil%20des%20resumes_sncamm2019%20.pdf