

**Liste des productions scientifiques(publication, communication,...)
Année 2021**

Etablissement Universitaire: Université 8 Mai 1945 Guelma
Faculté: Mathématiques, Informatique et Science de la matière
Laboratoire: Chimie Appliquée LCA

Productions Scientifiques 2021								
Publications								
Titre	Auteurs	Revue	Année	Catégorie de la revue: A+, A, B-Scopus, B-non Scopus, non classée	Volume	Page	URL	
Publications Nationales	Synthèse et prédiction in silico des propriétés ADME/Tox de nouvelles sulfonyles	Hassina FISLI Mohamed Lyamine CHELAGHMIA Mohamed ABDAOUI	Algerian Journal of Engineering Architecture and Urbanism AJEAU	2021		Vol.5 Nr.5	452-463	
	Étude en solution et à l'état solide des complexes de la loratadine avec le fer (II)	Hassina FISLI Marwa BENMABROUK Mohamed Lyamine CHELAGHMIA	Algerian Journal of Engineering Architecture and Urbanism AJEAU	2021		Vol.5 Nr.5	464-477	
	QUANTITATIVE ANALYSES OF POLYPHENOLS AND METHYLXANTHINES IN COMMERCIAL GREEN TEA	Yamina BOULMOKH Karima BELGUIDOUM Habiba AMIRA-GUEBAILIA	Algerian Journal of Engineering Architecture and Urbanism AJEAU	2021		Vol.5 Nr.5	1134-1140	
Publications Internationales	Disposable non-enzymatic electrochemical glucose sensors based on screen-printed graphite macroelectrodes modified via a facile methodology with Ni, Cu, and Ni/Cu hydroxides are shown to accurately determine glucose in real human serum blood samples.	M. L. Chelaghmia H. Fisli M. Nacef D. A.C. Brownson A. M. Affoune H. Satha Craig E. Banks	Analytical Methods	2021	A	13(25)	2812–2822	https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2021/ay/d1ay00056j/unauth
	The Relationship Between Solvatochromic Properties and In Silico ADME Parameters of New Chloroethylnitrosourea Derivatives with Potential Anticancer Activity and Their β -Cyclodextrin Complexes	H. Fisli A. Hennig M. L. Chelaghmia M. Abdaoui	Spectrochimica Acta Part A Molecular	2021	A	253	119579	www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1386142521001554
	Theoretical investigation of inclusion complex of 2-methyl mercapto phenothiazine with hydroxy propyl β -cyclodextrin by DFT approaches	Y. Mezari L. Nouar F. Madi A. Guendouzi I. Djellala I. Lafifi R. Merdes A. Bouhadiba B. Houari	Bulgarian Chemical Communications	2021	A	53	196-210	DOI:10.34049/bcc.53.2.5329

Publications Internationales	Investigation of antioxidant activity of epigallocatechin gallate and as compared to resveratrol and ascorbic acid: experimental and theoretical insights	Yamina Boulmokh Karima Belguidoum Faïza Meddour Habiba Amira-Guebailia	Journal of Molecular Structure	2021	A	1264	133216	https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.133216
	Electronic and Magnetic Properties of Small Nickel Clusters and Their Interaction with CO Molecule	Abdel-Ghani Boudjahem Mouhssin Boulbazine Meryem Dardare	Journal of Superconductivity and Novel Magnetism	2021	A	34	561-570	https://doi.org/10.1007/s10948-020-05720-x
	Molecular modeling study of structures, Hirschfeld surface, NBO, AIM, RDG, IGM and IHNMR of thymoquinone/hydroxypropyl-β-cyclodextrin inclusion complex from QM calculations	Kadri Rayenea Djellala Imane Bouhadiba Abdelaziz Nouar Leila Madi Fatiha Guendouzi Abdelkrim Gassoumi Bouzid Lafifi Ismahane Houari Brahim Oumeddour Rabah	Journal of Molecular Structure	2021	A	1249	131565	https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131565
	Complex of 4-(2-aminophenyl) 1,2,3- thiadiazole with at different exchange-correlation functionals. DOS, NBO, QTAIM and RDG analyses 2,3-dichloro-5,6-dicyano-1,4-benzoquinone: Experimental study and investigation at different exchange-correlation functionals. DOS, NBO, QTAIM and RDG analyses	Hadjer Bougherara Rayene Kadri Mekki Kadri Mohamed Yekhllef Abdecharif Boumaza	Journal of Molecular Structure	2021	A	1249	131565	https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131565

Productions Scientifiques 2021								
Communications								
	Titre	Auteurs	Intitulé de manifestation	Année	Procédure de la conférence indexé dans Scopus (oui /non)	Volume	Page	URL
Communications Nationales	Inhibition de corrosion de l'acier en milieu acide par l'extrait des feuilles d'olivier	RAHMOUNI Halima NIGRI Soraya OUMEDDOUR Rabah	13eme journée thésards sur la Chimie Appliquée & la Modélisation moléculaire	2021			8	www.univ-guelma.dz/recherche/labs/lca/present.html
	Etude théorique par modélisation moléculaire de la formation: du complexe Gingerol / β-Cyclodextrine	Habiba BOUZIT Maamar STITI Nadia Taibib Sehailia Moussa	13eme journée thésards sur la Chimie Appliquée & la Modélisation moléculaire	2021			11	
	Synthèse, Caractérisation physicochimique et Etude Théorique du Complexe Cu(II) /Acide Lipoiqne	Maamar STITI Habiba BOUZIT Rabah KSOURI Abdel-Ghani BOUDJAHAM	13eme journée thésards sur la Chimie Appliquée & la Modélisation moléculaire	2021			10	
	A Computational Study of inclusion complex of flavonoid fisetin with β-Cyclodextrin	F. Djebiha R. Merdes A. Bouhadiba M. Rahim	13eme journée thésards sur la Chimie Appliquée & la Modélisation moléculaire	2021			12-13-14	

Adsorption of the Guanine Molecule Over the Pristine, Nb- and Au-doped Boron Nitride Nanosheets: A DFT Study	Meryem Dardare Abdel-Ghani Boudjahem	13eme journée thésards sur la Chimie Appliquée & la Modélisation moléculaire	2021			15	
DFT study of inclusion complex of 2-Methyl MercaptoPhenothiazine with Hydroxy Propyl β -Cyclodextrin : EDA, NBO, QTAIM, and NCI analyses	Mezari Yasmine Nouar Leila Merdes Rachid Madi Fatiha Djellala Imane	13eme journée thésards sur la Chimie Appliquée & la Modélisation moléculaire	2021			16	http://lcn.univ-guelma.dz
THEORITICAL STUDY OF THE NON-COVALENT INTERACTIONS IN THE HOST-GUEST BIOMOLECULAR SYSTEM	KADRI Rayene NOUAR Leila OUMEDOUR Rabah MADI Fatiha	13eme journée thésards sur la Chimie Appliquée & la Modélisation moléculaire	2021			16-17	
Étude théorique sur l'extraction, caractérisation, et l'application de cellulose et les matériaux à base de cellulose	BAHLOUL Asma BENYAHOU Ali BOUAKKAZ Samia	13eme journée thésards sur la Chimie Appliquée & la Modélisation moléculaire	2021			17-18	
Synthesis, spectroscopic and thermodynamic study of charge transfer complexes of natural drug rutin as donor with II-acceptors; 2,3-dichloro-5,6-dicyano-1,4-benzoquinone and tetracyanoethylene	HAMAMDIA Fatima AMIRA- GUEBAILIA Habiba FISLI Hassina CHELAGHMIA Mohamed Lyamine	13eme journée thésards sur la Chimie Appliquée & la Modélisation moléculaire	2021			19	
Étude Physicochimique des Complexes Gliclazide-Zinc	NAHALI Mouna MERABTI selma	13eme journée thésards sur la Chimie Appliquée & la Modélisation moléculaire	2021			20	
"La propriété industrielle : le brevet d'invention" animé par l'institut National Algérien de la Propriété Industrielle "INAPI" en marge du séminaire national	KADRI Rayene NOUAR Leila OUMEDOUR Rabah MADI Fatiha BAHLOUL Asma	The Algerian Entrepreneurial Ecosystem: Towards Integration and Synergy	2021				
Electronic and Magnetic Properties of Small Nickel Clusters and Their Interaction with CO Molecule	Meryem Dardare Abdel-Ghani Boudjahem	THE 1 ST NATIONAL VIRTUAL CONFERENCE ON CHEMICAL PROCESS AND ENVIRONMENTAL ENGINEERING NVCCPEE 2021	2021				
Modeling study of the supramoleculaire système: thymoquinone /Hydroxypropyl- β -cyclodextrin inclusion complex from QM calculations	KADRI Rayene NOUAR Leila OUMEDOUR Rabah MADI Fatiha	THE 1 ST NATIONAL VIRTUAL CONFERENCE ON CHEMICAL PROCESS AND ENVIRONMENTAL ENGINEERING NVCCPEE 2021	2021				
DFT investigation of host-guest interactions between two vitamins (Nicotinic, Ascorbic acid) and β -cyclodextrin	Yasmine MEZARI Leila Nouar Rachid MERDES Fatiha MADI	Le 2ème Séminaire National des Sciences d'Interfaces Chimie-Biologie (2eme SNSI C-B)	2021				
Theoretical investigation into inclusion complex of diclofenac with β -cyclodextrin at M06-2Xlevel. NBO, QTAIM and RDG analysis	KADRI Rayene NOUAR Leila MADI Fatiha OUMEDOUR Rabah	Le 2ème Séminaire National des Sciences d'Interfaces Chimie-Biologie (2eme SNSI C-B)	2021				
Corrosion inhibition of steel by orange peel extract: gravimetric electrochemical and theoretical study	Halima RAHMOUNI S.NIGRI I.BRINIS R.DJEMIL	Le 2ème Séminaire National des Sciences d'Interfaces Chimie-Biologie (2eme SNSI C-B)	2021				

Inhibition of A9M steel corrosion in acidic medium by extract of fennel leaves	RAHMOUNI Halima Soraya NIGRI Aicha nihed BENOTHMANE Amira FETATNIA Rabah OUMEDDOUR	1er Séminaire National en Génie des Procédés SNGP2021	2021				
Evaluation of the Raw Water Treatment Process for Use in the Agroalimentary Industry	H. Fisli M.L. Chelaghmia N. Bensouilah N. Dhaoui F. Bousaid F. Harraz	2nd International Symposium on Materials Chemistry, 16-20 May 2021, Boumerdes- Algeria	2021	Oui			
Synthèse, caractérisation et prédiction in silico des propriétés ADME/TOX d'une nouvelle série d'agents anticancéreux potentiels	Hassina FISLI Mohamed Lyamine CHELAGHMIA Mohamed ABDAOUI	Séminaire international sur les sciences de la matière (physique et chimie)	2021				
Etude en solution et à l'état solide des complexes de fer (II) avec l'antihistaminique commercialisé loratadine	Hassina FISLI Marwa BENMABROUK Mohamed Lyamine CHELAGHMIA	Séminaire international sur les sciences de la matière (physique et chimie)	2021				
Acrylamide Determination In Roasted Coffee As A Key Indicator Of Coffee Adulteration: An Hplc/ Dad Study	Karima Belguidoum Yamina Boulmogh Habiba Amira-Guebailia	1st International Seminar on Pollution, Health, Environment and Bio-monitoring SIPSEB'21 DECEMBER 27-28, 2021, SKIKDA	2021				
Reversed phase HPLC-DAD for simultaneous quantification of catechins, methylxantines and gallic acid in green tea: Effect of extraction method	Y. Boulmogh K. Belguidoum H. Amira-Guebailia	SÉMINAIRE INTERNATIONAL SUR LES SCIENCES DE LA MATIERE (PHYSIQUE ET CHIMIE)	2021				
Theoretical investigation of inclusion complex of 2-methyl mercapto phenothiazine with hydroxy propyl β -cyclodextrin by DFT approaches	Yasmine MEZARI Leila Nouar Rachid MERDES Fatiha MADI Djellala Imane	SÉMINAIRE INTERNATIONAL SUR LES SCIENCES DE LA MATIERE (PHYSIQUE ET CHIMIE)	2021				
extraction, characterization and application of cellulose nanocrystals-based materials: a review	BAHLOUL Asma BOUAKKAZ Samia BENYAHOU Ali	SÉMINAIRE INTERNATIONAL SUR LES SCIENCES DE LA MATIERE (PHYSIQUE ET CHIMIE)	2021				
Preparation and reactivity of silver-palladium nanoparticles prepared by chemical method	Meryem DEREARE	1ère Conférence Internationale Sur les Procédés Industriels et la Conservation Environnementale, CISPICE'2021 Skikda	2021				
Hydroxy propyl β -cyclodextrin inclusion complexes with 2-methyl mercapto phenothiazine: electronic properties, AIM, and NBO study via DFT	Yasmine MEZARI	1ère Conférence Internationale Sur les Procédés Industriels et la Conservation Environnementale, CISPICE'2021 Skikda	2021				
Conformational Investigation of the Encapsulation of guanine Into β -Cyclodextrin	Yasmine MEZARI Leila Nouar Rachid MERDES Fatiha MADI	3rd International Conference On Advanced Engineering in Petrochemical Industry 30 November-02 December 2021 Skikda-Algeria	2021				
DFT and experimental studies on Copper (II) and Iron metallic (II) ions with doxorubicinligand	KADRI Rayene NOUAR Leila OUMEDDOUR Rabah Mekki KADRI Achour SERIDI MADI Fatiha	3rd International Conference On Advanced Engineering in Petrochemical Industry 30 November-02 December 2021 Skikda-Algeria	2021				

Communications Internationales	DFT and Experimental Studies on COPPER (II) And IRON metallic (II) Ions with DOXORUBICIN Ligand	KADRI Rayene	1ère Conférence Internationale Sur les Procédés Industriels et la Conservation Environnementale, CISPICE'2021 Skikda	2021				
	HYDROSOLUBILITY IMPROVEMENT OF DICLOFENAC: MODELIND STUDY	KADRI Rayene NOUAR Leila OUMEDOUR Rabah MADI Fatiha Mekki KADRI	1st International Conference on Sustainable Energy and Advanced Materials	2021				
	Synthesis of poly-nitrogenous polycyclic compounds	BAHLOUL Asma	1ère Conférence Internationale Sur les Procédés Industriels et la Conservation Environnementale, CISPICE'2021 Skikda	2021				