**République Algérienne Démocratique et Populaire**

**Ministère de l’Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique**

**Université 8 Mai 1945 Guelma**

 **Faculté des Sciences et de la Technologie**

 **Département de Génie des Procédés**

**Laboratoire de rattachement: Laboratoire de Physique de Guelma (LPG)**

**THÈSE**

**EN VUE DE L’OBTENTION DU DIPLOME DE**

**DOCTORAT EN 3ème CYCLE**

Domaine : Sciences et Technologie

Filière : Génie des Procédés

Spécialité : Génie des Matériaux

**Présentée par**

**YAHIAOUI Khawla**

***Intitulée***

**Investigations computationnelles structurales, électroniques et spectrales de quelques complexes de type récepteur-substrat**

Soutenue le

Devant le Jury composé de :

**Mr SATHA Hamid**

**Mme SERIDI Lynda**

**Mme BERREDJEM Yamina**

**Mme MADI Fatiha**

**Mr NEMAMCHAAbderrafik**

Professeur

Professeur

Professeur

Professeur

Professeur

Univ. 8 Mai 1945 Guelma

Univ. 8 Mai 1945 Guelma

Univ. Med Cherif Messaadia Souk Ahras

Univ. 8 Mai 1945 Guelma

Univ. 8 Mai 1945 Guelma

Président

Directrice de thèse

Examinatrice

Examinatrice

Examinateur

**Année Universitaire** : 2021/2022

