



Recueil des résumés
du
1er Séminaire National sur la
Simulation Numérique dans les Sciences Appliquées, SNSA I-2016.

15 Décembre 2016, GUELMA.

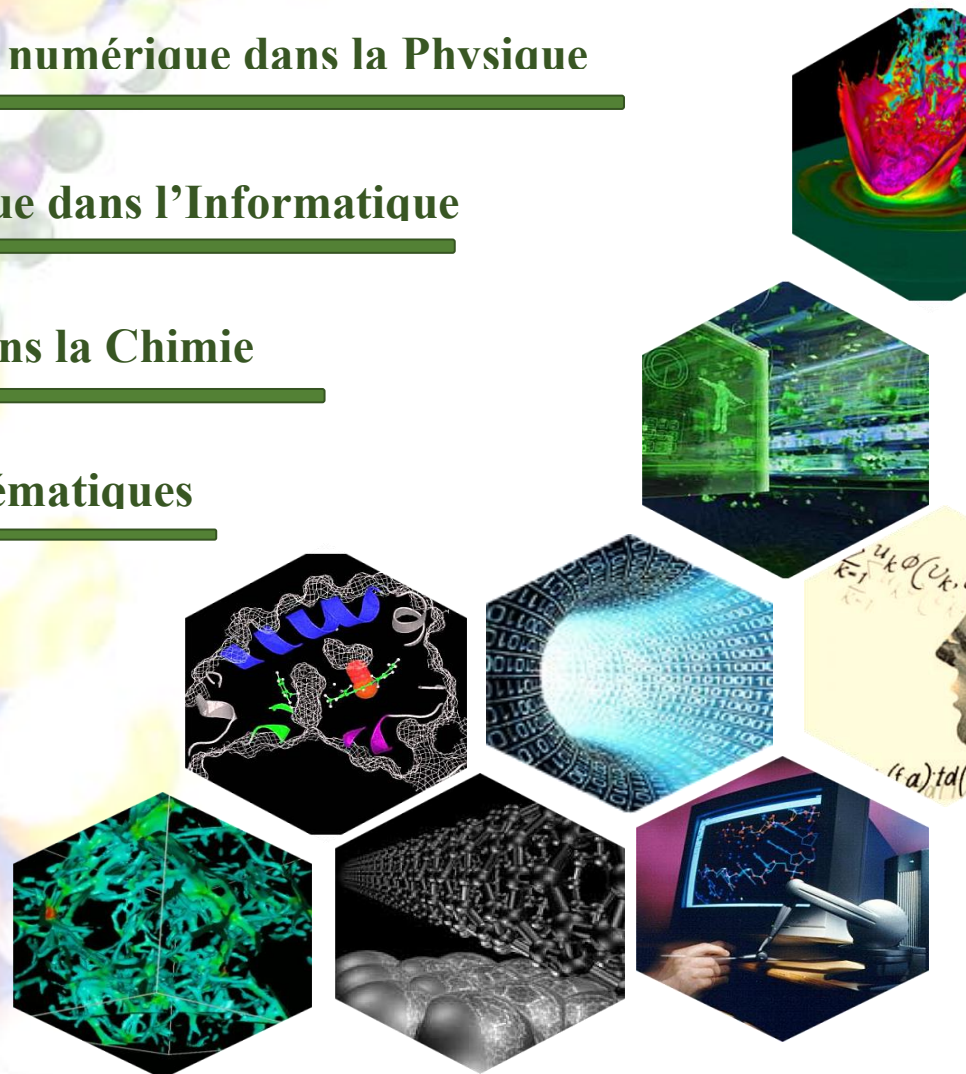
Thématiques :

La Simulation numérique dans la Physique

La Simulation numérique dans l'Informatique

La Simulation numérique dans la Chimie

La Simulation numérique dans les Mathématiques



SNSA I-2016

Avant propos

La simulation est une méthode incontournable, utilisée dans différents domaines de la recherche scientifique. A cause de ses vertus, elle est utilisée intensivement dans la prédiction de certains comportements de la matière par les physiciens et par les chimistes activant dans le domaine des sciences des matériaux ; elle est également utilisée par les mathématiciens dans beaucoup de domaines de recherche et notamment pour décrire, expliquer et prédire certains phénomènes naturels. Son avantage est qu'elle ne nécessite pas beaucoup de moyens pour répondre aux besoins des chercheurs, contrairement aux sciences expérimentales. La simulation s'est tout le temps montrée efficace dans l'orientation des chercheurs pour mener à bien et dans des conditions aisées leur recherche tout en optimisant le temps et les couts.

Il y a quelques années, la simulation ne faisait pas la priorité de la grande majorité des chercheurs scientifiques dont les travaux versaient beaucoup plus dans le domaine de la recherche expérimentale que dans la recherche théorique. Aujourd'hui, avec le développement des outils informatiques et l'amélioration continue de leurs performances, un renversement de situation est observé.

A cause de la multiplication du nombre des usagers de la simulation, comme méthode utilisée dans l'étude de la matière surtout, beaucoup de groupes de recherche dans ce domaine ont été créés dans différents établissements de l'enseignement supérieur dans notre pays. Le premier séminaire national sur la simulation numérique dans les sciences appliquées, tenu à l'université du 08 mai 1945 de Guelma vient dans cette optique de promouvoir le développement de la simulation comme méthode de travail et de renforcer à l'occasion le lien entre les groupes de chercheurs travaillant dans ce domaine pour une meilleure maîtrise de cette méthode et pour une meilleure rentabilité de la recherche scientifique.

Président de la manifestation : Pr. MEDDOUR Athmane

Comité d'organisation :

Président: **Dr. GUEBBAI Hamza**

Membres :

Dr. KOUAHLA M.N.	Dr. HELLACI S.	BENDIF B.
Dr. CHEGUATEMI S.	Dr. DAOUDI M.	Dr. FAROU B.
Mr. DIDA R.	Mr. SEGNI S.	Mr. GHIAT M.
BOULBAZINE M.	CHERIET M.	G HARIBI M.
BOURDJIBA Z.	ABDELI Z.	HAMIDENE
GOUS M.E.	GUECHI N.	W. SALAH S.
LEMITA S.		

Comité scientifique :

Président : **Pr. MERDES Rachid., Université de Guelma**

Membres :

Pr.BENNACER B., Université de Guelma	Pr.SERIDI H., Université de Guelma
Pr.CHETTIBI S., Université de Guelma	Pr.AYADI A., Université d'Oum El Bouaghi
Pr.BOUSSETILA N., Université de Guelma	Pr. GUEBAILIA H., Université de Guelma
Pr.AISSAOUI M.Z., Université de Guelma	Pr. AYADA M.E., Université de Constantine
Pr. BENSLIM N., Université de Annaba	Pr. ATTAF N., Université de Constantine
Pr. KECHEKAR N., Université de Constantine	Dr.SERIDI A., Université de Guelma
Pr.NOUAR L., Université de Guelma	Pr.HEDDADI S., Université de Guelma
Pr.ELLAGOUNE F., Université de Guelma	Pr. BOUCERADJ N., Université d'Annaba
Pr. DERABLA S., Université de Sétif	

sommaire			
Conférences plénières			
	FUJITA YASHIMA Hisao	Modélisation, approximation, lois de la nature	i
	BENNECER Badis	Ternary compounds: Ab initio studies	ii
Atelier 1 : Physique			
ID	AUTEURS	INTITULE	PAGES
1	ABDELHADI Sofiane	Etude des propriétés structurales, élastiques du binaire PrSe	1
2	ABDELLI Zeyneb	Demi métallicité et magnétisme de GeTe dopé par les métaux de transition Mn et Fe	2
3	ACHOURI Mohamed Malik	Etude numérique des verres tellurites par la dynamique moléculaire	3
4	AGUIB Salah	Modélisation numérique du comportement dynamique des structures intelligentes	4
5	AIT MAMMAR Sofiane	Analyse du spectre d'émission VUV de l'ion libre Er ³⁺ (Er IV).	5
6	ALLAM Zehor	High-Performance Solar-Blind Photodetector Based on AlGaIn/GaN Heterostructure	6
7	AMARA Ali	Etude théorique des propriétés structurale, électroniques et optiques du ZnY ₂ O ₄ , en utilisant le code castep	7
8	AOUATI Redha	Monte Carlo simulation of electron trajectory in gap semiconductor	8
9	ARAB kamel	Effet des configurations à cœur excité sur la réduction des probabilités de transition du faisceau 5p ₆ 4f ₃ -5p ₆ 4f ₂ 5d dans les lanthanides faiblement ionisés : cas de Nd IV	9
10	AZZAZ Hamza	Simulation numérique sur l'influence de la présence de défauts sur la structure et la géométrie de nanotube de carbone	10
11	BAAZIZ Hakim	Ab initio full-potential study of the properties structural electronic and thermal of compounds CeX (X=N, P, As, Sb and Bi)	11
12	BAIRA Melouka	Etude Ab-initio de la structure ZnTe dope à l'Europium	12
13	BAKHTATOU Ali	Quasiparticle self-consistent GW study of AlN and GaN monolayers	13
14	BARAKA Oussama	Electronic structure and mechanical properties of X ₂ MnSn (X= Cu, Ni, Pd) under hydrostatic pressure: GGA+U calculations	14
15	BEKHTI-SIAD Amara	Etude ab-initio des propriétés thermoélectroniques du matériau Sr ₃ AlAs ₃	15
16	BEKKI Belmorsli	First-principles study of structural and elastic properties of Cu ₂ MgSiS ₄ in four phases	16
17	BELGHIT Rafik	Prediction of anisotropic mechanical properties of CZTS crystal by using FP-lapw method	17
18	BELHADJ Mohamed El amine	First principle calculations study of cubic new Heusler Ti ₂ FeSi alloy by density functional calculations	18
19	BENAMER Ali	First principles study of structural, electronic and magnetic properties of ScXP ₃ (X = B, C)	19
20	BENATIA Mohamed	Structural, elastic, and electronic properties of ACNi ₃ (A = Al, Ga, In) antiperovskites	20
21	BENCHEHIMA Miloud	First principle study of structural stability and optoelectronic properties of the III–Antimony binary compounds	21
22	BENCHEIKH Rabah	Etude de stabilité et transition de phase du composé NaBH ₄	22
23	BORDJIBA Zeyneb	Investigation of structural and electronic properties of ferromagnetic Mg _{0.75} TM _{0.25} Te (TM = Mn, Fe) alloys: An ab-initio calculation	23
24	BOUABCA Asma	Half-metallic completely compensated ferrimagnets in Cr doped BaP	24
25	BOUALLEG Mohamed	Etude ab initio des propriétés dynamiques des composés binaires Na ₂ X (X = Se, Te)	25
26	BOUAMAMA Lemya	First principal study of F atom adsorption on Si(111) surface	26
27	BOUCERREDJ Noureddine	Etude par simulation numérique l'interaction laser femtoseconde intense agrégats atomiques	27
28	BOUDOUR Samah	Numerical Simulation of CdTe thin films solar cells using AMPS	28
29	BOUDRIFA Ouassila	Structural, mechanical, electronic, elastic, and chemical bonding properties of hydrides Sr ₂ RuH ₆ : an ab initio study	29

30	BOUGRADJA Faiza	Theoretical study of structural and optical properties of CuI,AgI compounds	30
31	BOUROUIS Chahrazed	Ab initio electronic structure calculations of half-metallic ferromagnetism in diluted magnetic semiconductors based CdS	31
32	BOUROUROU Yahia	Optical, elastic and thermodynamic properties of KMnT2	32
33	BOUTARFA Bariza	Propriétés structurales et électroniques du Mg _{1-x} Sr _x Te par la méthode de FP-LAPW	33
34	BOUZID Fayçal	Simulation des propriétés électriques d'une cellule solaire en hétérojonction à base de InGaP/GaAs	34
35	CHARIFI zoulikha	La demi métallicité dans les matériaux	35
36	CHEDDADI Samir	First-principles calculation of the structural, electronic, and Thermodynamic properties of quaternaryhydrides LixNa _{1-x} MgH ₃	36
37	CHELLI Samira	The structural, electronic and thermodynamic properties of BaxSr _{1-x} S ternary alloy.	37
38	AMRAOUI Rabie	Étude des propriétés structurales et électroniques de Ti _{1-x} Ni _x O ₂	38
39	CHORFI Hichem	Simulation du rayonnement diffus par les paramètres de la théorie de mie : application sur les couches tissulaires	39
40	DEHBI Lynda	Caractérisation optique d'un guide ridge de faible largeur en niobate de lithium	40
41	DILMI Samia	Hot electrons effects on the calculation of collisional rates	41
42	DJAADI Soumaia	First principal DFT study of structural and electronic properties of SnGen (n=1-17) clusters	42
43	DRIEF Mohamed	A first-principle study of half-metallic ferrimagnetism in the Ti ₂ FeZ (Z=Al,Ga,In) Heusler	43
44	HESSANIA Amar	Numerical simulation of reflection spectra and group delay for various linearly chirped apodized fiber Bragg gratings.	44
45	FAID Fares	Estimation de la température de curie d'Heusler inverse V ₂ MnAl par le calcul spin spirale	45
46	FNIDES Souhair	Investigation of the optical interband transitions of the copper halide CuCl compound	46
47	GOUS Mohammed Hadi	Influence de la couche 4d des éléments de transition sur les propriétés du composé MgS	47
48	GUERMIT Nora	Modeling optical properties of porous silicon layers: using reflectance spectra measurements and Bruggeman's effective medium approximation	48
49	GUERMIT Youcef	External magnetic field effect on the electronic, magnetic properties of Heusler alloys Ni ₂ (Mn,Co)Al by Wien2K.	49
50	HADDAD Abdenour	Investigation of Parameters Affecting the Efficient Generation of Rayleigh Modes in Anthracene	50
51	HADJAB Moufdi	Fundamental properties of the rocksalt ZnO and MgO: An ab-initio prediction	51
52	HAICHOOR Rachida	Simulation ab initio des propriétés physique des clusters de Tin (n=2-15)	52
53	HAMIDANE Ouafa	Electronic and Ferromagnetic Properties of 3d (V)-Doped Barium Sulfide	53
54	HAMMAR Katia	Impact of Fe anti-site in magnetic moment of FePt thin films	54
55	HAMRI Abdelkrim	Etude des propriétés physique du composé Heusler Cu ₂ PrAl : méthode ab initio	55
56	HARHOUZ Ahlam	Refractive index sensing in 2D photonic crystal waveguide incorporating with microcavity	56
57	HEBALI Khaled	CO adsorption on Zn impurity in a substitutional on a Pd(111) surface : a DFT study	57
58	KAOUR Selma	Etude des propriétés structurales et électroniques du ZnX (X=S, Se et Te)	58
59	KARFAF Saliha	Structural and elastic properties of perovskite alkaline tantalate	59
60	KERROUM Djamel Eddine	Etude théoriques du comportement mécanique et électronique de la chalcopyrite CuInTe ₂	60
61	KRARCHA Hadda	Enthalpies of Formation of Equiatomic Binary Hafnium Transition Metal Compounds HfM (M=Co, Ir, Os, Pt, Rh, Ru)	61

62	LEGHIGHANE Billel	Simulation de l'implantation ionique du phosphore dans la matrice ZnO	62
63	LEKADIR Fazia	Phonon transmission by fcc sandwich layers in Cu/Pt/Cu and Pt/Cu/Pt systems	63
64	MOUSSAOUI Bachir	Approximated Color-singlet Partition Function of the Quark-Gluon Plasma at Finite Temperature and Chemical Potential	64
65	OULED ALI Mohammed	Etude par simulation les propriétés optoélectroniques des matériaux semi-conducteurs appliqués en cellules photovoltaïques	65
66	RAHMANI Mohamed	Etude des propriétés structurale, électronique des binaires ZnO, SnO ₂	66
67	REKAB-DJABRI Hamza	First principles study of structural and electronic, properties of AgBr	67
68	SERDOUK Fadila	Simulation de la densité des états dans les semiconducteurs amorphes par la technique de Laplace à haute résolution	68
69	SOUADIA Zohra	Etude Ab initio des propriétés structurales, électroniques et optiques du système Na ₂ Te	69
70	TAGROUT Abdalah	Transfert de chaleur dans les tissus biologiques par Comsol	70
71	TOUAM Selma	Etude de 1er principe des propriétés fondamentales des alliages ternaires	71
72	YAHIAOUI Mohamed Laid	Simulation numérique de la technique super-résolution appliquée en imagerie astronomique.	72
73	ZEGHDAR Kamal	Simulation de l'effet de la température sur les caractéristiques électriques de la diode Schottky en utilisant le simulateur Atlas-Silvaco	73
74	ZERFAOUI Hana	Numerical simulation of solar cell	74
181	YAHYI Hakima	Half-metallic behavior in transition metal based ternary compounds Cd _{0.75} TM _{0.25} S (TM = Co and V): a first principle study	75
182	TOURAB Mohammed	Theoretical and Numerical modeling of the bending behavior of composite sandwich beam	76
187	MESSIAD Meriem	Calcul DFT+U du matériau FeWN ₂	77
188	MEZHOUZI Latifa	Electronic and magnetic properties of Ni-rich ternary alloys	78
189	REDDAOUI Habib	Effets de structure sur les propriétés des oxydes magnétiques dilués : CeO ₂ .	79
Atelier 2 : Informatique			
75	BARAKAT Ouarda	synthesis of linear arrays with side lobe level reduction using particle swarm optimization	81
76	BAYAZA Rima	Simulation des protocoles de routage dans les réseaux véhiculaires	82
77	BENCHERIET Chems enahar	Détection de visage par caractéristiques de Haar-Like modifiées et réseaux de neurones	83
78	BENMEDAKHENE Nadira	CD-MOOC: Context-Driven Massive Open Online Courses Amélioration du taux d'abandon des apprenants	84
79	BENSALEM Mohamed	Study of adaptive antenna arrays using least mean square method	85
80	BENZENACHE AMINE	Multiple classifiers combination for Off-line handwritten Arabic words recognition	86
81	BORDJIBA Yamina	La mise correspondance entre les points caractéristiques de deux visages différents	87
180	BOUGHAREB Djalila	Une Nouvelle Formule de Pondération de Termes pour la Classification de Texte	88
82	BOUGUERRA Fateh	Artificial neural network applied on channel equalization	89
83	BOUZID-DAHO Abdellatif	Segmentation of Bio-Images for Aid in the Detection of Abnormal Blood Cells	90
84	DAAS Sara	Aide au diagnostic des pathologies par les images médicales : application aux pathologies du cœur	91
85	FAHSI Mahmoud	Etat de l'art des Modèles Mathématiques et des Applications Informatiques De Simulation Numérique du Trafic Routier	92
86	HACHAMA Mohammed	Une approche énergétique pour l'estimation de la réflectance d'un objet lambertian	93
87	HADJERIS Mourad	Réutilisation des services web pour une plateforme d'apprentissage	94
88	HALLACI Samir	Nouvelle approche d'extraction des caractéristiques pour la reconnaissance des gestes dans la langue des signes	95
190	HEBHOUB Fahima	Two sided estimates of N-points Pade approximants	96

89	MENASRIA Azzeddine	la reconnaissance automatique de l'écriture manuscrite arabe, appliquée aux montants littéraux des chèques	97
90	MERABTI hocine	An Immune System Simulation for a Complex Problem Resolution	98
91	MESSAOUDI Newfel	A Novel Array-OL model for Self-Generation of a Memory Controller for the High Efficiency Video Coding (HEVC)	99
92	ROUABHIA Chahrazed	Reconnaissance Faciale Basée sur les Yeux et l'ACP Diagonale Bilatérale	100
93	SERIDI Ali	Un service web pour la détection du niveau des apprenants dans un système d'apprentissage à distance adaptable	101
94	ZAGHDOUDI Rachid	Nouvel Algorithme de segmentation de l'écriture arabe manuscrite basé sur une approche de Validation SVM	102
95	ZINEDDINE Kouahla	Improving metric access methods with extended regions	103
Atelier 3 : Chimie			
96	AIMENE Yassine	Computational investigations on geometric structures of rhenium(I) and technetium(I) complexes of new pyridyl triazole-based ligands	105
97	AMIRAT Khadidja	Etude théorique pour la prédiction de temps de rétention d'un ensemble de polluants organiques persistants in silico.	106
98	AMIRAT Samia	Structures des complexes d'inclusion du 4-AminoChalcone et le β CD	107
99	BELKHEIR Fatiha	OPTIMISATION DE FLAMBAGE D'UNE PLAQUE STRATIFIEE PAR ALGORITHME GENETIQUE	108
100	BEN SEGHIR Bachir	Optimization of chitosan using response surface methodology (RSM	109
101	BENBRAHIM Imane	In Silico Modeling of Substitution-Induced Effect and Structure Property/Activity Relationship Profile of 1, 3, 4-Oxadiazole Derivatives	110
102	BENDIF Besma	Design, synthèse and anticancer evaluation by molecular docking of novel sulfonamide derivatives containing oxazolidinone moiety	111
103	BENSOUILAH Nadja	Charge transfer complexes of substituted imines with π -electron acceptors: TD-DFT calculations and NBO analysis.	112
104	BEZZINA Belgacem	Quantification des interactions intermoléculaires dans les complexes d'inclusion	113
105	BOUARRA Nabil	Modèle prédictif de la solubilité aqueuse d'un ensemble de polychlorobiphényles (PCB) en utilisant un ensemble optimal de descripteurs moléculaires théoriques	114
106	BOUCHAIR Farah	Modélisation de nouvelles structures inhibitrices analogues de la L-arginine de l'oxyde nitrique synthase neuronale (nNOS)	115
107	BOUCHEMELLA Houria	Investigation théorique du complexe d'inclusion : terpinéole β -cyclodextrine	116
108	BOUHADIBA Abdelaziz	Host-guest inclusion complex between β -cyclodextrin and chrysin: A theoretical approach	117
109	BOUHADICHE Adil	Modeling of silicon nanocrystal formation in a SiNx matrix using Monte Carlo methods	118
110	BOUHANK Antar	Modélisation et simulation numérique du reformage catalytique du n-hexane sur un catalyseur bi-fonctionnel en régime transitoire .	119
111	BOUKHALFA Nadia	Modélisation de la cinétique et de l'isotherme d'adsorption d'une substance médicamenteuse sur une poudre argileuse	120
112	BOUSSEBBAT Wahiba	quantum-chemical study of nickel complexes with benzaldehyde thiosemicarbazone derivatives ligands	121
113	BOUZIT Habiba	Etude Computationnelle Et Spectrophotométrique du Complexe d'Inclusion Du N-[(4-sulfonamidophenyl) ethyl]-5-(1,2-dithiolan-3-yl)pentanamide Avec la β -Cyclodextrine	122
114	CHABANE Hanane	Synthesis, molecular structure and DFT computational studies on 6-(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxybenzylideneamino)benzo[d]thiazol-2(3H)-one and its 3-methyl-substituted derivative	123
115	CHEGHIB Nedjoudia	Conception, synthèse et evaluation des propriétés anticancéreuses de 5-((allyloxyamino) methyl) quinolin-8-ol et 5-((phenylamino)methyl) quinolin-8-ol par Docking,	124
116	CHERIET Mouna	Computational study of inclusion complexes in vacuum and in water: Charge transfer, electronic transitions and NBO analysis	125
117	DAIKH Samia	Mise au point d'une méthode prédictive de calcul des propriétés critiques des composés covalents	126

118	DJADI Nabila	Simulation de la distribution de l'intensité lumineuse dans un reacteur UV	127
119	DJEFAFLIA Rabiaa	Simulation numérique sur le transfert de matière entre l'emballage et l'aliment en utilisant les Réseaux de Neurones	128
120	DRISSI Souad	Studies on Chemical Reactivity of Seven Membered Cyclic Sulfonamide Through Quantum Chemical Approaches	129
121	GHARIBI Meryem	Investigation théorique du complexe d'inclusion : vanilline/ β -cyclodextrine	130
122	GRABSI Mohamed	Modélisation de la cinétique d'une réaction d'oxydation catalytique appliquée au traitement des eaux usées	131
123	HADDAD Khoula	simulation numérique de transfert du polluant dans un milieu poreux	132
124	HAIHAEM Sakina	Etude théorique du complexe d'inclusion cyclodextrines/hespérétine	133
125	HIMRI Safia	Theoretical investigation of Inclusion complex of 1-Aminoisoquinoline into β -cyclodextrin	134
126	KHELLOUL Nawel	Crystal structures, DFT calculations of monomer and dimer of N, N-Diethyl-4-[(E)-(pyridin-3 yl) diazenyl] aniline compound	135
127	KHEROUF Soumaya	Modélisation des indices de rétention de 113 pyrazines séparées par chromatographie gazeuse sur deux colonnes de polarités différente	136
128	LACHI Nadia	Supramolecular interaction of ibuprofen with HP β -cyclodextrin: A molecular modeling approach	137
129	LADJARAFI Abdelkader	Etude théorique de la réactivité chimique de systèmes moléculaires complexes par des approches quantiques et par modélisation moléculaire	138
130	LAHCENE Abdelmalek	Host-guest inclusion complex between β -cyclodextrin and Eugenol: A theoretical approach	139
131	LAKEHAL Salima	Bonding interactions in EDDS complexes	140
132	LAOUD Aicha	Identification of novel inhibitors for α -glycosidase using virtual screening	141
133	MAACHE Soulef	Quantum Chemical Descriptors Of Some A Series Of 1,4,3,5-Oxathiadiazepane-4,4-Dioxides Through Density Functional Theory (DFT)	142
134	MEDDOUR Faiza	ONIOM study of the inclusion complexes of Flurbiprofen with β -cyclodextrin	143
135	MERABET Nora	Host-guest inclusion complex between Cucurbit [7]uril/ Albendazole	144
136	BOUZITOUNA Amel	molecular modeling investigations of the β -cyclodextrin / n-nitroso-n-(2-chloroethyl)-n'-sulfamoylprolinate inclusion complex stability	145
137	MOKHTARI Abdelaali	Host-guest interaction of thymol with β -cyclodextrin	146
138	NIGRI Soraya	methodology based on combined Fourier Transform Infrared-Synchronous Fluorescence Spectroscopy- Chemometrics for estimation of extra virgin olive oil adulteration with pomace olive oil	147
139	NOUAR Leila	etude théorique des interactions du complexe d'inclusion Guanine-beta cyclodextrine	148
140	SAIHI Razika	Etude théorique de l'effet de l'hétéroatome sur les propriétés électroniques moléculaires des isoindoline-isoindole	149
141	STITI Maamar	Spectroscopic and Molecular Modeling Study of the Inclusion Complexation between MethylBenzoxazolinone and β -cyclodextrine	150
142	TIMEDJEGHDINE Mebarka	Simultaneous prediction of liquid-liquid equilibrium of ternary system containing water, formic acid and isoamyl alcohol using NRTL model	151
143	ZABOUB Amal	Une nouvelle approche pour comprendre le mécanisme de la réaction de hoffmann-loffler-freytag : etude computationnelle	152
144	ZERROUKI Mostapha	Optimization parameters of cyclohexene epoxidation by hydrogen peroxide	153
183	MESSIAD Hanane	Theoretical and experimental investigations on Piceatannol /cyclodextrin complexes: Molecular modeling studies	154
184	DIDI Mabrouka	Prédiction du coefficient de partage Octanol / Eau pour une série de composés aromatiques en utilisant l'étude QSPR	155
193	MAHMOUDI Ourida	Self-Assembled Monolayers of 2- Mercaptobenzimidazole on Palladium Density Functional Theory Study Approach	156

Atelier 4 : Mathématiques			
145	AISSAOUI Fatima	New fractional Montgomery identity and Čebyšev type inequalities	158
146	ARIES Mohammed es-salih	traitement numérique des équations Intégrales et intégro-différentielles non linéaires	159
192	BARROUK Nabila	Contribution à l'étude d'une classe de systèmes de réaction-diffusion avec une méthode de compacité	160
147	BAZINE Safia	Fixed point theorems for single-valued and multivalued operators on set endowed with one or two vector valued b-metrics	161
148	BECHOUAT Tahar	Regularized approximation sinc collocation method for Fredholm integral equations of the first kind	162
149	BELAID Malik	STABILITY IN TOTALLY NONLINEAR NEUTRAL DYNAMIC EQUATIONS ON TIME SCALES	163
150	BELHIRECHE Hanane	Asymptotic comportement of the coagulation equation of water droplets with condensation-evaporation process	164
151	BENRABIA Nouredine	Applying the Powell's Symmetrical Technique to Conjugate Gradient	165
152	BENSSAAD Meryem	Equation system describing the radiation intensity and the air motion with the water phase transition	166
153	BOULARES Hamid	Asymptotic stability in delay nonlinear fractional differential equations	167
154	BOUMEDIENE Amina	Une nouvelle classe des méthodes du gradient conjugué pour l'optimisation sans contraintes	168
155	CHIBANI Alima	Etude de la rapidité de la convergence de la MINRES pré-conditionnée pour la résolution du problème généralisé de Stokes discret	169
156	CHIDOUH Amar	The approximate solution of the fractional relaxation equation using Bashforth Moulton predictor-corrector scheme	170
157	DJENAOUI Meriem	Solving nonlinear integral equations in the Urysohn form by Newton-Kantorovich-quadrature method	171
158	ELLAGGOUNE Selma	Sur le nombre maximum de cycles limites pour une classe généralisée des systèmes différentiels polynomiaux	172
159	ELMOUMEN Abdelkader	Approximation Stochastique dans un Problème de Calibration Non linéaire	173
160	FRIOUI Assia	Higher Order Boundary Value Problems at Resonance on an unbounded interval	174
161	GHOMRANI Sarra	Existence de la solution globale du système d'équations du mouvement vertical de l'air dans une cheminée	175
162	HADJI Ghania	Une nouvelle classe de coefficients de gradient conjugué non linéaire avec des recherches linéaires exactes et inexacts	176
177	HADJI Lazreg	Analyse du comportement des plaques en matériaux à gradient de propriété en utilisant une théorie de cisaillement transverse d'ordre élevé	177
163	HALLACI Ahmed	Direct Numerical Method For Solving A Nonlinear Fractional Differential Equation	178
164	HALLACI Khadidja	Etude d'un système d'équations modélisant le mouvement d'un gaz visqueux et calorifère avec la surface libre	179
191	HAMIDANE Nacira	Solvability of a multipoint boundary value problem	180
165	HARRAT Aicha	Fractional neutral integrodifferential equation with nonlocal conditions in a Banach space	181
190	HEBHOUB Fahima	Two sided estimates of N-points Pade approximants	182
166	KAIDOUCHI Wahida	Sur l'existence de la solution de l'équation de coagulation et de fragmentation de gouttelettes de rayon positif en chute	183
167	KHELLAF Ammar	Formation et transformation des dunes sous les effets du vent	184
168	KOUACHI Samia	Existence and localization of positive solutions for a fractional boundary value problem at resonance	185
169	LEMITA Samir	Modified product integration method for approximate solutions of Fredholm integral equations defined on great interval with different kernel types	186
170	MEHRI Allaoua	Simulation numérique en Free Fem++ de quelques équations de la physique mathématique	187
178	OULD LARBI Latifa	Estimation des Fréquences de Vibration des structures FGM	188

171	REBIAI Ghania	nonexistence of positive solutions for nonlinear fractional coupled systems	189
172	REDOUANI Farouk	The free surface flow due to a jet in the region between two straight semi-infinite in presence of surface tension	190
173	REZZOUG Imad	Critère de Hautus pour étudier la Contrôlabilité	191
174	SALAH Selma	Existence et unicité de la solution de l'équation de la composante tangentielle de la circulation générale de l'atmosphère	192
175	SELATNIA houria	controle moyen	193
176	TALBI Ibtissem	An Encryption Algorithm Based on a Suitable Use of two Chaotic Maps	194
179	TLIDJI Youcef	A refined Hyperbolic Shear Deformation Theory for Bending of Functionally Graded Beams based on neutral surface position	195
INDEX DES AUTEURS			

Conférences plénières

Ternary compounds: Ab initio studies

B. Bennecer, F. Kalarasse, L. Kalarasse, A. Mellouki, R. Merikhi and A. Hamidani

Physics Laboratory at Guelma, Faculty of Mathematics, Computing and Material Sciences, University 8 Mai 1945, P.O. Box 401, Guelma 24000, Algeria.

Abstract:

In this talk, we present studies on some ternary compounds ($\text{LiB}^{\text{II}}\text{C}^{\text{V}}$) (filled tetrahedral compounds) by using first principles methods. The electronic and optical properties of LiMgX and LiZnX ($\text{X}=\text{N}, \text{P}, \text{As}$) in the most energetically stable phase; α -phase, obtained using the linearized augmented planes wave method are presented. The band gap trends are similar to the experimental ones. The assignment of the structures in the optical spectra to the band structures is discussed by decomposing each spectrum to its individual pair contribution and the transition band structure (band pair valence-conduction energy differences in the Brillouin zone).

For the dynamical and vibrational properties, a pseudopotential method is used. The phonon dispersion curves and their density of states for the ternaries and their binary analogs ($\text{D}^{\text{III}}\text{C}^{\text{V}}$) will be presented. The evaluated sound speeds in different directions are quantitatively similar in the ternaries and the binaries. This is a manifestation of the extreme electronic similarity between the ($\text{B}^{\text{II}}\text{C}^{\text{V}}$)⁻ and the $\text{D}^{\text{III}}\text{C}^{\text{V}}$ compounds. The calculated bond force constants give an indication on the nature of the bonds. The volume thermal expansion coefficient is calculated. Furthermore, an overview of the phase transitions in LiBeP is given.

At the end of this talk, the magneto-optical Kerr effect will be presented in some chalcopyrite compounds.

Keywords: FTC; Chalcopyrite, Ab initio calculations; electronic properties; optical properties; Vibrational properties; phase transitions; Kerr effect.

References:

- [1] H. Nowotny, K. Bachmayer, *Mh. Chem.* 80 (1949) 734.
- [2] R. Juza, F. Hund, *Z. Anorg. Chem.* 257 (1948) 1.
- [3] D.M. Wood, A. Zunger, R. de Groot, *Phys. Rev. B* 31 (1985) 2570.
- [4] A.E. Carlsson, A. Zunger, D.M. Wood, *Phys. Rev. B* 32 (1985) 1386.
- [5] K. Kuriyama, T. Kato, *Phys. Rev. B* 37 (1988) 7140.
- [6] K. Kuriyama, T. Kato, T. Tanaka, *Phys. Rev. B* 49 (1994) 4511.
- [7] K. Kuriyama, T. Kato, T. Tanaka, *Phys. Rev. B* 49 (1994) 11452.
- [8] A. Mellouki, B. Bennecer, F. Kalarasse, L. Kalarasse, *J. Phys. Chem. of Solids* 75 (2014), 838.
- [9] F. Kalarasse, B. Bennecer and A. Mellouki, *Phys.: Condens. Matter* 18 (2006) 7237.
- [10] A. Mellouki, B. Bennecer and F. Kalarasse, *J. Phy: Condens. Matter* 21 (2009) 305402.

Modélisation, approximation, lois de la nature

Hisao Fujita Yashima

Résumé :

La modélisation mathématique est une “meilleure” approximation avec laquelle on d’écrit le phénomène qui nous intéresse. La “meilleure” approximation en tant que modélisation n’est pas celle qui est la plus proche de la “solution exacte”. Pour être “meilleure”, il faut que le calcul soit faisable et que le résultat donne des aspects principaux du phénomène qui nous intéressent. Même si le résultat du calcul ne capture pas d’aspects secondaires pas trop intéressants, le modèle peut être bien apprécié. La simplicité du calcul est un facteur important pour être “meilleure”. Les lois de la nature – physiques, chimiques, biologiques – servent pour simplifier le calcul et obtenir de bons résultats sur les aspects principaux du phénomène. Ces lois, à leur tour, sont de meilleures approximations.

ATELIER 1 : PHYSIQUE

Etude des propriétés structurales, élastiques du binaire PrSe.

Sofiane ABDELHADI¹

¹*Laboratoire de Mécanique Appliquée, Département de Technologie, Université Djillali Liabes .SBA .22000.
E-mail : abdelhadi20132@yahoo.fr*

Résumé :

Comprendre la structure et les propriétés physiques des matériaux a toujours été un objectif pour les chercheurs dans ce domaine. A titre exemple le **PrSe** suscite l'attention des théoriciens pour leur intérêt technologique et industriel. Un calcul de premier principe en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linearisés (FP-LAPW) dans le cadre de la DFT. Ces calculs ont été effectués dans l'approximation du gradient généralisé (GGA), dans le but d'étudier Les propriétés structurelles et élastiques du Sélénure de Praséodyme **PrSe** (paramètre de réseau, module de compressibilité et son dérivé, constantes élastique,...).Un bon accord entre l'expérience et notre calcul est obtenu.

Mots clés : propriétés élastiques, FP-LAPW; GGA

Demi métallicité et magnétisme de GeTe dopé par les métaux de transition Mn et Fe

ABDELLI Zeyneb^{a*}, MEDDOUR Athmane^a

*a- Laboratoire de physique des matériaux, Université de 08 Mai 1945 Guelma, Algérie
Faculté de math et informatique et sciences de la matière Université de 08 Mai 1945 Guelma, Algérie
Email: zineb.abdelli.physique@gmail.com*

Résumé :

Dans ce présent travail, nous avons calculé les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des composés $Ge_{1-x}TM_xTe$ ($TM=Mn, Fe$) dans la structure NaCl pour les concentrations $x=0.125, 0.25, 0.50, 0.75, 1$. Nous avons effectué les calculs en utilisant la méthode des ondes planes linéarisées (FP-LAPW+lo) basée sur la théorie de la densité fonctionnelle (DFT) tout en adoptant l'approximation GGA.

Les propriétés structurales sont déterminées à partir de l'énergie totale et les résultats obtenus sont en bon accord avec les résultats de la littérature.

L'analyse de la structure de bande et de la densité d'états électronique pour les concentrations $x=0.125$ et $x=0.25$ du ternaire GeMnTea montré que ce dernier est un semi-conducteur à faible gap directe tandis que le ternaire GeFeTe est un semi métal. Pour les concentrations $x=0.5$ et $x=0.75$, les deux composés possèdent un caractère métallique.

Nous avons également calculé les énergies d'échange et de séparation $\Delta x(d)$ et $\Delta x(pd)$ ainsi que les constantes d'échange $N_{0\alpha}$ et $N_{0\beta}$.

Mots clés : DFT, FP-LAPW+lo, Ferromagnétisme, Moment Magnétique, Semi-métaux, Semi-conducteurs.

Références:

- [1]. N. Baki, S. Mécabih, Journal of Magnetism and magnetic Materials 345 (2013), 222-229
- [2]. C.M.I. Okoye, Journal of Physics: Condensed Matter 14 (2002), 8625-8637.
- [3]. Y. Liu, S.K. Bose, J. Kudrnovský, Journal of Applied Physics 112 (2012), 053902.
- [4]. V.N. Antonov, A.P. Shpak, L.V. Bekenov, L.P. Germash, A.N. Yaresko, Condensed Matter Physics 13 (2) (2010), 23702.

Etude numérique des verres tellurites par la dynamique moléculaire.

ACHOURI Mohamed Malik¹, ZIANI Nossair², BOUAMRANE Rachid.

Faculté de physique, université des sciences et de la technologie d'Oran Mohamed Boudiaf.

¹phonixnoir@gmail.com

²ziani_nossair@yahoo.fr

Résumé :

Les verres à base de TeO₂ possèdent de faibles pertes intrinsèques ($3.6 * 10^{-3}$ dB/Km à $0,1 * 10^{-3}$ dB/Km[1]), plus faibles de deux ordres de grandeur que les fibres de silice[2] un forts indices de réfraction linéaire et non-linéaire, une bonne transmission dans le proche infrarouge, des gains Raman assez forts de même qu'une susceptibilité non-linéaire du troisième ordre très élevée par rapport aux autres verres .

Toutes ces propriétés que ce soit dans le cristallin ou dans l'amorphe font du TeO₂ un matériau de choix pour l'optoélectronique,

Il est clairement convenu que les propriétés optique et mécanique d'un matériau dépendent de sa structure atomique, cela est on ne peut plus vrais pour les verres métalliques pour les quelles une meilleur compressassions de leur arrangement atomique permettrai de comprendre leurs fascinantes caractéristiques physiques[3].

Dans notre travaille nous allons nous intéresser au TeO₂ dopé. TeO₂ pur est étudié depuis longtemps, mais n'a fait l'objet d'une modélisation correcte que depuis peu de temps [4].

Nous citons les propriétés du TeO₂ comme décrite dans la littérature et par la suite nous nous intéresserons à une étude numérique des propriétés de la tellurite une fois dopé avec des terres rares ainsi qu'une simulation de ces deniers par dynamique moléculaire pour obtenir une vue microscopique du verre de tellure dopé.

Mots clés : dynamique moléculaire, TeO₂, dopage.

Référence :

- [1] Dafinei, C. Dujardin, E. Longo, and M. Vignati, *Phys.StatusSolidi A*,2007,. 204, no. 5, pp. 1567–1570,
- [2]N. Uchida and Y. Ohmachi, *J. Appl. Phys.*,1939, vol. 40, no. 12, pp. 4692–4695.
- [3]X. Liu, D. B. Hollis, and J. Mcdougall, *Phys. Chem. Glas.*,1969, vol. 37, no. 4, pp. 160–168, 1996.
- [4]I. Savellii, thèse Université de Bourgogne, 2012.

Numerical modeling of the dynamic behavior of intelligent structures

Salah AGUIB, Toufik DJEDID, Abdelkader NOUR, Ahmed SETTAT, Noureddine CHIKH

*Dynamic of Engines and Vibroacoustic Laboratory, F.S.I., M.B. Boumerdes University, Algeria
Salah.aguib@yahoo.fr*

Abstract:

In this work the dynamic behavior of smart sandwich plate is studied in flexion with transverse shear by the finite element method under Abaqus and the Ritz method. Two aluminum skins bonded to a core of elastomeric silicone oil and loaded with iron particles at 20%, 30% and 40% form the plate. The rigidity of the plate is given by the addition of a usual stiffness matrix of two aluminum skins and an MRE complex stiffness matrix. The latter is a function of the magnetorheological properties of the MRE. The results show the influence of MRE adaptive stiffness and the loss factor in the dynamic behavior of the sandwich studied. The structure proposed can be directly applied to civil engineering, for example, building foundations, mechanical engineering and aircraft wings.

Keywords: Sandwich plate, Dynamic behavior, FEM, Ritz method, Complex rigidity, MRE.

References:

- [1] Zhou GY, Wang Q. Use of magnetorheological elastomer in an adaptive sandwich beam with conductive skins. Part I: magnetoelastic loads in conductive skins. *Int J Solids Struct* 2006;43:5386–402.
- [2] Zhou GY, Wang Q. Use of magnetorheological elastomer in an adaptive sandwich beam with conductive skins. Part II: dynamic properties. *Int J Solids Struct* 2006;43:5403–20.
- [3] Dwivedy SK, Mahendra N, Sahu KC. Parametric instability regions of a soft and magnetorheological elastomer cored sandwich beam. *J Sound Vib* 2009; 325:686–704.
- [4] Nayak B, Dwivedy SK, Murthy KSRK. Dynamic analysis of magnetorheological elastomer based sandwich beam with conductive skins under various boundary conditions. *J Sound Vib* 2011; 330:1837–59.

Analyse du spectre d'émission VUV de l'ion libre Er⁺³ (Er IV)

S. Ait Mammam^{1*}, A. Meftah^{1,2}, D. Deghiche¹, C. Blaess², N. Champion², W.-Ü L. Tchang-Brillet² and J.-F. Wyart^{2,3}

¹ *Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri, BP 17 RP, 15000 Tizi-Ouzou, Algeria.*

² *LERMA, Observatoire de Paris-Meudon, PSL Research University, Sorbonne Universités, UPMC Univ. Paris 6, CNRS, UMR 8112, F-92195 Meudon, France.*

³ *Laboratoire Aimé Cotton, CNRS UPR3321, Université Paris-Sud, ENS Cachan, Bâtiment 505, F-91405 Orsay Cedex, France.*

Résumé :

Les ions lanthanides présentent des intérêts multiples notamment dans l'astrophysique pour l'étude des étoiles chimiquement particulières (CP), les matériaux laser à l'état solide et l'industrie d'éclairage. L'analyse du spectre de l'ion Er⁺³ (Er IV) entre dans le cadre du projet d'étude des spectres complexes des ions trivalents à couche ouverte 4f^N, après avoir complété les publications sur Nd IV [1], Tm IV [2]. Le code Cowan [3] est le support des calculs théoriques qui permet la prédiction des niveaux d'énergie et les probabilités de transition. Les spectres d'émission VUV de l'ErIV sont obtenus à l'aide du spectrographe de 10.7m de l'observatoire de Paris sur le site de Meudon avec deux types d'étincelles (glissante et initiée). La détection a été faite sur des Plaques Photographiques (PP) et aussi sur des Ecrans Phosphore photostimulable (IP). La première analyse nous a conduits à l'identification de plus de 590 raies spectrales et 120 niveaux d'énergie [4].

Mots clés : Lanthanides, Erbium, probabilités de transition.

References:

- [1] J.-F. Wyart, A. Meftah, W.-Ü L. Tchang-Brillet, N. Champion, O. Lamrous, N. Spector and J. Sugar, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40**, 3957-3972 (2007).
- [2] A. Meftah, J.-F. Wyart, N. Champion and W.-Ü L. Tchang-Brillet, *European Physical Journal D* **44**, 35-45 (2007).
- [3] R.D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (U. California Press, Berkeley, CA, 1981).
- [4] A. Meftah, S. AitMammam, J.-F. Wyart, W.-Ü Tchang-Brillet, N. Champion, C. Blaess, D. Deghiche and O. Lamrous, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49** (2016) 165002 (19pp).

High-Performance Solar-Blind Photodetector Based on AlGa_N/Ga_NHeterostructure.

ALLAM zehor¹, HAMDOUNE Abdelkader¹Affiliation^{1,2}

*Unity of Research "Materials and Renewable Energies", Faculty of Science, University of Abou-bekrBelkaid,
P.O. Box 230, 13000, Tlemcen, Algeria.
zh1344@yahoo.fr .*

Abstract:

In this work, we studied a photodetector device AlGa_N/Ga_N MSM type. Modeling and simulation were performed using the SILVACO-TCAD simulator: energy band diagram, potential, electric field profile, photogeneration and recombination rates, and conduction current density were simulated. In the dark we got a current of less than 0.2 uA for an applied voltage of 10 V. Under light, we got a current of 4 mA for a voltage of 10 V, and a threshold voltage of about 4 V; the electron velocity decreased when the temperature increased; the best current was 2.042 nA at a light intensity of 1 W / cm² and for a wavelength of 350 nm. The 350 nm external quantum efficiency was of the order of 69.58% for doped AlGa_N.

Etude théorique des propriétés structurale, électroniques et optiques du ZnY_2O_4 , en utilisant le code castep.

A.Amara^a, L.Gacem^a, R. Belbal^b, R.Saihi^a

^a*Laboratoire des Science et Informatique des Matériaux, Université Ziane Achour Djelfa.*

^b*Laboratoire de Sciences Fondamentales, Université Amar Telidji de Laghouat.*

Résumé :

ZnY_2O_4 [1] est l'un des oxydes de yttrium Y qui est un élément de la famille désignée par le nom de terres rares ou lanthanides dont le nombre atomique est 39.

Le but de ce travail est l'étude des propriétés structurale, électroniques et optiques du ZnY_2O_4 utilisant le code CASTEP, C'est un code basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (LDA). Les fonctions d'onde sont développées sur une base d'ondes planes en association avec la technique de pseudo potentiel. Les interactions d'échange-corrélation ont été prises en compte en utilisant l'approximation du gradient généralisé (GGA).

Mots clés : ZnY_2O_4 , Castep, LDA, GGA.

Référence :

[1] B.bhusandas, V.enugopal, G.raoruppa, J. pure and appliedphysics. 53 (2015) 399–403.

Monte Carlo Simulation of electron trajectory in GaN semiconductor.

R. AOUATI¹, A. NOURI²

¹*Thin Films and Interfaces Laboratory, Physics Department University of Frères Mentouri Constantine
25017 Algeria, aouati.redha@gmail.com*

²*Physics department, University of Oum-El-Bouaghi 04000 Algeria, nouiri_kader@yahoo.fr*

Abstract:

Monte Carlo simulation of electron beam-solid interaction is powerful tool for the modern microscopist, it have been widely used for the last few decades. [1]The interaction of an electron beam with a GaN semi-conductor can be modeled by Monte Carlo methode, this technique produces a stepwise simulation of the electron trajectory by basis of theoretical probability distributions or empirical models. [2] The physical basis of electron scattering in a solid is described and a simple calculation of Monte Carlo model is developed using Fortran programming language.

Key words: Monte Carlo Simulation, electron trajectory, GaN, semiconductor.

References:

- [1] *D. Drouin ,A.R.Couture ,D. Joly ,X. Tastet ,V. Aimez,R. Gauvin, Scanning ,2007,29, 92.*
- [2] *D.C. Joy, Scanning Microscopy, 1992, 5, 329.*

Effet des configurations à cœur excité sur la réduction des probabilités de transition du faisceau $5p^64f^3-5p^64f^25d$ dans les lanthanides faiblement ionisés : cas de Nd IV

ARAB Kamel, DECHICHE Djamel.

Laboratoire de physique et chimie quantique, Faculté des sciences, Université de MOULOUD MAMMARI de Tizi Ouzou. Email : kamel-sub@outlook.fr

Résumé :

Les lanthanides trivalents ont de nombreuses applications notamment dans le domaine de l'industrie d'éclairage, des matériaux laser, de la manipulation cohérente de l'information quantique. L'étude de leurs spectres d'émission dans l'ultraviolet sous vide nous permettra de connaître les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde des différentes configurations. Dans ce travail, on s'intéresse à l'ion de néodyme trois fois chargé en particulier à l'effet des configurations à cœur excité sur la réduction des probabilités de transition du faisceau $5p^64f^3-5p^64f^25d$. Ces effets d'interactions de configuration ont été étudiés par calculs paramétriques des niveaux de la parité paire basés sur la méthode théorique de Slater-Racah. Les calculs des probabilités de transition ainsi que les niveaux d'énergie théoriques ont été effectués au moyen de la chaîne de programmes R.D. Cowan.

Mots clés : Lanthanides, cœur excité, Cowan, Interactions de configuration, Probabilités de transition.

Références:

- [1] Cowan R D 1981 the theory of Atomic structure and Spectra (Berkeley, CA: University of California Press).
- [2]Wyart J-F, Meftah A, Tchang-Brillet W UL, Champion N, Lamrous O, Spector N and Sugar J.2007 J. Phys. B: At. Mol.Opt. Phys.**40** 3957-72

Simulation numérique sur l'influence de la présence de défauts sur la structure et la géométrie de nanotube de carbone.

Hamza AZZAZ^{1a}, Nabil FADEL^{1b}, Sid Ahmed Lamine TAHI^{1c}, Omar CHATERBACHE^{2d} & Djaffar DAHMOUN^{1e}

¹Laboratoire des Sciences et de Génie des Matériaux (LSGM), FGMGP.

²Laboratoire de Mécanique Avancée(LMA), FGMGP.

Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediène (USTHB.)
BP 32 El-Allia, 16111 Bab Ezzouar, Algiers, Algeria.

^ahazzaz@usthb.dz, ^bnfadel@usthb.dz, ^csidousthb@gmail.com, ^dcochaterbache@usthb.dz,
^edahmoundjaffar@gmail.com

Résumé :

Les nanotubes de carbone (NTC) sont des macromolécules tubulaires. Ils ont des propriétés physiques et chimiques remarquables dont les applications envisagées sont quasiment illimitées [1]. La géométrie d'un NTC est déterminée par trois grandeurs descriptives : le rayon r , la longueur l du cylindre et l'angle chiral θ , qui détermine l'orientation du feuillet de graphène par rapport à l'axe du nanotube [2].

Par ailleurs comme dans tous matériaux les défauts de structures sont inévitables et affecte les propriétés de NTC. Parmi ses défauts, nous distinguons les défauts topologiques, les dislocations et les agglomérats. Pour cela, Nous procédons à l'examen de la variation du module de Young à la présence des défauts topologiques. On réalisera quelques essais numériques en présence de défaut de Stone Wales [3] [4].

La comparaison de modèle contenant de défauts de Stone Wales avec le modèle parfait a abouti à des résultats très importants. Elle montre que le défaut 5-7-7-5 influe sur la rigidité de nanotubes dont l'influence est plus remarquable dans les tubes de petits diamètres.

Mots-clefs : nanotube de carbone, CNT, élément finis, défaut Stone Wales, défaut (5-7-7-5).

Référence :

- [1] Peter J F Harris, Carbon Nanotube Science, Cambridge University Press, 2009.
- [2] Rodney S. Ruoff. Mechanical properties of carbon nanotubes: theoretical predictions and experimental measurements. Physique 4, (2003).
- [3] Li, C. and T.W. Chou. A structural mechanics approach for the analysis of carbon Nanotubes. Int. J. Solids Structure. 2003.
- [4] Hakim Amara. rôle du catalyseur métallique dans la croissance des nanotubes de carbone: simulations monte Carlo dans un modèle de liaisons fortes. Thèse de doctorat. Université Paris VI, 2005.

Ab initio full-potential study of the properties structural, electronic and thermal of compounds CeX (X=N, P, As, Sb and Bi)

Hakim BAAZIZ^{1,2*} and Zoulikha Charifi^{1,2}

¹ *Physics Department, Faculty of Science, University of M'sila, 28000 M'sila, Algeria*

² *Laboratory of physics and chemistry of materials , University of M'sila (Algeria)*

Corresponding author: baaziz hakim E-mail: baaziz_hakim@yahoo.fr

Abstract:

The structural, and electronic properties of Cerium actinide family CeX (X=N, P, As, Sb, Bi), investigated by using the full-potential (FP-LAPW) within density functional theory. We employed the local density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA) for the exchange-correlation (XC) potential to calculate structurales propriétés . Moreover, the alternative form of GGA proposed by Engel and Vosko (EV-GGA) is also used for the band structure. The total density and partial density, The equilibrium lattice constants are in agreement with the available experimental. Results obtained for band structure using EV-GGA show a significant improvement . Our results show that the CeX crystallize in the NaCl (B1) structure and undergo a phase transition under hydrostatic pressure to CsCl (B2) phase. The quasi-harmonic Debye model is applied to calculate the thermal properties.

Keywords: *DFT, EV-GGA , Thermal properties.*

References:

- (1) P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnika and K. Luitz, WIEN2k, Technical Universität Wien, Austria, 2001; ISBN 3-9501031-1-2.
- (2) E. Engel, S. H Vosko, phys. Rev. B47, 20 (1993).
- (3) J.M. Jakobsen, G.K.H. Madsen, J.-E. Jørgensen, J.S. Olsen, L. Gerward, Solid State Communications 121 (2002) 447.
- (4) I. Vedel, A.M. Redon, J. Rossat-Mignod, O. Vogt, J.M.Leger, J. Phys. C 20 (1987) 3439.
- (5) A. Werner, H.D. Hochheimer, R.L. Meng, E. Bucher, Phys. Lett. A 97 (1983) 207.
- (6) J.M. Leger, K. Oki, J. Rossat-Mignod, J. Phys. C 17 (1984) 4935.
- (7) J.M. Leger, K. Oki, J. Rossat-Mignod, O. Vogt, J. Phys. 46 (1985) 889.

Etude Ab-initio de la structure ZnTe dope à l'Europium.

M. Baira¹, A. Bekhti-Siad², M. Sahnoun¹

¹Laboratoire de Physique Quantique de la Matière et Modélisation Mathématique (LPQ3M), University of Mascara, Algeria.

²Laboratoire de Matériaux, Applications et Environnement

Email: bnaima64@yahoo.fr

Email: amarasiadmail@gmail.com

Email: sahnoun_cum@yahoo.fr

Résumé :

La prochaine génération des cellules solaires nécessitent non seulement un faible coût mais aussi une haute efficacité de conversion. La technologie des films minces réduit les coûts de production des cellules solaires et l'amélioration de l'efficacité est devenue l'atout majeur des chercheurs. Dans ce contexte, nous nous sommes intéressés au matériau ZnTe [1], pour cela nous avons utilisé la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) basée sur le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'approximation du gradient général (GGA) a été appliquée pour les calculs des structures de bandes. Les calculs réalisés affectent les propriétés électroniques et optiques ainsi que le dopage du matériau ZnTe avec l'Europium.

Mots clé : FP-LAPW, Cellules solaires, Conversion, Optiques.

Références:

[1]: K. Wu, J. Ve, K. Tang, J. Qi, S. Zhu, S. Gu, *Computation Materials Science*, **2015**,109,225-230.

Quasiparticle self-consistent GW study of AlN and GaN monolayers

Ali BAKHTATOU¹, Athmane MEDDOUR ²

¹*Materials physics laboratory, 08 Mai 1945 Guelma University, P.B. 401 Guelma, Algeria,
Bakhtatou.Ali@gmail.com*

²*Materials physics laboratory, 08 Mai 1945 Guelma University, P.B. 401 Guelma, Algeria.
a_meddour@yahoo.fr*

Abstract:

Semiconductor nanostructures exhibit properties that are different from those of bulk materials. Two-dimensional (2D) semiconductor materials are the focus of one of the areas of nano-materials research. Here we report the first quasiparticle self-consistent GW (QSGW) study on the electronic and optical properties of AlN and GaN monolayers based on the recent PMT method (fusion of FP-LMTO and FP-LAPW). The density functional theory is used to study the structural properties of these two monolayers. As it was demonstrated for bulk semiconductor materials, the hybrid quasiparticle self-consistent GW (hQSGW) approximation is applied to reach possible future experiment results for the electronic properties of this kind of new materials.

Keywords: semiconductors, energy band, gap, imaginary part of the dielectric function.

References:

- [1] <https://github.com/tkotani/ecalj>
- [2] T. Kotani, J. Phys. Soc. Jpn., **2014**, 83, 094711.
- [3] T. Kotani, H. Kino, and H. Akai, J. Phys. Soc. Jpn., **2015**, 84, 034702.
- [4] A. Bakhtatou and A. Meddour, Phys. Status Solidi B, **2016**, 253, 442.

Electronic structure and mechanical properties of X₂MnSn (X= Cu, Ni, Pd) under hydrostatic pressure: GGA+U calculations

BARAKA Oussama

Laboratoire d'Etude des Matériaux et Instrumentations Optiques, sidi bel abbes, Algérie.

Email: Baraka.ou@hotmail.com

Abstract:

We investigate the mechanical, electronic and magnetic properties of the full Heusler compounds X₂MnSn (X = Cu, Ni, Pd) under hydrostatic pressure using the generalized gradient approximation +U method. We present also a comparison between the electronic and magnetic properties provided by DFT [1] and those computed by DFT+U in the Generalized Gradient Approximation (GGA). GGA+U calculations show that the total magnetic moment decreases with the increase of the hydrostatic pressure, while the elastic constants [2] undergo an inverse behavior. The pressure effect on the electronic structure of these systems is presented and discussed via the densities of states.

Keywords: GGA+U; Elastic moduli; Effect of pressure.

References :

[1] E. Şaşıoğlu, L.M. Sandratskii, P. Bruno, Phys. Rev. (2005), B 71, 214412.

[2] H. Rached, D. Rached, R. Khenata, A. H. Reshak, M. Rabah, Phys. Status Solidi, (2009), B 246, 1580.

Etude ab-initio des propriétés thermoélectroniques du matériau Sr_3AlAs_3 .

A. BEKHTI-SIAD¹, M. BAIRA², M B. SIAD³.

¹Laboratoire de Matériaux, Applications et Environnement (LMAE), Université Mustapha Stambouli Mascara

²Laboratoire de Physique Quantique de la Matière et Modélisation Mathématique (LPQ3M), Université Mustapha Stambouli Mascara

³Laboratoire de Physique des Couches Minces et Matériaux pour L'Electronique (LPCMME), Université d'Oran1.

Email : amarasiadmail@gmail.com

Email : bnaima64@yahoo.fr

Email : siad_benamar@yahoo.fr

Résumé :

Les phases Zintl sont des composés qui se situent à la frontière entre les intermétalliques et les composés ioniques et possèdent de ce fait des liaisons atomiques à caractère iono-covalent.

Bien que ces matériaux possèdent des structures cristallines complexes, une propriété essentielle pour atteindre un facteur de mérite ZT élevé, ce n'est que très récemment qu'a été considéré le potentiel de ces composés pour des applications thermoélectriques. Parmi toutes les phases intermétalliques de Zintl répertoriées les composés de type AE_3TrAs_3 [1] méritent d'être étudiés.

Dans ce contexte, nous présentons un travail théorique du matériau Sr_3AlAs_3 basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité implémentée dans le code de calcul WIEN2k. Une étude de la structure électronique a été faite ainsi que l'étude des propriétés thermoélectroniques en vue de l'application de ce type de matériaux dans le domaine des énergies nouvelles.

Mots clés : phase Zintl, facteur de mérite, WIEN2k, propriétés thermoélectriques.

Référence:

[1]: Stanislav S. Stoyko, Leonard H. Voss, Hua He and Svilen Bobev; *Crystals*, 2015, 5, 433-446.

First-principles study of structural and elastic properties of Cu₂MgSi₄ in four phases

A. Belmorsli BEKKI¹, B. Kadda AMARA¹, C. Mohammed EL KEURTI¹, D.Yassine BENALLOU²

¹Laboratoire d'études Physico-Chimiques, Physics Department, University Taher Mouley of Saida, Algeria
bmorsli@hotmail.fr, kamaraphy@gmail.com, melkeurti2000@yahoo.fr

²Communications Technologies Laboratory, Electronic Department, University Taher Mouley of Saida, Algeria
benallou06@yahoo.fr

Abstract:

The structural and mechanical properties of Cu₂MgSi₄ in four crystalline phases (the Wurtzite-Stannite (WS), stannite (ST), kesterite (KS) and primitive-mixed CuAu (PMCA)) are investigated using the functional density theory in the framework of FP-LAPW+lo method implemented in Wien2K code [1]. For each phases the atomic coordinates, lattice constant, bulk modulus and its pressure derivative are calculated and compared to available experimental data, the relative phase stability are also discussed. In addition, the elastic constants have been calculated and show that the Born stability criteria [2] are satisfied for all phases. Moreover, anisotropy factor, shear modulus, Young's modulus, Lamé's coefficient and Poisson's ratio have been estimated from the calculated single crystalline elastic constants. The B/G ratios [3] indicate that Cu₂MgSi₄ is prone to ductile behavior in all phases. The WS phase shows the high elastic anisotropy among the four phases.

Keywords: Cu₂MgSi₄; DFT calculations; structure; elastic properties.

References:

- [1] Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G. K. H., Kvasnicka, D., & Luitz, J. (2001). wien2k. An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties.
- [2] Mouhat, F., & Coudert, F. X. (2014). Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems. *Physical Review B*, 90(22), 224104.
- [3] S.F. Pugh, *Philos. Mag.* 45 (1954) 823.

Prediction of anisotropic mechanical properties of CZTS crystal by using FP-lapw method

R. BELGHIT^{1,*}, R. HAMOUDI¹, A. BELKHIR¹

¹ *laboratory of LESIMS, Department of physics, Faculty of science, university of BADJI MOKHTAR ANNABA , BP 18 23000, rafikchr@gmail.com*

Abstract:

The structural, anisotropic elastic and mechanical properties of CZTS under pressure have been investigated using the linearized augmented plane-wave full potential (FP-LAPW) method of density functional theory (DFT). The CZTS crystal exhibit ductile behavior due to their high ratio of bulk modulus to shear modulus (B/G) and this ratio increase when the pressure increase .As shown in three dimensional surface projections, the anisotropy in mechanical properties is weak under zero pressure but increase consistently with increasing the pressure . The equilibrium volume decreases but the bulk modulus. Our calculated results are in excellent agreement with the available experiments and other theoretical data.

Keywords: a first principle, elastic constants, mechanical properties, anisotropy, CZTS crystal.

First principale calculations study of cubic new Heusler Ti₂FeSi alloy by density functional calculations.

A.BELHADJ¹, R.Djamel

¹ *Laboratoire des Matériaux Magnétiques, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Djillali Liabes Sidi Bel-Abbès, Algérie.*

* *Email: belhadjamine31@gmail.com*

Abstract:

In this work, the structural, electronic and magnetic properties of Ti₂FeSi Heusler alloy [1]. Calculations have been performed using full-potential linearized augmented plane wave FP-LAPW method based on density functional theory (DFT) within the generalized gradient approximation (GGA) for the purpose of exchange correlation energy functional [2],

Keywords: Heusler alloys, FP-LAPW, spin, magnetic properties.

References:

- [1] Fr. Heusler, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (1903).
- [2] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. 136 B864.

First principles study of structural, electronic and magnetic properties of ScXPd₃ (X = B , C)

A. BENAMER^{1*}, A. ROUMILI¹, Y. MEDKOUR ¹, Z. SOUADIA²

¹ *Laboratoire d'Etudes des Surfaces et Interfaces des Matériaux Solides,*

² *Laboratoire d'Elaboration de Nouveaux Matériaux et leurs Caractérisations (LENMC).*

Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Setif1, 19000 Setif, Algeria

**benamer.ali2@yahoo.fr*

Abstract:

We have applied the pseudo potential linearized augmented plane wave (P-W) method to study the structural, elastic , electronic and thermal properties of the cubic perovskite-type ABO₃. The ground-state properties are in agreement with experimental data [1] . We have employed the local density approximation (LDA) and the generalized gradient approximation (GGA) for the exchange and correlation potential. The equilibrium lattice constants and the bulk modulus and its pressure derivative are calculated and compared with available experiment and theoretical results [2]. We have also predicted the elastic constants, Young's modulus (E), Poisson ratio (ν), shear modulus (G). The contribution of the different bands was analysed from total and partial density of states curves. Through the quasi-harmonic Debye model, in which the phononic effects are considered, the temperature effect on the lattice constant, bulk modulus, thermal expansion coefficient, heat capacity and Debye temperature is calculated[3].

Keywords: Intermetallic compounds, energy, Elastic properties, Ab initio calculations

References:

- [1] : T. Shishido, J. Ye, K. Kudou, S. Okada, K. Iizumi, M. Oku, Y. Ishizawa, A. Yoshikawa, M. Tanaka, A. Nomura, T. Sugawara, K. Obara, T. Amano, S. Oishi, N. Kamegashira ,Y. Kawazoe, S. Kohiki, K. Nakajima, Boron-carbon atomic ratio dependence on the hardness and oxidation resistance of perovskite-type solid solution ScRh₃B_xC_{1-x}. *Journal of Alloys and Compounds* 375 (2004) 217–220.
- [2]: K. Haddadi, A. Bouhemadou, L. Louail, M. Maamache, Density functional study of the structural, electronic, elastic and thermodynamic properties of ACRu₃ (A = V, Nb and Ta) compounds, *Intermetallics* 19 (2011) 476-485.
- [3]: V.V. Bannikov, A.L. Ivanovskii, Elastic and electronic properties of antiperovskite-type Pd- and Pt-based ternary carbides from first-principles calculations, *J. Alloys Compd.* 577 (2013) 615–621.

Structural, elastic, and electronic properties of $ACNi_3$ (A = Al, Ga, In) antiperovskites

Mohamed BENATIA,* Fatima-Zohra DRISS KHODJA, Abdelkader BOUDALI,
Fatiha SAADAoui and Mohammed DRISS KHODJA

* e-mail: mohamedbnt.1982@gmail.com

Laboratoire d'Etudes Physico-Chimiques, Université de Saïda, 20000 Saïda.

Abstract:

We performed ab initio calculations of structural, elastic, and electronic properties of $ACNi_3$ (A = Al, Ga, In) antiperovskites by using the full potential-linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method. We treated the exchange-correlation potential with LDA, GGA-PBE, and GGA-PBESolfunctionals. We give in this study a number of first predictions, especially as regards: the elastic parameters of $AlCNi_3$ and $GaCNi_3$; some elastic parameters of polycrystalline $InCNi_3$. $ACNi_3$ materials are mechanically stable, elastically anisotropic, metallic, ductile, and far from the boarder of the brittleness. The states at the top of the valence band and the bottom of the conduction band are due mainly to extended Ni 3d states, mixed with C 2p states. A van Hove singularity, resulting mainly from Ni 3d states, appears below the Fermi level. The chemical bonding in these materials presents a mixed character: metallic, covalent, and ionic.

Keywords: $ACNi_3$ antiperovskites; DFT; FP-LAPW; structural properties; elastic constants; density of states.

First principle study of structural stability and optoelectronic properties of the III–Antimony binary compounds

BENCHEHIMA Miloud^{*1,2}, CHABANE CHOUCHE Abdallah^{1,2} and ABID Hamza^{1,2}

¹*Applied Materials Laboratory, Research Center (ex-CFTE), University of Sidi Bel Abbes, Sidi Bel Abbes 22000, Algeria*

²*Department of electronic, University of Sidi Bel Abbes, Sidi Bel Abbes 22000, Algeria*

BENCHEHIMA miloud : mbenchehima@yahoo.fr

CHABANE CHOUCHE Abdallah : chaouche_abdallah@hotmail.com

ABID Hamza : abid_hamza@yahoo.fr

Abstract:

Structural stability and optoelectronic properties of the III-Antimony compounds have been investigated using the FP-LAPW method formalism within the density functional theory as implemented as implemented in Wien2K [1]. The structural properties are investigated using (LDA) [2], (GGA-WC) [3], and (GGA–PBEsol) approximations that is based on the optimization of total energy. Total energy calculations of several phases are considered here in order to fix the most stable structure for each binary compound. For optoelectronic properties, both (LDA) approximation and TB- mBJ potential[4], respectively, are used. Furthermore, results for complex dielectric constant, refractive index, extinction coefficient, normal incidence reflectivity, absorption coefficient and optical conductivity are also described. Results have been discussed and compared with available data.

Keywords: Density functional theory; FP-LAPW formalism; Binary compounds; structure stability ; TB- mBJ approximation; optoelectronic properties.

References:

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties, (2001).
- [2] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B, 136 (1964) 864.
- [3] Z. Wu, R.E. Cohen, Physical Review B, 73 (2006) 235116.
- [4] F. Tran, P. Blaha, Physical Review Letters, 102 (2009) 226401.

Etude de stabilité et transition de phase du composé NaBH₄

R.Bencheikh¹, B. Bennecer², A. Hamidani³

*Physics Laboratory at Guelma, Faculty of Mathematics, Computing and Material Sciences,
University 8 Mai 1945 Guelma, P. O. Box 401 Guelma 24000, Algeria.*

¹*bencheikh.rabah@gmail.com*

²*b.bennecer@hotmail.fr*

³*hamidani.ali@gmail.com*

Résumé:

La méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) utilisant l'approximation du gradient généralisé (GGA) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) a été appliquée pour étudier la stabilité du composé Borohydrure NaBH₄ dans les différentes phases. Les résultats obtenus sont utilisés pour tracer le diagramme de phase P(T) du matériau, ainsi que quelques propriétés thermodynamiques avec le modèle quasi-harmonique de Debye de la phase la plus stable.

Mots-clés : FP-LAPW, Propriétés structurales, Modèle de Debye, Propriétés thermodynamique.

Investigation of structural and electronic properties of ferromagnetic $\text{Mg}_{0.75}\text{TM}_{0.25}\text{Te}$ (TM = Mn, Fe) alloys: An ab-initio calculation

Zeyneb BOURDJIBA^{1*}, Athmane.MEDDOUR¹

¹Laboratory of Physics of Materials (L2PM), Faculty of Science, Department of Physics, University of 8 Mai 1945 Guelma, BP. Box 401, Guelma 24000, Algeria
Corresponding author: bordjiba.zeyneb@yahoo.com
Co-author: a_medddour@yahoo.fr

Abstract:

The method of FP-LAPW+lo under the framework of DFT (density functional theory) have been used to study the structural and electronic properties of the DMSs $\text{Mg}_{0.75}\text{TM}_{0.25}\text{Te}$ (TM: Mn, Fe) Alloys in the zinc blende phase. The exchange potential has been constructed using the Wu-Cohen GGA approximation.

The results of our calculations showed the existence of a half-metallic when we doped the MgTe by Fe but there is a ferromagnetic semiconductor when we doped by Mn, it was observed through the results of the energy band structure and the density of electronic states DOS. These compounds have a direct gap for both configuration spin (up + down) and are stable in the ferromagnetic phase.

Keywords: FP-LAPW+lo, DMS, MgTe, spin polarized, electronic properties.

Half-metallic completely compensated ferrimagnets in Cr doped BaP

A. Bouabca^a, H. Rozale^{a,*,}, A. Amar^a

Condensed Matter and sustainable development Laboratory (LMCDD), University of Sidi Bel-Abbes, Sidi Bel-Abbes 22000, Algeria.

Abstract:

On the basis of ab-initio calculations we have investigated the electronic and magnetic properties of $\text{Cr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{P}$ alloy, our calculations suggest that as we dope BaP with Cr atoms and move towards $\text{Cr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{P}$ where $x=0, 0.125, 0.25, 0.50,$ and 0.75 all alloy are HM-FM. Interestingly $\text{Cr}_{0.25}\text{Ba}_{0.75}\text{P}$ is a HM-AFM otherwise ‘fully compensated ferrimagnet’, this alloy should be of special interest for applications since it creates no external stray field and thus exhibit minimal energy losses. In addition, the robustness of half-metallicity with respect to the variation of lattice constants of $\text{Cr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{P}$ is also discussed; moreover ferrimagnetism co-exists with the half-metallicity, resulting in the desired fully compensated half-metallic ferrimagnetism, for a wide range of lattice constants. Furthermore we found that this new HMFCF is stable according to its small formation energy.

Keywords: Ab-initio calculations; DFT; Magnetic properties; HM-AFM.

References:

- [1] M. Hachemaoui, R. Khenata, A. Bouhemadou, A.H. Reshak, D. Rached, F. Semari Curr. Opin. Solid State Mater. Sci., 13 (2009), pp. 105–111
- [2] Y. Saeed, S. Nazir, A. Shaukat, A.H. Reshak J. Magn. Mater., 322 (2010), pp. 3214–3222
- [3] S. Nazir, N. Ikram, S.A. Siddiqi, Y. Saeed, A. Shaukat, A.H. Reshak Curr. Opin. Solid State Mater. Sci., 14 (2010), pp. 1–6
- [4] H.S. Saini, M. Singh, A.H. Reshak, M.K. Kashyap J. Alloys Compd, 536 (2012), pp. 214–218

Etude ab initio des propriétés dynamiques des composés binaires Na₂X (X = Se, Te)

M. Boualleg¹, F. kalarasse¹, B. Bennecer¹.

*Physics Laboratory at Guelma, Faculty of Mathematics, Computing and Material Sciences, University 8 Mai 1945 Guelma, P. O. Box 401 Guelma 24000, Algeria
boualleg.med@gmail.com*

Résumé :

Dans ce travail nous présentons une étude de premiers principes (ab-initio) des propriétés structurales, élastiques et vibrationnelles en fonction de la pression du composés Na₂X (X = Se, Te), du groupe I-VI dont la structure la plus stable est celle de zinc-blende. Cette étude nous a permis de prévoir que chacun de ces matériaux subit deux transitions de phase du premier ordre; structure zinc blende- structure orthorhombique- structure hexagonale. Les valeurs des pressions de transition sont obtenues. Ce travail a été effectué par l'utilisation de la méthode du pseudopotentiel et les ondes planes (PW-PP) basée sur la théorie de perturbation de la fonctionnelle de la densité (DFPT). Le terme d'échange et de corrélation est évalué par l'approximation de la densité locale (LDA).

Mots clés : Méthodes ab-initio; semiconducteurs; transition de phase.

First principal study of F atom adsorption on Si (111) surface.

L. Bouamama^{1*}, A. Lounis¹, A.Mokrani², A.Ziane¹

¹ *Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, Algérie*

² *Institut des Matériaux Jean Rouxel, BP 32229, 2 rue de la Houssinière, F-44322 Nantes Cedex, France*

*E-mail : lemya.bouamama@yahoo.fr

Abstract:

We have investigated the initial adsorption of a fluorine (F) atom on Si(111) surface by means of first-principles calculations using pseudo-potential method implemented in SIESTA code. The adsorption of fluorine F on the perfect and relaxed Si (111) surface was studied. Four high-symmetric adsorption sites of F on Si (111) were examined : top , bridge, hollow(hp) and hollow(cfc) sites. For an F atom adsorbed on the perfect Si(111) surface, we have found that F atom prefer the top adsorption site with an adsorption energy of 6.47eV. However, no effect of the relaxation on the site adsorption stability, where, as in the perfect case, the F atom stabilize at the top site with a higher energy adsorption (7.05 eV) as compared to the perfect F on Si(111) system. The Si-F bond is evaluated to be 1.66 Å. These results are in good agreement with the results of M.Seel and al. [1] Y. Asari and al. [2].

Keywords: DFT, SIESTA, Silicon, fluorine, adsorption.

References:

[1] M. Seel, P. S. Bagus, *Phy. Rev. B*, 28(1983)2023.

[2] Y. Asari, J. Nara, T. Ohno, *Surface Science*, 2011, 605, 225.

Etude par simulation numérique l'interaction laser femtoseconde intense agrégats atomiques.

N. Boucerredj¹, K. Beggas² M. Labair³ et M. Boucharef³

*^{1,2} Laboratoire des semi-conducteurs. Département de Physique. Faculté des Sciences. Université Badji Mokhtar. B. P. 12, 23000 Annaba. Algérie.
E-mail: boucerredj@yahoo.fr.*

Résumé:

On étudie les agrégats de gaz rares et métalliques (Ar, Kr, Xe, K, et Na), comprenant 10^3 à 10^7 atomes par agrégat, soumis à des champs lasers femtosecondes intenses. L'irradiation des clusters atomiques avec un champ laser intense conduit à une forte énergie d'excitation qui peut être la source des électrons de forte énergie, des ions énergétiques de hautes charges ou des processus de fragmentation.

Pour voir et étudier les différents processus ou mécanismes d'ionisation et d'explosion à l'intérieur de l'agrégat, on a utilisé le modèle nano plasma proposé premièrement par T. Ditmire et al ensuite modifié et adapté à nos différents calculs et études. Dans ce modèle, on considère un cluster de rayon de quelques nanomètres dans un champ électrique d'un champ laser intense polarisé linéairement. Les dimensions du cluster sont plus petites que la longueur d'onde du laser (longueurs d'ondes utilisées de 400 à 1000nm) de sorte que tous les atomes ou ions dans le cluster reçoivent simultanément le même champ électrique uniforme du laser. Le modèle traite tous les processus d'ionisations, chauffage, émission d'électrons, et le processus d'expansion du cluster. Notre but est d'étudier en détail l'expansion, l'explosion ainsi que l'étude comparative entre les différents paramètres de nanoplasma formé des agrégats atomiques et les différents facteurs qui conduisent à l'explosion finale de l'agrégat. Nous avons trouvé que la pression hydrodynamique est plus importante que la pression coulombienne lors de l'explosion ce qui n'est pas le cas dans les travaux précédentes.

Mots-clés : Laser intense, nanomatériaux, clusters atomiques, sources d'ions.

Numerical Simulation of CdTe thin films solar cells using AMPS

Samah BOUDOUR^{1,2*}, Moufdi HADJAB¹, Idris BOUCHAMA², Sihem AZIEZ¹

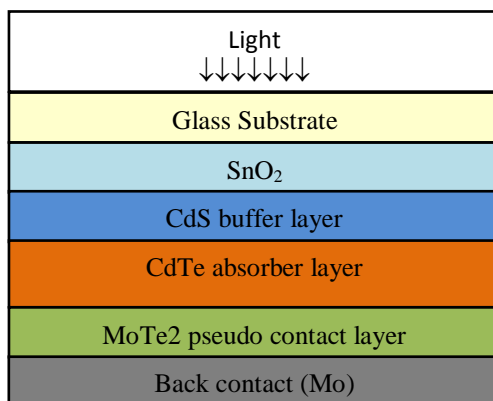
¹ *Research Center in Industrial Technologies CRTI, P.O. Box 64, Cheraga 16014, Algiers / Thin Films Development and Applications Unit (UDCMA), Setif-Algeria.*

² *Electronic Department, Faculty of Technology, University Mohamed Boudiaf of M'sila, 28000, M'sila - Algeria.*

**Corresponding author. Tel: +213(0) 697833251; E-mail: boudoursamah@yahoo.fr*

Abstract:

The numerical modeling and simulation is much needed for the realization of thin-films solar cells before that device is in fact produced. In this study we have simulated a new theoretical structure based on SnO₂/CdS/CdTe/MoTe₂ hetero-junction solar cell under AM 1.5 illumination using the Analysis of Microelectronic and Photonic Structures (AMPS) software tool in one dimension. The effect of physical properties variations (Doping concentration, Thickness and Temperature) is well thought-out on the evaluation of performance (Open-circuit voltage, Short-current density, Fill Factor and Conversion efficiency) in thin-films solar cells SnO₂/CdS/CdTe/MoTe₂. Our simulation results of the studied structure are compared with a reference cell with and without back surface field (BSF) of MoTe₂.



Key words: AMPS, Numerical simulation, CdTe, Thin-films solar cells.

References:

[01] A. Nowshad, S. Kamaruzzaman, K. Makoto, Sol. Energy Mater. Sol. Cells, 2007, 91,1202.

[02] C. Ruppert, OB. Aslan, T. F. Heinz, Nano Lett., 2014, 14, 6231.

Structural, Mechanical, Electronic, Elastic and Chemical Bonding Properties of the Complex K_2PtCl_6 -Structure Hydrides Sr_2RuH_6 : First-Principles Study

O.Boudrifa¹, A.Bouhemadou².

¹ *Research Center In Industrial Technologic CRTI, P.O. Box 64, Cheraga 16014, Algiers – Algeria*
o.boudhrifa@crti.dz

² *Laboratory of Developing New Materials and their Characterization. Department of Physics, Faculty of Science, University of Sétif 1, 19000 Sétif, Algeria*
a_bouhemadou@yahoo.fr

Abstract:

Several applications of hydrides have been found so far, e.g. switchable mirrors [1–2], energy storage [3–4], rechargeable batteries [4], etc. Using first-principles density functional calculations, we have studied the structural, electronic elastic and elastic properties of the complex hydrides Sr_2RuH_6 . The calculated structural properties; namely equilibrium lattice constants, internal free parameters, bulk modulus and its first-order pressure derivative, are in good agreement with the available results. The relative changes of the structural parameters versus hydrostatic pressure have been investigated. The elastic constants and their pressure dependence are predicted using the static finite strain technique and the polycrystalline isotropic elastic moduli, namely bulk modulus, shear modulus, Young's modulus and Poisson's coefficient, Lames coefficients, average sound velocity and Debye temperature are numerically estimated in the frame-work of the Voigt–Reuss–Hill approximations. The mechanical stability of the considered materials has been examined on the light of the pressure dependence of the elastic constants. The elastic anisotropy of the X_2RuH_6 has been studied using three different methods. The analysis of the site and momentum projected densities, charge transfer and charge densities show that bonding is of covalent-ionic nature. The band structures show that all studied materials are indirect energy band gap semiconductors.

Keywords: Structural, elastic, electronic, chemical bonding ab initio calculations, Electronic band, densities of states, Charge density.

References:

- [1] J.N. Huiberts, R. Griessen, J.H. Rector et al., *Nature*, 1996, 380, p.231.
- [2] J.W.J. Kerssemakers, S.J. van der Molen, N.J. Koeman et al., *Nature*, 2000, 406, p.489.
- [3] P. Chen, Z.T. Xiong, J.Z. Luo et al., *Nature*, 2002, 420, p.302.
- [4] L. Schlapbach and A. Züttel, *Nature*, 2001, 414, p.353.

Theoretical study of structural and optical properties of CuI, AgI compounds.

F.Bougradja¹, S. Touam², I.Moussaoui³, S. Ghemid², H. Meradji²

¹. Laboratoire LAPLASO, Département de Physique, Faculté des Sciences

². Laboratoire LPR, Département de Physique, Faculté des Sciences

³. Laboratoire LESIMS, Département de Physique, Faculté des Sciences
Université Badji Mokhtar, Annaba, Algérie.

bougradjafaiza@yahoo.fr

seltmatouam@gmail.com

moussaouiibtissem@gmail.com

Ghemid-m@yahoo.fr

hmeradji@yahoo.fr

Abstract:

The structural and the optical properties of CuI, AgI compounds have been calculated using the full-potential linearized-augmented plane wave (FP-LAPW) method[1]. The exchange and correlation potential is treated by the generalized-gradient approximation (GGA) using the Wu-Cohen (WC-GGA) parameterization for all calculs.

The Wu-Cohen (WC-GGA) was used for the exchange and correlation energy density functional. The ground state properties such as lattice constants, bulk modulus, and refractive index are in good agreement with numerous experimental and theoretical data.

The ground state properties such as lattice constants, bulk modulus, the dielectric function, refractive indice, reflectivity and absorption coefficient, are in good agreement with numerous experimental and theoretical data.

Keywords: FP-LAPW, the reflection coefficient, Optical properties.

References :

[1] O.K. Anderson, Phys. Rev B 42,3060(1975).

Ab initio electronic structure calculations of half-metallic ferromagnetism in diluted magnetic semiconductors based CdS.

Ch. Bourouis¹, A. Meddour¹

¹ *Laboratoire de Physique des Matériaux, Université 8 Mai 1945 Guelma, BP 401 Guelma 24000, Algeria*

Abstract :

In this work, we report theoretical investigations of structural, electronic and magnetic properties of ordered dilute ferromagnetic semiconductors $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}$ with $x=0, 0.25, 0.5$ and 0.75 in zinc blende (B3) phase using all-electron full-potential linear muffin tin orbital (FP-LMTO) calculations within the density functional theory and the generalized gradient approximation.

The analysis of band structures, density of states, total energy, exchange interactions and magnetic moments reveals that both the alloys may exhibit a half-metallic ferromagnetism character. The value of calculated magnetic moment per Fe impurity atom is found to be $4\mu_B$. Moreover, we found that p-d hybridization reduces the local magnetic moment of Fe from its free space charge value of $4\mu_B$ and produces small local magnetic moments on Cd and S sites.

Keywords: Diluted magnetic semiconductor, Half-metallic ferromagnetism, Ab-initio calculations, Electronic structure, and Magnetic property.

Références :

- [1] K.Sato, L.Bergqvist, J.Kudrnovsky, P.H.Dederichs, O.Eriksson, I.Turek, B. Sanyal, G.Bouzerar, H.Katayama-Yoshida, V.A.Dinh, T.Fukushima, H.Kizaki, R.Zeller, *Reviews of Modern Physics* 82(2010)1633.
- [2] Ch Bourouis, A. Meddour, *J. Magn. Magn. Mater.* 324 (2012) 1040.

Optical, elastic and thermodynamic properties of KMnTe_2

Y. Bourourou^a, A. benmakhlouf^{b,c} and B. Bouhafs^a

^a *Modeling and Simulation in Materials Science Laboratory, University of Sidi Bel-Abbès, 22000 Sidi Bel-Abbès, Algeria*

^b *Département de physique, Faculté des Sciences Exactes, université Abderrahmane Mira-Bejaia, Algérie*

^c *Laboratoire de physique des Matériaux, Université Amar Telidji, BP 37G, Laghouat 03000, Algérie*

Abstract:

The complex compounds in the A-Mn-Q (A=alkali metal, Q=chalcogenides) systems have been an active field of research due to wide range of technological applications. The studies have shown many new compounds with different compositions and a variety of structures and properties [1,2]. In this paper, structural, optical and thermodynamic properties of KMnTe_2 was investigated using generalized gradient approximation GGA within the framework of density-functional theory (DFT). Spin-polarized, non-polarized and antiferromagnetic calculations were performed to show the effect of magnetic moment on magnetic stability. At equilibrium volume, the calculations show that the KMnTe_2 is more stable in the SP state, and carry a high magnetic moment. the calculated elastic constants for our compound indicate that it is mechanically stable at ambient pressure.

Key words: Density functional theory, Elastic constants, Thermodynamic properties, GGA.

References:

- [1] K. Klepp, P. Böttcher, and W. Bronger, "Preparation and crystal structure of $\text{Na}_2\text{Mn}_2\text{S}_3$," *Journal of Solid State Chemistry*, vol. 47, pp. 301-306, 1983.
- [2] E. J. Wu and J. A. Ibers, " $\text{Cs}_2\text{Mn}_3\text{Te}_4$," *Acta Crystallographica Section C*, vol. 53, pp. 993-994, 1997.

Propriétés structurales et électroniques du $Mg_{1-x}Sr_xTe$ par la méthode de FP-LAPW .

B. Boutarfa^{1*}

^{*1} *Laboratoire de physique de Guelma (Guelma physics laboratory) – GPL*
Département des sciences de la matière, université 8 Mai 1945 Guelma, BP. Box 401, Guelma 24000, Algeria
b.ellagoune@yahoo.fr

Résumé :

Les propriétés structurales et électroniques du $Mg_{1-x}Sr_xTe$ dans la phase rocksalt ont été étudiées. Les calculs ont été effectués par la méthode de calcul des ondes planes augmentées (FP-LAPW) qui se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé (GGA) pour le terme du potentiel d'échange et de corrélation (XC). Les valeurs du paramètre de réseau sont en accord avec les valeurs rapportés dans la littérature . L'étude des propriétés électroniques, a montré que les composés SrTe et MgTe ont des bandes interdites indirectes.

Pour $Mg_{1-x}Sr_xTe$ ces différentes propriétés physiques ont été calculées, notamment la variation de grandeurs structurales, électroniques en fonction de la concentration x. Nous avons porté notre attention sur les paramètres de courbure (Bowing) correspondants à ces propriétés physiques.

Mots clés : DFT, FP-LAPW, alliages ternaires, paramètres de courbure.

Simulation des propriétés électriques d'une cellule solaire en hétérojonction à base de InGaP/GaAs

F. Bouzid^{1,2,*}, M. Hadjab¹, A. Hadj Larbi¹

¹ *Unité de Développement des Couches Minces et Applications UDCMA - Sétif / Centre de Recherche en Technologies Industrielles CRTI, P. O. Box 64, Chéraga 16014, Alger - Algérie.*

² *Laboratoire des matériaux métalliques et semi-conducteurs LMSM, Université de Biskra, B. P. 145, Biskra.*
^{*} faycal.bouzid@ymail.com

Résumé :

Durant ces dernières décennies, la simulation numérique devient un outil important pour prédire le comportement électrique des dispositifs à semi-conducteurs tel que les cellules photovoltaïques.

Le principal objectif de ce travail est d'évaluer les propriétés électriques d'une cellule solaire en couche mince à base d'une hétérojonction (InGaP/GaAs). Pour ce faire, une simulation de la réponse spectrale et de la caractéristique courant-tension a été effectuée en utilisant un programme de simulation développé sous Visual Basic 6. Notre calcul indique que le rendement possible peut être supérieure à 32%, sous une illumination 1-Soleil AM1.5 et une température ambiante, en utilisant des paramètres matériel réaliste.

Mots clés : Simulation, Cellule solaire, Couche mince, hétérojonction, Rendement.

Référence :

- [1] Y. Özen, N. Akin, B. Kınacı, S. Özçelik, *Solar Energy Materials & Solar Cells*, **2015**, 137, 1–5.
- [2] P. H. Than, K. Uchida, T. Makino, T. Ohshima, S. Nozaki, *Japanese Journal of Applied Physics*, **2016**, 55, 04ES09-1.
- [3] S. M. Sze, K. K. Ng, Third Edition, *John Wiley & Sons*, **2006**.
- [4] S. R. Kurtz, J. M. Olson, D. J. Friedman, J. F. Geisz, K. A. Bertness, A. E. Kibbler, *the Materials Research Society's Spring Meeting*, NREL-CP-520-26494, **1999**.

La demi-métallicité dans les matériaux

Zoulikha Charifi^{1,2*}, Hakim Baaziz^{1,2}

¹ *Physics Department, Faculty of Science, University of M'sila, 28000 M'sila, Algeria*

² *Laboratory of physics and chemistry of materials , University of M'sila (Algeria)*

* *Corresponding author: Charifi Zoulikha E-mail: charifizoulikha@gmail.com*

Résumé :

La demi métallicité dans les matériaux à base de chrome CrX (X= As, Sb) a été étudié dans les trois phases la phase (ZB), la phase NaCl et la phase orthorhombique. Les calculs ont été effectués par la méthode des ondes planes augmentées (FP-LAPW) qui se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le terme de potentiel d'échange et de corrélation (XC) a été traité en utilisant l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralise (GGA) pour calculer les propriétés structurales tel que (le paramètre de réseau, module de compressibilité, énergie minimale...etc.), et pour améliorer la valeur du gap d'énergie, l'approximation EV-GGA a été appliquée.

Mot Clé: DFT; demi métallicité; magnétisme.

Références:

- (1) P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnika and K. Luitz, WIEN2k, Technical Universität Wien, Austria, 2001; ISBN 3-9501031-1-2.
- (2) B. Hamad, Z. Charifi, H. Baaziz and F.Soyalp, J. Magn. Magn. Mater, 324, 2012, 3345-3350
- (3) Z. Charifi, B. Hamad, H. Baaziz and F. Soyalp, J. Magn. Magn. Mater, 393 2015, 139-145
- (4) Ali H. Reshak, Z. Charifi and H. Baaziz, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 326 (2013) 210-216.

First-principles calculation of the structural, electronic, and thermodynamic properties of quaternary hydrides $\text{Li}_x\text{Na}_{1-x}\text{MgH}_3$

Samir Cheddadi¹, Houcine Meradji¹, Sebti Ghemid¹

¹ *Laboratoire de Physique des Rayonnements, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar, Annaba, Algeria*

Abstract :

Full-potential linearized augmented plane wave plus local orbital method (FP-LAPW+lo) calculations were performed for the quaternary hydrides $\text{Li}_x\text{Na}_{1-x}\text{MgH}_3$ ($x = 0, 0.25, 0.5$ and 0.75) in order to investigate the structural, electronic properties. We obtain band gaps of 3.52, 3.89 and 3.71 eV for $\text{Li}_x\text{Na}_{1-x}\text{MgH}_3$ ($x = 0, 0.25$ (I), 0.5 (II) and 0.75), respectively. So the band gaps become wider with increasing Li in $\text{Li}_x\text{Na}_{1-x}\text{MgH}_3$. The reaction enthalpies for $\text{Li}_x\text{Na}_{1-x}\text{MgH}_3$ phases have been investigated along four possible dehydrogenation reaction pathways, and the enthalpy change of two pathways is found to be nearly linearly reduced with increasing the Li substitution level from $x = 0$ to $x = 0.75$. The obtained calculation results suggest that Li substitution in NaMgH_3 may result in a favorable modification for onboard hydrogen storage application.

Keywords : FP-LAPW, DFT, structural properties, hydrides, band gap, Debye model.

References :

- [1] C.M. Araújo, S. Li, R. Ahuja, P. Jena, Phys. Rev. B 72 (2005) 165101.
- [2] R.D. Cortright, R.R. Davda, J.A. Dumesic, Nature 418 (2002) 964.
- [3] L. Schlappbach, A. Zuttel, Nature 414 (2001) 353.
- [4] S.V. Alapati, J.K. Johnson, D.S. Sholl, J. Phys. Chem. B 110 (2006) 8769.

Structural, electronic and thermodynamic properties of $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$ mixed crystals

S. Chelli¹, R. Mahdjoubi¹, S. Touam¹, H. Meradji¹, S. Ghemid¹

¹*LPR laboratory. Department of Physics. University Badji Mokhtar. Annaba*

Résumé:

Using first principles calculations within DFT based on the full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW), we calculated the structural, electronic and thermodynamic properties of the NaCl ternary alloys $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$. We used the generalized gradient approximation (GGA-PBE) for the exchange – correlation (XC) potential. Our investigation on the effect of composition on lattice constants, bulk modulus and band gap. The energy gap $E_g(x, y)$ has been determined over the entire composition x and y . On the other hand, the thermodynamic stability of these alloys was studied by calculating the excess enthalpy of mixing, ΔH_m as well as the phase diagram. It was shown that these alloys are stable at high temperature.

Keywords: DFT, NaCl, energy gap, phase diagram.

Étude des propriétés structurales et électroniques de $\text{Ti}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_2$.

R. AMRAOUI, M. DOGHMANE, S. CHETTIBI

*Laboratoire de physique des matériaux Université 8 mai 45 Guelma
amraoui.rabie@yahoo.com*

Résumé :

Nous avons effectué des calculs ab initio des propriétés structurales, et électroniques du compos $\text{Ti}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_2$ de structure tétragonale, avec différentes concentrations en nickel. Utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW), dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Pour le potentiel d'échange et de corrélation, nous avons utilisé l'approximation de gradient généralisée proposée par Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE). L'incorporation de Ni entraîne une augmentation progressive de l'énergie de gap avec l'augmentation de la concentration en Ni.

Simulation du rayonnement diffus par les paramètres de la théorie de Mie : Application sur les couches tissulaires.

H. Chorfi ; K. Ayadi

*Laboratoire d'optique appliquée
Institut d'optique et mécanique de précision-Université Sétif1
Email : chorfi@chemopa2@gmail.com; ayadi.khaled@hotmail.com*

Résumé :

La détermination des propriétés optiques d'un milieu biologique nécessite une bonne compréhension de l'interaction lumière-particule. La théorie permettant de décrire cette interaction est connue sous le nom de la théorie rigoureuse de la diffusion de Mie qui peut être appliquée pour étudier les milieux biologiques.

Au cours de notre travail, nous avons développé un algorithme permettant de déterminer la distribution des tailles des particules en fonction des variations angulaires et spectrales du rayonnement diffus. Nos résultats sont en bonne accord avec la microscopie.

Mots clés : La diffusion de la lumière, La théorie de Mie, L'interaction lumière- tissu biologique.

Référence :

- [1] P. Yang et al, Investigation of scattering coefficients and anisotropy factors of human cancerous and normal prostate tissues using Mie theory, Proc.of SPIE,vol 8941 (2014), p 06.
- [2] H. Suzuki, I. S. Lee, Calculation of the Mie scattering field inside and outside a coated spherical particle, International Journal of Physical Sciences, vol 3 (2008), p 09.
- [3] Y. Sakurada et T. Nakamura, Démonstration of the light scattering phenomenon in the atmosphere, Proc. of SPIE, vol 4588, (2002), p 491.
- [4] C. Matzler, MATLAB Functions for Mie Scattering and Absorption, research Report (2002), University of Bern, p 05.
- [5] D. Goldstein, Polarized light, second édition, Marcel Dekker, (2003), p 26.
- [6] H. Huiling et al, Light scattering by a spheroidal bubble with geometrical optics approximation, Elsevier (2012), p 3.

Caractérisation optique d'un guide ridge de faible largeur en niobate de lithium.

L.DEHBI¹, A.BELKHIR¹, F.BAIDA²

¹Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Faculté des Sciences, Université Mouloud MAMMERRI, BP 17 RP, 15000 Tizi-Ouzou, Algérie, e-mail : dehbi.lynda@yahoo.fr

²Département d'Optique P.M. Duffieux, Institut FEMTO-ST UMR 6174 CNRS Université de Franche-Comté, F- 25030 Besançon Cedex, France

Résumé :

Dans ce travail, nous présentons une étude FDTD d'un guide d'onde optique de type ridge [1] réalisé sur un substrat de niobate de lithium (LiNbO_3) pour des applications en optique guidée. Un double confinement du mode fondamental est obtenu par la présence d'un gradient d'indice induit par la diffusion du titane. Ce mode interagit avec un réseau de Bragg inscrit sur le guide. La dispersion du LiNbO_3 dans la gamme optique est décrite par le modèle de Sellmeier [2] que nous avons intégré dans le code FDTD. Les résultats obtenus montrent que l'énergie est confinée en haut du guide ridge conduisant à un double confinement transversal conformément aux prédictions théorique et expérimentale. De plus, une réflexion presque totale est obtenue par l'inscription d'un réseau constitué de seulement 3 ouvertures sur une large gamme de fréquence centrée autour de 1550 nm.

Mots clés : Guide ridge, FDTD, Sellmeier.

Références:

- [1] I. P. Kaminow, Applied Physics Letters, **1974**, 24(12), 622
- [2] O. Gayer, Z. Sacks, E. Galun, and A. Arie, Applied Physics B, **2008**, 91(2), 343.

Hot electrons effects on the calculation of collisional rates

Samia Dilmi, Abdelmalek Boumali

Faculté des Sciences exactes, Université Hama Lakhdar d'El-Oued, B.P. 789 El-Oued 39000, Algérie

E-mail: dilmisamia@gmail.com

Laboratoire de Physique Appliquée et Théorique, Université Larbi Tébessi -Tébessa-, 12000, W. Tébessa, Algérie.

E-mail: boumali.abdelmalek@gmail.com

Abstract :

The electron impact ionization is an important atomic process in the line radiative emissions simulation and also for the study of ion balance. Several issues related to the study of laboratory plasmas, astrophysics and controlled thermonuclear fusion require the knowledge of the atomic structure as the energies of different levels and cross sections. This work is based on the FAC code (Flexible Atomic Code) to calculate the ionization cross sections. The ionization rate will be generated by a numerical calculation. We studied the effects of hot electrons fraction in the ionization rates. The hot electrons fraction is represented by a non-Maxwellian distribution. The ionization rates are generated from cross sections and weighted by this distribution. The use of non-Maxwellian distribution of hot electrons for different fractions showed the sensitivity of these rates to fractions of hot electrons. The results are compared to those found in the literature.

Keywords: collisional radiative models, electron impact ionization, FAC Code, Non-Maxwellian distribution of electrons.

References:

- [1] S. Dilmi, E.H .Guedda, A.M. Boumali, *Can. J. Phys*, (2013), **91**: 1–4
- [2] S.B. Hansen, A.S. Shlyaptseva, *Phys. Rev*, (2004), **E 70**, 036402.
- [3] A. Escarguel, F. B. Rosmej, C .Brault, Th .Pierre, R .Stamm, K. Quotb, *Plasma Phys. Control. Fusion*, (2007), 49, 85–93
- [4] Gu M. F., FAC 1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>

First principal DFT study of structural and electronic properties of SnGe_n (n=1-17) clusters

S. Djaadi, K.E. Aiadi, S. Mahtout

Laboratoire de Développement des Energies Nouvelles et Renouvelables en Zones Arides (UKMO), Ouargla-Algérie, djaadi58@gmail.com

Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie, mahtout_sofiane@yahoo.fr

Abstract:

In this work, we report ab initio calculations of structural and electronic properties of pure Ge_{n+1} and SnGe_n (n = 1-17) clusters by using density functional theory (DFT) with the generalized gradient approximation (GGA) implemented in SIESTA packages. The evolution of the binding energies shows a competitive increasing behavior in the binding energy between the two species which means the cluster stability is enhanced during the cluster grows. The HOMO-LUMO gaps values have a decreasing tendency with the increasing of size implying the enhancing of their chemical activity. The very small value of HOMO-LUMO gaps (n=1-3) indicates high metallic character of corresponding clusters. The calculated vertical electron affinity (VEA) and vertical ionization potential (VIP) indicates that the larger SnGe_n clusters will capture more easily one electron and they need more energy to lose one electron.

Keywords: DFT calculations, siesta package, Sn-Ge clusters, structural properties, electronic properties.

References:

- [1] P. N. Samanta, K. K. Das, Computational and Theoretical Chemistry, 2012, V 980, 123.
- [2] S. Mahtout, Y. Tariket, Chemical Physics, 2016, V 472, 270.
- [3] P. Hohenberg, W. Kohn, Physical Review B, 1964, V 136, 864.
- [4] P. Ordejón, E. Artacho, J. M. Soler, Physical Review B, 1996, V 53, 10441.

A first-principle study of half-metallic ferrimagnetism in the Ti₂FeZ (Z=Al,Ga,In) Heusler

Mohammed Dreif^{a,*}, Youcef Guermit^a, Nour-eddine Benkhetou^a, Djamel Rached^a

^a *Laboratoire des Matériaux Magnétiques, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Djilali LIABES de Sidi-Bel-Abbès, 22000, Algérie.*

* driefed@gmail.com

Abstract:

Recently, a new class of materials has attracted much attention in view of their applications in spintronics, which are called halfmetallic ferromagnets(HMF). This notion is derived from their electronic structure[1-2].

Using first principle of the complete method of potential linearized augmented plane wave (FPLAPW), we study the structural, electronic and magnetic properties of Ti₂FeZ (Z = Al, Ga, In) alloys with Hg₂CuTi kind alloys structure. These happen to be half-metallic ferrimagnets . In addition to this, the total magnetic moments of Heusler alloys are Ti₂FeZ agree with the rule $M_{tot} = Z_{tot} - 18$ Slater-Pauling with a gap energy 0.56, 0.60 and 0.64 eV spin down, respectively.

Keywords: Half-metallic. Heusler alloys. First-principle. Electronic property, Structure property.

Reference :

- [1] I.Zutic, J.Fabian, S.DasSarma, Rev. Mod. Phys.76(2004)323.
- [2]J.deBoeck,W.van Roy, J.Das, V. Motsnyi, Z. Liu, L. Lagae, H.Boeve, K.Dessein, G.Borghs, Semicond. Sci. Technol. 17(2002)342.

Numerical simulation of reflection spectra and group delay for various linearly chirped apodized fiber Bragg gratings.

A. Hassainia⁽¹⁾ S. El-Akrmi⁽²⁾ A. Sahki⁽²⁾ L. Djeghab⁽¹⁾ Y. Diaf⁽²⁾

⁽¹⁾ Radiation Physics Laboratory, Faculty of Sciences, Department of Physics, Badji Mokhtar University, 23000 Annaba, Algeria.

⁽²⁾ Laboratoire d'Etudes et Recherche en Instrumentation et Communication, Faculty of Engineering, Department of Electronics, Badji Mokhtar University, 23000 Annaba – Algeria.

e-mail: soumaya.elakremi@univ-annaba.org

Abstract:

Since the discovery of photosensitivity in optical fibers, there has been great interest in the fabrication of Bragg gratings within the core of a fiber. The paper is devoted to the simulation of the spectral performances of three apodization profiles of linearly chirped fiber Bragg gratings which are used in the field of chromatic dispersion compensation of communication systems and sensors areas. The reflection spectrum and the group delay ripples are analyzed. The simulations are based on solving coupled mode equations by transfer matrix method that describes the interaction of guided modes.

Keywords: Fiber Bragg grating, apodization, side-lobes, chromatic dispersion compensation, passive photonic devices.

References:

- [1] A. Ikhlef, R. Hedara, M.Chikh-Bled, Uniform Fiber Bragg Grating modeling and simulation used matrix transfer method, *IJCSI International Journal of Computer Science Issues*, Vol. 9, Issue 1, No 2, January 2012.
- [2] Andreas Othonos and Kyriacos Kalli, *Fiber Bragg gratings Fundamentals and applications in Telecommunications and Sensing*, Artech House (1999).
- [3] Ghiringhelli, F. Fundamental properties of Bragg gratings and their application to the design of advanced structures. *University of Southampton eprints*. soton.ac.uk/15468 (2003).
- [4] Shuisheng Jian, Yucheng Zhao, Daoping Wei, Tangjun Li, Genxiang Chen and Yuwen Qin, Dispersion compensation experiment on 19 ps pulse width over 133 km single mode fiber with tunable chirp and wavelength gratings, *Science in China Series E: Technological Sciences*. 42 (1999) 165-170.

Estimation de la température de curie d'Heusler inverse V_2MnAl par le calcul spin spirale

F. FAID, K. Kaddar, S. Bahlouli et M. Elchikh

Laboratoire de Physique des Matériaux et des Fluides, Département de Physique, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran-MB, BP 1505 Oran El Mnaouer, Alegria
faidpt_fares@yahoo.fr

Résumé :

L'étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques d'Heusler V_2MnAl a été entreprise en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) [1]. Le but de présent travail est de prédire le comportement demi-métallique et de faire une estimation de la température de curie de V_2MnAl . Nous avons utilisé la méthode des ondes planes linéairement augmentées à potentiel total (FP-LAPW) implémenté dans le code Elk [2]. En utilisant l'approximation du gradient généralisé (GGA) [3] pour le traitement de l'énergie d'échange et de corrélation, en tenant compte des fortes corrélations des orbitales d des atomes V et Mn nous avons utilisé GGA+U [4]. Les propriétés structurales ont montré que la structure la plus stable de V_2MnAl est ferromagnétique dans la structure Hg_2CuTi , ainsi que le calcul de la structure de bande pour les deux directions de spin montre que V_2MnAl présente un comportement ferrimagnétique demi-métallique, et La température de Curie estimée pour ce composé avec la méthode de spin spirale est 578.009 K.

Mots Clés : Heusler, température de curie, V_2MnAl , demi-métallique, GGA+U, Elk.

Référence :

- [1] W. Khon and J. Sham, *Phy. Rev.*, **1965**, A 140, 1133.
- [2] elk.sourceforge.net (Elk version 3.1.12)
- [3] J. P. Perdew, K. Burk and M. Emzerhof, *Phy. Rev. Lett* , **1996**, 77, 3865.
- [4] V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan and A. I. Lishtenstein , *JPhys-Condens. Matter*, **1997**, 09, 767.

Investigation of optical interband transitions of the copper halide CuCl compound

S. Fnides*, B. Bennecer, L. Kalarasse

**Physics Laboratory at Guelma, University of Guelma P.O Box 401 Guelma 24000, Algeria*

**E-mail: souhir.fnides@gmail.com*

Abstract:

First principles calculations by means of the potential linearized augmented plane wave method within generalized gradient approximation (GGA) were carried out for the electronic and optical properties of the copper halide CuCl compound. The CuCl has zinc blende structure (ZnS) and shows direct band gap, the density of states and band gap pressure coefficients are given. On the other hand, an accurate calculation of linear optical functions like refraction index and both parts of dielectric function is performed. The assignment of the peaks and structures to the different interband transitions is analyzed in detail. The results are compared with previous calculations and experimental measurements, we show that our calculated values compare acceptably well with values reported in the literature.

Key words: FP-LAPW, Copper halide, optical properties, dielectric function.

References:

S. Hull, D. Keen, Phys. Rev. B 50, 5868 (1994)

Influence de la couche 4d des éléments de transition sur les propriétés du composé MgS.

M.H. Gous¹, A. Meddour¹, Ch. Bourouis¹

*1, Laboratoire de Physique des Matériaux, Université 8 M ai 1945 Guelma, BP 401, Guelma 240 00, Algérie.
gousph@hotmail.fr*

Résumé :

Nous avons utilisé le code wien2k, basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour étudier les effets qui se produisent dans le semi-conducteur à large gap (MgS) quand les cations (Mg^{2+}) sont remplacés par un métal de transition caractérisé par des électrons de type 4d dans sa couche périphérique. Notre étude est une suite aux études antérieures faites sur les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) à base d'éléments de transition caractérisés par une couche 3d. Le matériau qui a fait objet de notre étude est $\text{Mg}_{0.75}\text{Nb}_{0.25}\text{S}$; les résultats obtenus ont montré qu'il est demi-métallique ferromagnétique avec un moment magnétique égal à $3\mu_{\text{B}}$.

Mots Clés : DFT, DMS, stabilité structural, propriétés électroniques, moment magnétique.

Modeling optical properties of porous silicon layers: using reflectance spectra measurements and Bruggeman's effective medium approximation.

Guermi Nora¹, *Remache Louardi*^{1,2}, *Abdelhakim Mahdjoub*^{1,3}

E-mail: nora-guermi@hotmail.fr

Laboratoire des matériaux et structure des systèmes électromécanique et leur fiabilité (LMSSEF)

Faculté des sciences et des sciences appliquées,

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie, Université Larbi Ben El M'hidi Oum El Bouaghi 04000, Algérie.

Abstract:

Optical properties of porous silicon layers (porosity or refractive index and layer thickness)-prepared by etching silicon wafers in solution based on hydrofluoric acid-are crucial parameters to fabricate efficient multilayer structures. In this aim, we were prepared a series of samples using different current density and etching time. These samples were characterized by measuring the reflectance spectra in the range of 350-1100nm. Their porosity and thickness were determined by fitting the experimental reflectance spectra with the theoretical reflectance spectra which is calculated from a model relying on Bruggeman's effective medium approximation (BEMA) and the stratified medium theory. The results show that the porosity increases as increasing the current density, the refractive index calculated from BEMA varies between 2.8 and 1.4 corresponding to porosities 25% and 76% respectively. The etching rate determined from thickness and etching rate was also rise with the current density. These results are in agreement with the theory of porous silicon formation.

Key words: Porous silicon; Porosity; Refractive index; thickness; Reflectance spectra.

External magnetic field effect on the electronic, magnetic properties of Heusler alloys Ni₂(Mn,Co)Al by Wien2K.

Youcef Guermit^{a*}, Mohammed Dreif^a, Nour-eddine Benkhattou^a, Djamel Rached^a

^a *Laboratoire des Matériaux Magnétiques, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Djilali LIABES de Sidi-Bel-Abbès, 22000, Algérie.*

* gyoucef75@gmail.com

Abstract:

The compounds of Heusler form a remarkable class of materials due to their various (diverse) physical properties and potential applications. Are appointed after the German mining engineer and chemist Friedrich Heusler In 1903[1]. A large number of experimental works confirm the effects of external magnetic field on the Heusler alloys [2-3]. The purpose of this work is to study the electronic and magnetic properties of Ni₂(Mn,Co)Al Heusler alloys by using the first-principle projector augmented wave potential within the generalized gradient approximation. The calculated results that the two compounds are ferromagnetic materials and the magnetic moment of Ni₂MnAl is 4.09 μ B superior to Ni₂CoAl 1.64 μ B. Also the effect of external magnetic field in the electronic and magnetic show that the magnetic and electronic properties of Ni₂MnAl remains stable but can change to Ni₂CoAl.

Mots Clés: Heusler alloys , External magnetic field, magnetic and electronic properties.

Reference :

- [1] G. B. Johnston and E. O. Hall, Studies on the Heusler alloys I. Cu₂ MnAl and associated structures, J. Phys.: Conf. Ser. 29, 193 (1968).
- [2] A.S. Turabi , H.E. Karaca , H. Tobe , B. Basaran , Y. Aydogdu , Y.I. Chumlyakov , Scripta Materialia 111 , 110–113(2016).
- [3] C.O. Aguilar-Ortiz , D. Soto-Parra , P. Alvarez-Alonso, P. Lazpita , D. Salazar ,P.O. CastilloVilla , H. Flores-Zúniga , V.A. Chernenko, Acta Materialia 107 , 9-16(2016).

Investigation of Parameters Affecting the Efficient Generation of Rayleigh Modes in Anthracene

Abdenour HADDAD

*Laboratoires des Semi-Conducteurs, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhtar, BP 12, Annaba, DZ-23000, Algeria. E-mail: ab_haddad@yahoo.fr
Département de Physique Et Chimie, École Normale Supérieure de Constantine, DZ-25000, Algeria.*

Abstract:

Reflected ultrasonic waves from specimen carry valuable information on elastic behaviour. However, several acoustic parameters may obscure and prevent their efficient generation and/or detection. In order to overcome such difficulties, we investigated the effects of operating frequency, f , the densities of liquids ρ_{liq} , solids ρ_s , and opening aperture of lens θ_m , on the generation efficiency, Eff , of Rayleigh modes. The deduced analytical relations were found to be:

$$Eff = 0.13 + 0.99 \exp(-f / 37.2), \quad Eff = 0.17 + 0.98 \exp(-\rho / 1136.9)$$
$$Eff = 4.31 \times 10^{-3} + 6.79 \times 10^{-3} \rho_{liq} \quad \text{and} \quad Eff = 0.443 - 1.18 \exp(-\theta_m / 7.2)$$

Keywords: Anthracene, ultrasonic waves, Rayleigh mode, acoustic microscopy, efficiency.

References:

- [1] Zinin, P. V., in Handbook of Elastic Properties of Solids, Liquids and Gases eds. Levy, Bass and Stern, Academic Press, New York, 2001, p 187.
- [2] Briggs A., "Advances in Acoustic Microscopy", Plenum Press New York. 1995.
- [3] Haddad, A., Doghmane, M., Hadjoub, Z. Doghmane, A., *Journal of Optoelectronics And Advanced - Symposia*, 2009, Vol. 1, No. 3, p. 285

Fundamental properties of the rocksalt ZnO and MgO: An *ab-initio* prediction

Moufdi HADJAB^{a,b}, Smail Berrah^c, Hamza Abid^a

^a Thin Films Development and Applications Unit, UDCMA, Setif – Research Center in Industrial Technologies, CRTI, P. O. Box 64, Cheraga 16014, Algiers

^b Applied Materials Laboratory, Research Center, University Djillali Liabes, 22000 Sidi Bel Abbas

^c Mastery Renewable Energies Laboratory (LMER), University of A. Mira, Bejaia

Abstract:

The one of the most accurate first-principles methods is the Full Potential Linearized Augmented Plane Wave (FP-LAPW)¹ formalism, based on Density Functional Theory (DFT)^{2,3}, has been exploited to study theoretically, the fundamental properties of the both ZnO and MgO rocksalt binary compound using 16 atoms rocksalt supercell which corresponds to 1×1×2 conventional cell (Fig. 1). The Local Density Approximation (LDA)^{4,5} was used only for the structural properties, to treat the exchange-correlation terms. In order to explore the wanted properties. The recently modified semi-local Becke-Johnson potential within LDA correlation in the form of (mBJ-LDA)⁶ was used to predict the optoelectronic properties of ZnO and MgO binary materials. As results, our computed lattices parameters equal to: 4.22 Å and 4.16 Å respectively, showed satisfactory agreements with experimental values (4.27 Å and 4.2 Å) for ZnO and MgO respectively again. In order to understand the changeability between relaxed and un-relaxed of the electronic structures, The calculated band structures reveal that ZnO posses indirect band gap (Γ -M) while for MgO have an indirect band gap (Γ - Γ) which agree well with the experiment and other theoretical calculations. Optical dielectric function, refractive index, absorption coefficient, reflectivity, optical conductivity and the electron energy loss, are well described in a wide range of the incident photon energy. The acquired results are used to give an significant guideline to the material's design for optoelectronic applications.

Keywords: ZnO, MgO; FP-LAPW, electronic materials; Optical parameters; *ab initio* calculations.

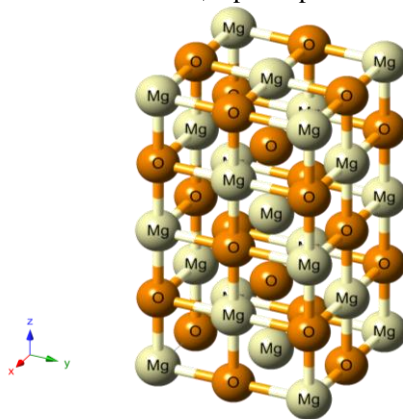


Fig. 1: Crystal structure of MgO (supercell).

References:

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, G. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, FP-L/APW+lo Program for Calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Vienna, (2001).
- [2] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B 136 (1964) 864–871.
- [3] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. A 140 (1965) 1133–1138.
- [4] J. P. Perdew, Y. Wang, Phys. Rev. B 45 (1992) 13244.
- [5] J. P. Perdew, A. Zunger, Phys. Rev. B 23 (1981) 5048.
- [6] F. Tran, P. Blaha, Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 226401

Simulation ab initio des propriétés physique des clusters de Tin (n=2-15)

R.Haichour¹, S.Mahtout²

¹Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie, pgtizza@hotmail.com

²Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie, mahtout_sofiane@yahoo.com

Résumé :

Les clusters des métaux de transition constituent aujourd'hui le vase d'une multitude de recherches dû à leurs excellentes propriétés et leurs éventuelles applications dans le domaine de la nanotechnologie. Les clusters de Titane sont particulièrement étudiés ces derniers temps, du point de vue théorique [1,2] qu'expérimentale [3,4] ; celui-ci offre des propriétés électroniques et magnétiques très intéressantes. Dans cette perspective, en se basant sur le calcul ab initio, la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et les pseudo potentiels implémentés dans le programme SIESTA [5,6] toute une étude des propriétés du titane Ti de taille allant de 2 à 15 à été faite. Les énergies de cohésion obtenues par atome (E_c /atome), le groupe ponctuelle de chaque structure et Gap (ΔE) HOMO –LUMO, le niveau de Fermi et le moment magnétique pour chaque clusters sont bien exposés et interprétés.

MotsClés : Nanomatériaux, cluster, simulation ab initio, DFT, propriétés électroniques, propriétés magnétiques.

Références :

- [1] J.J. Zhao, Q. Qiu, B.L. Wang, J.L. Wang, G.H. Wang, Geometric and electronic properties of titanium clusters studied by ultrasoft pseudopotential, Solid State Commun. (2001). 118 ,157–161.
- [2] M. Castro, S.R. Liu, H.J. Zhai, L.S. Wang, Structural and electronic properties of small titanium clusters: a density functional theory and anion photoelectron spectroscopy study, J. Chem. Phys. (2003) 118 , 2116–2123.
- [3] L. Lian, C.X. Su, P.B. Armentrout, Collision-induced dissociation of Ti_n ($n = 2-22$) with Xe: bond energies, geometric structures, and dissociation pathways, J.Chem. Phys. (1992). 97, 4084–4093.
- [4] M. Sakurai, K.J. Watanabe, K.J. Sumiyama, K.J. Suzuki, Magic numbers in transition metal (Fe, Ti, Zr, Nb, and Ta) clusters observed by time-of-flight mass spectrometry, J. Chem. Phys. (1999). 111, 235–244
- [5] P. Ordejón, E. Artacho and J. M. Soler, Phys. Rev. (1996). B 53, 10441.
- [6] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, and D.Sánchez-Portal, J. Phys.: Condens. Matt. (2002) .14, 2745.

Electronic and Ferromagnetic Properties of 3d (V)-Doped Barium Sulfide

HAMIDANE Ouafa*, Athmane MEDDOUR ^{†**}

*a- Laboratory of Materials Physics, Department of material sciences
Faculty of mathematical, informatics and material Sciences University of 08 Mai 1945 Guelma, Algeria*

**Email : ouafa_hamidane@yahoo.com*

***Email : meddour.athmane@univ-guelma.dz*

Abstract:

The objectif of this study is to investigate the electronic structure and ferromagnetic properties of barium sulfide doped with vanadium impurity. The calculations were performed by using the first-principle calculation of density functional theory. We have found that the $Ba_{0.75}V_{0.25}S$ and $Ba_{0.5}V_{0.5}S$ compnds are half metallic ferromagnetic with total magnetic moment of 3 per V atom, while for high concentration $x=0.75$, the $Ba_{0.25}V_{0.75}S$ becomes nearly half metallic .due to broadening of 3 d(V) states in the gap.

Keywords: Half-metallic materials. Ferromagnetism, Density functional theory, Spintronics .

References :

- [1] Durandurdu, M. : Chem. Phys, (2010) ,367 ,82.
- [2] Zhou, X, Roehl, J.I, Lind, C, Khare, S.V.: J. Phys.Condens.Matter, (2013), 25, 075401.
- [3] Yamaoka, S,Shimomura, O.,Nakasawa, H .,Fukunaga, O. : Solid State Commun,(1980),33,87.
- [4]Weir, S.T., Vohra, Y.K., Ruoff , A. L. : Phys. Rev,(1986),B33,4221

Impact of Fe anti-site in magnetic moment of FePt thin films

Katia HAMMAR*, Leila MESSAD, Abdalhamid ZIANE

Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou U. M. M. T. O (LPCQ), Algérie

**hammar.katia@yahoo.fr*

Abstract :

Simple composition of the tetragonal FePt phase, L10 with large uniaxial magnetocrystalline anisotropy have attracted most attention in magnetic storage application; the effect of Fe anti-site in magnetic moment of the mixed Fe_{0.25}Pt_{0.75} layer with Pt on surface was investigated. The calculations have been performed using the density functional theory (DFT) as implemented in vienna ab initio simulation package (VASP), the projector augmented wave method with exchange correlation function is used for spin polarized generalized gradient approximation (GGA). The magnetic moment of Pt and Fe (anti-site) in the most outer atomic layer increased to about 5.13 % and 4.04 % respectively.

Key words : L10 FePt, magnetic moment, anti-site defect, DFT.

Etude des propriétés physique du composé Heusler Cu₂PrAl : méthode ab initio

Abdelkrim Hamri

Djillali Liabès University of Sidi Bel-Abbès, Sidi Bel-Abbès 22000,Algeria.

Email : hamri-karim@yahoo.fr

Résumé :

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales, élastiques électroniques et magnétiques d'une classe d'alliages appelés les alliages Heuslers [1,2]. Nous avons porté notre attention sur l'étude d'un matériau à base de terre rare, le Cu₂PrAl en utilisant l'approximation LSDA, LSDA+U et LSDA+U+SO pour mieux définir les états 4f de Pr.

On a démontré que ce composé porte un caractère métallique, tandis que nos résultats prouvent que le potentiel de coulomb influe sur les orbitales 4f des terres rares et d'autre part, l'interaction spin-orbite est un facteur clé pour comprendre les propriétés électroniques et magnétiques de ce matériau.

Mots Clés : les alliages Heuslers, propriétés électroniques, la méthode FP-LAPW.

Références :

- [1] Ristoiu D, Nozieres JP, Borca CN, Borca B, Dowben PA, Appl Phys Lett , (2000) , 76:2349.
- [2] Ristoiu D, Nozieres JP, Borca CN, Komesu T, Jeong HK, Dowben PA, Europhys Lett, (2000) ,49:624.

Refractive index sensing in 2D photonic crystal waveguide incorporating with microcavity Modelling

Ahlam Harhouz1*, Abdesselam Hocini1,

*1Laboratoire d'Analyse des Signaux et Systèmes, Electronics department
BP.166, Route Ichebilia, Université Mohamed Boudiaf de M'sila, M'sila 28000, Algeria*

** harhouz7ahlam@gmail.com, hocini74@yahoo.fr*

Abstract :

In this work, we design a new Infiltrated liquid sensor based on a 2D photonic crystal (PhC) waveguide incorporating a tapered microcavity to sense small refractive index changes. The refractive index (RI) sensor is formed by a point-defect resonant cavity in the sandwiched waveguide with triangular lattice of air holes (index profile of silicon slab $n_{si}=3.42$ and air $n_{air}=1$). The properties of the sensor are simulated using the finite-difference time-domain (FDTD) algorithm and the plane wave expansion (PWE) method (RSoft Photonic Suite). Sensors based on PhC waveguides incorporating microcavities have many advantages in compactness, high sensitivity and quality (Q) factor, easy extension to sensor arrays and various choices of materials, and capability of parallel measurement [1-4]. On the other hand, a tapered-shift structure along the line defect increases the quality factor of the microcavity [5].

Key words: photonic crystal, RI sensor, microcavity, PhC waveguide

References:

- [1] S. Mandal, D. Erickson, "Nanoscale optofluidic sensor arrays", *Optics. Ex*, pp.1623-1631, 2008;
- [2] L. Huang, H. Tian, D. Yang, J. Zhou, Q. Liu, P. Zhang, Y. Ji, "Optimization of figure of merit in label-free biochemical sensors by designing a ring defect coupled resonator", *Opt. Commun*, pp. 42-49, 2014.
- [3] L. Huang, H. Tian, D. Yang, J. Zhou, Q. Liu, P. Zhang, Y. Ji, "Label-free optical sensor by designing a high-Q photonic crystal ring-slot structure", *Opt. Commun*, pp.73-77, 2015.
- [4] J. Zhou, H. Tian, D. Yang, Q. Liu, Y. Ji, "Integration of high transmittance photonic crystal H2 nanocavity and broadband W1 waveguide for biosensing applications based on Silicon-on-Insulator substrate", *Opt. Commun*, pp.175-183, 2014.
- [5] E. Kuramochi, M. Notomi, S. Mitsugi, A. Shinya, T. Tanabe, and T. Watanabe, "Ultra-high-Q photonic crystal nanocavities realized by the local width modulation of a line defect", *Appl. Phys. Lett.* 88, 041112, 2006.

CO adsorption on Zn impurity in a substitutional on a Pd(111) surface : a DFT study

K. Hebali¹, H. Bouhani benziane¹, O. Sahnoun¹, M. Sahnoun¹

¹Laboratoire de Physique Quantique de la Matière et Modélisation Mathématique (LPQ3M), University of Mascara, Algeria.

Email: hebalikhaled@yahoo.fr

Email: bouhanibenziane_hamida@yahoo.fr

Email: omar.sahnoun29@gmail.com

Email: sahnoun_cum@yahoo.fr

Abstract:

The interaction of carbon monoxide (CO) with solid surfaces is a topic of fundamental and applied interest on the most systems studies in surface science. It has been extensively investigated for the understanding of elementary step(s) inhomogeneous catalytic reaction [1]. In this work, we used the density functional theory calculations of different coverage of CO adsorption on Pd(111) and on Zn impurity in a substitutional on a Pd(111) surfaces (Pd₃Zn, Pd₂Zn₂, PdZn₃ over layers and Zn subsurface layer). It was investigated in terms of total energies and structural properties. All critical characteristics, such as adsorption site, adsorption geometry, adsorption energy, CO vibrational frequency and local density of states (LDOSs) have been obtained.

Keywords: Carbon monoxide, Palladium, Zinc, Density functional theory, Adsorption

Reference:

[1]: M. Bradshaw, F.M. Hoffmann, *Surf. Sci.* **1978**, 72, 513

Study of structural and electronic properties of ZnX (X=S, Se and Te)

S. kaour^a, Ch. Bourouis^b

^a *Laboratory of Active Component and Materials, University of Oum El Bouaghi, Oum El Bouaghi 04000, Algeria, selmakaour185@gmail.com.*

^b *Laboratory of Materials Physics, University 8 May 1945 Guelma, Guelma 24000, Algeria, bourouisse_ch@yahoo.fr.*

Abstract:

In this work ab-initio calculation method was used to study the structural and electronic properties of zinc chalcogenides (ZnS, ZnSe, ZnTe) using the all-electron full-potential linear Muffin tin orbital (FP-LMTO) within the local density approximation LDA, and the generalized gradient approximation GGA. The structural parameters in the zinc-blende and wurtzite phases have been estimated. Results of band structures, DOS states and energy gap are in good agreement with other theoretical calculation and experimental data.

Key Words: Semiconductor II-VI, FP-LMTO, zinc-blende, wurtzite, band gap.

References:

- [1] Z. Nourbakhsh, J. Alloys compounds, 2010, 505, 698.
- [2] F. Boutaiba, A. Zaoui, M. Ferhat, Superlattice Microstruct, 2009, 46, 823.

Structural and elastic properties of perovskite alkaline tantalate

S. Karfaf*, B. Bennecer¹, F. Kalarasse².

*Corresponding author : karfaf.saliha@gmail.com *Physics Laboratory at Guelma, University of Guelma P.O
Box 401 Guelma 24000, Algeria

¹ b_bennacer@hotmail.com

² fateh.kalarasse@gmail.com

Abstract :

Alkaline tantalate, NaTaO₃ have attracted a lot of interest in recent years due to their interesting photocatalytic properties and their photocatalytic activity is influenced by a lot of factors, making them ideal model systems for in-depth theoretical investigation. In this work, we present first principles studies of the structural properties for cubic (Pm3m), tetragonal (P4/mbm), orthorhombic (Pbnm) and (Cmcm) NaTaO₃ phases. In addition, the elastic properties including bulk modulus and shear modulus are determined. The electronic and static dielectric constants, the Born effective charges are also studied. All the calculations are carried out using the plane wave pseudo potentials method (PP-PW) within the density functional theory. The exchange and correlation potential is evaluated using the generalized gradient approximation (GGA).

Keywords : perovskite, ab initio methods, elastic properties, Born effective charges.

Study of structural, electronic and Optical chalcopyrite CuInTe₂.

D.kerroum¹, H.bouafia², B .Sahli² , B.Djebour¹, M.Azzouz¹, et S.Hiadi¹

¹Laboratoire de microscopie électronique USTO, département de physique, BP1505 El m'naouar, Oran, Algérie

² Laboratoire de Génie Physique, Université Ibn Khaldoun – TIARET – 14000.

Abstract:

In this work, we have presented a study on the structural, electronic, optical chalcopyrite CuInTe₂. The calculations were performed by Ab initio method called FP-LMTO (The full-potential linear muffin-tin orbital) which is based on the formalism of the theory of density functional theory (DFT), using the approximation LDA (approximation of the local density), GGA (generalized gradient approximation) and GGA + U. This allowed us to determine the lattice parameter a_0 , bulk modulus B_0 and its derivative B' , the structure of power and the density of states band, the charge density, We found that our results are in good agreement with the experimental and other work.

Ternary CuInTe₂ semiconductors represents part of pnictides family type II–IV–V₂ compound, They have attracted a considerable attention because of their application in solar cells [1], which make them potential candidates for photovoltaic applications, light emitting devices and as infrared detectors [2].

References

- [1] J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett., 77, 3865 (1996).
- [2] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 30, 5390 (1944).

Enthalpies of Formation of Equiatomic Binary Hafnium Transition Metal Compounds HfM (M=Co, Ir, Os, Pt, Rh, Ru)

H. Krarcha^{1*}, S.Messaadia²

¹PRIMALB Laboratory, Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Batna 1, Algeria.

²Department of physics university Batna1

¹*email krarcha1974@gmail.com

Abstract :

In order to investigate Hafnium transition metal alloys HfM (M= Co, Ir, Os, Pt, Rh, Ru) phase diagrams in the region of 50/50% atomic ratio. We have used plane wave pseudopotential method (PP-PW) within the density functional theory (DFT) with the local density approximation (LDA) to calculate the energetic properties for 6 Hafnium transition metal compounds in their equilibrium structure CsCl (B2). The obtained enthalpies of formation are discussed and compared to some of the existing models (Miedema[1]and Bennett-Watson[2]) and available experimental data.

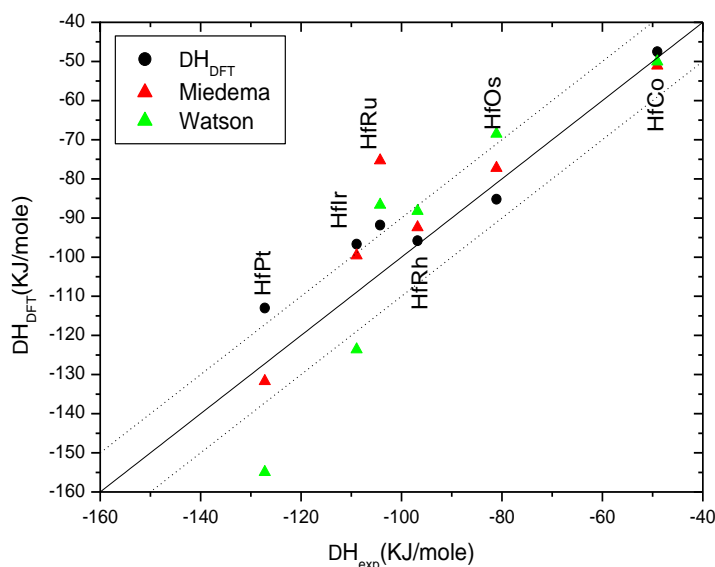


Figure 1: Comparison of calculated enthalpies of formation for the binary equiatomic compounds HfM with experimental measurements [3-5]. The solid line shows unity ($y = x$) while the dashed lines present an error range of 10 kJ/mol.

Keywords : Enthalpy of formation, transition metal, binary compounds.

Reference:

- [1] Miedema AR, Niessen AK, de Boer FR, Boom R, Matten WCM. Cohesion in metals: transition metal alloys; 1989. North-Holland, Amsterdam.
- [2] R. E. Watson & L. H. Bennett, Phys. Rev. Lett. 15, (1979),1130-1134.
- [3] Q. Guo, O.J. Kleppa, J. Alloys Compounds 321 (2001) 169.
- [4] Topor L, Kleppa OJ. Metall Trans A 1988;19:1827-31.
- [5] Gachon JC, Selhaoui N, Aba B, Hertz J. J Phase Equ 1992;13:506.

Simulation de l'implantation ionique du phosphore dans la matrice ZnO

B.Leghighane¹, A.Ouerdane²

¹ centre de Recherche en Technologies Industrielles CRTI ,Cheraga, Alger

² Université Djilali Bounaama de khemis Meliana, Theniat elhad , Ain eldafla Alger

Résumé :

Le matériau ZnO montre de manière quasi-naturelle un dopage de type n [1]. Son dopage de type p représente une importante problématique récurrente depuis plus d'une quinzaine d'années.

Dans ce travail nous avons fait une simulation numérique du dopage de ZnO en type p. Pour cela, nous avons utilisé le code dénommée TRIM (Transport and Range of Ions in Matter) et SRIM (Stopping and range of Ions in Matter) développé par Ziegler et al [2]. C'est une simulation faite pour caractériser l'interaction des ions avec des cibles échantillons en gaz ou en solides. Les résultats numériques visent à étudier l'interaction d'un faisceau d'ions avec la surface semi-conductrice du ZnO.

Dans notre étude le bombardement des ions du phosphore P tombe sur la cible ZnO selon une incidence normale au plan de la surface du matériau avec la possibilité de former des postes vacants sur la zone irradiée le composé de type II-VI ZnO [3]. Concernant l'effet de l'ion phosphore P, nous pouvons affirmer la formation de nanostructures sur la surface du matériau bombardé mais aussi et surtout un nouveau arrangement des atomes d'un nouveau matériau contenant dans sa matrice le phosphore P comme dopant.

Mots clés : ZnO, ZnO semi-conducteur, dopage de ZnO .

Références :

[1] S.B. Zhang, S.-H. Wei, Y. Yan, Physica B 302–303 (2001) 135.

[2] Z. Liang, R. Gao, J. L. Lan, O. Wiranwetchayan, Q. Zhang, C. Li and G. Cao, Solar Energy Mater. Solar Cells 117, 34 (2013).

[3] Myriam Protiere, Synthèse de Nanocristaux Fluorescents de semi-conducteurs II-VI et III-V. Augmentation de l'échelle de synthèse, L'université de JOSEPH FOURIER. (2007) .

Phonon transmission by fcc sandwich layers in Cu/Pt/Cu and Pt/Cu/Pt systems

F. Lekadir^{1,2} and R. Tigrine^{1,2}

¹ *Laboratoire de Physique et Chimie Quantique*

Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou. e-mail : fazialekadir@yahoo.fr

² *Laboratoire des Molécules et des Matériaux*

Université du Maine, Av. Olivier Messiaen, 72085 Le Mans Cedex 09 France. e-mail : tigriner@yahoo.fr

Abstract:

A calculation of the coherent and ballistic phonon transport via thin nanojunctions between fcc lattices is presented. The model system A/B/A consists of a finite number of fcc (110) atomic layers of an element B sandwiched between two fcc semi-infinite crystal lattices of another element A oriented in the same (110) plane. It is applied to the Cu/Pt/Cu nanojunction and to the inverse Pt/Cu/Pt nanojunction. The theoretical calculations of the ballistic phonon transmission via the nanojunction are carried out using the matching method. The possible experimental measurements of this ballistic transmission in comparison with theoretical results should be a useful probe for the determination of alloying force constants across the interface between two such elements. The full fcc dynamics of this system is under study.

Keywords: metallic interface, matching theory, Bimetallic structures, thin film

References:

- [1] A. Khater, R. Tigrine, B. Bourahla, *Phys. Status Solidi (b)*, (2009) , 246, 1614.
- [2] F. Haupt, T. Novotny, W. Belzig, *Phys. Rev. Lett.*, (2009), 103, 136601.
- [3] M. Mizuguchi, Y. Suzuki, T. Nagahama, S. Yuasa, *J. Appl. Phys.*, (2006), 99, 08A907.

Approximated Color-singlet Partition Function of the Quark-Gluon Plasma at Finite Temperature and Chemical Potential

B. Moussaoui and A. Ait El Djoudi

*Laboratoire de Physique des Particules et Physique Statistique,
Ecole Normale Supérieure-Kouba, B.P.92, 16050, Vieux-Kouba, Algiers, Algeria*
bachir8211@hotmail.fr
ait_amel@hotmail.com

Abstract:

This work deals with a description of the deconfinement phase transition (DPT) from a hadronic gas consisting of massless pions to a color-singlet Quark-Gluon Plasma (QGP) at finite temperature T and chemical potential μ . Considering the color singletness condition, the partition function at finite chemical potential is calculated for the QGP phase, using the group theoretical projection method [1, 2]. It turns out that the obtained color-singlet partition function (CSPF) at $\mu \neq 0$ is complex and can not be used directly to derive physical quantities characterizing the QGP, from usual thermodynamical relations. We propose an approximation on the CSPF, which should allow us to calculate physical quantities of the QGP at finite μ . A suitable numerical method is then used for calculating mean values of some response functions, describing well the system undergoing a thermal DPT, at $\mu = 0$ and $\mu \neq 0$, within the phase coexistence model [3, 4].

Keywords : Deconfinement phase transition, Quark-Gluon Plasma, color singletness.

References:

- [1] K. Redlich and L. Turko, Z. Phys. C **5** (1980) 201.
- [2] L. Turko, Phys. Lett. B **104** (1981) 153.
- [3] C. Spieles, H. Stocker, C. Greiner, Phys. Rev. C **57** (1998) 908. 153.
- [4] A. Ait El Djoudi, Canad. J. Phys. Vol 91 N°10 (2013) 793.

Etude par simulation les propriétés optoélectroniques des matériaux semiconducteurs appliqués en cellules photovoltaïques

M.OULEDALI^{1,3}, B. AMRANI² S. LOUHIBI-FASLA³,

(¹) Institute of Science and Technology, Department of Materials Science, University Centre of Tamanrasset

Laboratory of Physics of Thin Films and Materials for Electronics (LPC2ME), University of Oran Es Senia (³)

Laboratory of Micro and Nano-Physics (LaMiN), ENPO, Oran.

Résumé :

Le sujet concerne l'étude par calculs de premier principe des propriétés optoélectroniques des matériaux semi-conducteurs de type I-III-VI₂. Ces matériaux ont révélé récemment beaucoup d'intérêt dans la communauté des sciences des matériaux tel que la conversion photovoltaïque. Cette étude s'appuiera sur la théorie DFT qui tend à s'imposer comme le standard pour les calculs de structure électronique dans la communauté des sciences des matériaux, car elle permet d'obtenir de bonnes prédictions structurales et énergétiques. Les résultats ainsi obtenus étaient confrontés aux données expérimentales issues de la littérature.

Mots-clés : Premier principe, Semi-conducteurs, DFT, Optoélectroniques, Photovoltaïque.

Références :

- [1] J.E. Jaffe, A. Zunger, Phys. Rev. B 20 (1984) 1882. [2] J.L. Shay, J.H. Wernick, Ternary Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronic Properties and Applications, Pergamon Press, Oxford, 1975, pp. 11, 12 and 73.
[3] M.I. Alonso, K. Wakita, J. Pascual, N. Yamamoto, Phys. Rev. B 63 (2001) 75203. [4] Xiaoshu Jiang, W.R.L. Lambrecht, Phys. Rev. B 69 (2004) 035201.

Etude Des Propriétés Structurales, électroniques des binaires ZnO, SnO2 avec la méthode FP-LAPW.

RAHMANI Mohamed¹, YAKOUBI Abdelkader²

*Affiliation 1,2 ; Faculté de sciences exactes, Département de matériaux et développement durable, Etude des Matériaux et Instrumentations Optiques, Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès ;
rahmani.m2277@gmail.com, Yakoubi_aek@yahoo.fr*

Résume :

Dans ce travail on a utilisé la méthode des ondes planes augmentées avec linéarisation (FP-LAPW) qui se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité, pour calculer les propriétés structurales, électroniques des binaires ZnO et SnO2. Nous avons calculé les propriétés structurales, électroniques par les approximations LDA et GGA. Pour le terme du potentiel d'échange et de corrélation. La dépendance en composition des propriétés structurales et électroniques à savoir, le paramètre de maille, le module de compressibilité et le gap d'énergie ont été analysés.

First principles study of structural and electronic, properties of AgBr

H.Rekab-Djabri^{1,2,*}, S.Louhibi-Fasla¹, and F.Madani.

¹Laboratoire de Micro et de Nanophysique LaMiN – ENP d'ORAN, BP 1523, El M'Naouer, 31000, Algérie

²Faculté de SNVST, Université AKLI Mohand-Oulhadj -BOUIRA-

*Author to whom correspondence should be addressed; E-Mail: Rekabdjabrihamza@yahoo.fr

Abstract:

We report first principles calculations of structural and electronic, properties of AgBr compounds in zinc blende and rocksalt structures employing the density functional theory (DFT) within the local density approximation (LDA) and the generalized gradient approximation (GGA). We employ the full potential linear muffin-tin orbitals (FP-LMTO) as implemented in the Lmtart code. Results are given for lattice parameters, bulk modulus and its first derivatives in the wurtzite (B4), zinc-blende (B3), CsCl (B2), rock-salt (B1), β Sn (B8-1) and PbO (B10) structures. The results of these calculations are compared with the available theoretical and experimental data.

Keywords: FPLMTO; structural properties; AgCl, AgBr; Phase transitions.

References:

- [1] F. El Haj Hassan, A. Zaoui, W. Sekkal, Mater. Sci. Eng. B **87** (2001) **40**.
- [2] A. Zaoui, M. Ferhat, M. Certier, H. Aourag, B. Khelifa, Phys. Lett. A **228** (1997) **378**.
- [3] R.C. Hanson, J.R. Hallberg, C. Schwab, Appl. Phys. Lett. **21** (1972) **490**.
- [4] G.J. Piermarini, F.A. Mauer, S. Block, A. Jayarman, T.H. Grballe, G.W. Hull, Solid State Commun. **32** (1979) **275**.

Simulation de la densité des états dans les semiconducteurs amorphes par la technique de Laplace à haute résolution

F. Serdouk¹ et M.L. Benkhedir²

Laboratoire de Physique Théorique et Appliquée Université Larbi Tébessi-Tébessa- Algérie

¹*iserdouk@yahoo.fr*

²*benkhedir@gmail.com*

Résumé :

Le présent travail tente d'apporter une contribution à l'étude par simulation numérique de la structure électronique, représentée par la densité des états localisés dans les matériaux amorphes, en utilisant la méthode de Laplace à haute résolution HLT [1] dans le régime transitoire [2]. Le code élaboré [3] nous a permis de déterminer la forme de la densité d'états dans le gap dans le cadre du modèle de conduction par piégeage multiple [4].

Les résultats obtenus montrent que la densité d'états est bien estimée dans le cas où la température caractéristique de la queue de bande est inférieure ou supérieure à la température de mesure, contrairement aux méthodes à basse résolution. Nous avons pu aussi identifier la densité des défauts profonds.

Mots clés : Densité des états localisés, Technique de Laplace à haute résolution HLT, Piégeage multiple.

Références :

- [1] T. Nagase and H. Naito, *J. Non-Cryst. Solids*, (1998), **824**, 227.
- [2] M. L. Benkhedir, M. Brinza, G. J. Adriaenssens and C. Main, *J. Phys. Condens. Matter*, (2008), **20**, 215202.
- [3] F. Serdouk and M. L. Benkhedir, *Physica. B*, (2015), **459**, 122.
- [4] J. Noolandi, *Phys. Rev. B*, (1977), **16**, 4466.

Etude Ab initio des propriétés structurales, électroniques et optiques du système Na₂Te.

Z.Souadia¹, A.Bouhemadou¹, R.Belkofsi², A.Benamer³ et S.Saib⁴

¹Laboratoire pour développer des nouveaux matériaux et leur caractérisation, Département de Physique, Faculté de Science1, Université Sétif, 19000 Setif,(Algeria). e-mail:souadiazohra@yahoo.fr

²Laboratoire de physico-chimie des matériaux et catalyse, département de physique, faculté de sciences exactes2. Université A/MIRA Bejaia, 06000, (Algeria). e-mail: belkfsi.reguia@yahoo.com

³Laboratoire d'Etudes des Surfaces et Interfaces des Matériaux Solides (LESIMS), Département de Physique, Faculté de Science3, Université Sétif 1, 19000 Setif,(Algeria).e-mail: benamer.ali2@yahoo.fr

⁴Laboratoire de Physique des matériaux et Applications, Université de M'sila, 28000 M'sila, Algeria), e-mail: salima_saib@yahoo.fr

Résumé :

Dans ce travail nous avons mené une étude, basée sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)[1], pour étudier les propriétés structurales, électroniques et optiques du système Na₂Te. Nos calculs atomistiques ont été exécutés avec le code CASTEP, où les fonctions d'ondes des électrons de valence sont représentées dans une base d'onde plane et les électrons du cœur sont décrits à travers des pseudo-potentiels[2,3]. L'échange et corrélations a été traité dans le cadre de l'approximation du gradient généralisé (GGA). L'investigation des propriétés structurales des composés binaires a montré que les résultats relatifs au paramètre du réseau concordent bien avec les données théoriques et expérimentales disponibles dans la littérature. Nous avons représenté les structures de bande, leurs densités d'états et leurs propriétés optiques et nous avons comparé nos résultats avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux.

Mots clés: métaux alcalins, DFT, pseudopotentials, GGA, électroniques, optiques.

Références :

- [1] JP. Perdew, A. Zunger Self-interaction correction to density functional approximations for many-electron systems. Phys. Rev B, (1981), 23:5048–5079
- [5] J.C. Phillips, Phys. RevB. (1959) ,112, 685.
- [6]J.C. Phillips, L. Kleinman, Phys. RevB. (1959) ,116, 287.

Transfert de chaleur dans les tissus biologiques par Comsol

Tagrerout abdallah⁽¹⁾, Belaidi abdelkader⁽²⁾

*Dpt. de Physique, ENSET-ENPO (1), tagroutabdalah@outlook.fr
B.P 1523 Oran El-Menouar, Algérie, (2)belaidiaek@gmail.com*

Résumé :

Un cancer du foie survient lorsque des cellules du foie, initialement normales, se transforment et se multiplient de façon anarchique jusqu'à former une tumeur maligne.

L'hyperthermie thérapeutique est une technique médicale utilisée dans le traitement des cancers. L'ablation par micro-ondes est l'innovation la plus récente dans le domaine de l'ablation des tumeurs. La technique permet d'adopter des approches souples pour le traitement. Lors du traitement, une antenne micro-ondes mince est insérée dans le tissu cancéreux et l'énergie des micro-ondes réchauffe la tumeur, en tuant les cellules cancéreuses par la production d'une région coagulée.

Dans ce travail nous avons utilisé le logiciel COMSOL Multiphysics afin d'établir une simulation pour détruire la tumeur. Les résultats suggèrent que l'ablation thermique par micro-ondes peut être réalisée avec un degré de sécurité acceptable et peut permettre un contrôle local raisonnable des tumeurs primitives et des métastases.

Mots Clés : Tumeur, thérapie, ablation par micro-ondes, champ thermique.

Reference:

[1] P. Prakash, "Theoretical Modeling for Hepatic Microwave Ablation," The Open Biomedical Engineering Journal, 4 (2010), 27-38.

[2] K. Saito, "Estimation of SAR distribution of a tip-split array applicator for microwave coagulation therapy using the finite element method," Special Issue on Techniques for Constructing Microwave Simulators, IEICE Transactions on Electronics, Vol. E84-C, (2001), 948-954.

[3] Nicolas SIAUVE .Modelling of electromagnetic fields with finite elements in hyperthermia and optimization of the applicators. décembre 2002

[4] Marwaha Anupma, Maini Surita, and Marwaha Sanjay "Microwave Interstitial Tumor Ablation": New Modality for Treatment of Liver Cancer , Bangalore2009.

Etude de 1er principe des propriétés fondamentales des alliages ternaires

S. Touam¹, I. Moussaoui², F. Bougradja³, S. Ghemid¹, H. Meradji¹

¹. Laboratoire LPR, Département de Physique, Faculté des Sciences

². Laboratoire LESIMS, Département de Physique, Faculté des Sciences

³. Laboratoire LAPLASO, Département de Physique, Faculté des Sciences

Université Badji Mokhtar, Annaba, Algérie.

selmatouam@gmail.com

moussaouiibtissem@gmail.com

bougradjafaiza@yahoo.fr

Ghemid-m@yahoo.fr

hmeradji@yahoo.fr

Résumé :

L'objectif de ce travail est d'aboutir à une meilleure compréhension des propriétés structurales des alliages ternaires $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$ et $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{I}$, ainsi que de leurs propriétés électroniques et optiques. En utilisant la méthode des ondes planes linéairement augmentées [1] dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) [2].

Le paramètre du réseau varie presque linéairement en fonction de la concentration montrant ainsi une concordance entre les prédictions DFT et la loi de Végard. Concernant les modules de compressibilité, des déviations par rapport à (LCD) ont été observées.

La variation du gap énergétique, la fonction diélectrique, l'indice de réfraction, des alliages ternaires $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$ et $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{I}$ en fonction de la composition montrent une dépendance non linéaire ; Nos résultats sont en bon accord avec les prédictions théoriques et expérimentales.

Mots clés : DFT, alliages ternaires, gap, l'indice de réfraction.

Référence :

[1] O.K. Anderson, Phys. Rev B 42,3060(1975).

[2] S. Cottenier, DFT and the family of (L) APW-methods: a step-by-step introduction, K.U. Leuven (http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks), (2002).

Simulation numérique de la technique super-résolution appliquée en imagerie astronomique.

M. L. YAHIAOUI^{1,3}, F. KHARFI^{2,3}

¹ *Faculté Des sciences de la Matière, Université Batna 1, laidaastro@hotmail.fr*

² *Département de Physique, Université Ferhat Abbas Sétif 1, kharfifaycal@yahoo.com*

³ *Laboratoire Dosage, Analyse et Caractérisation en Haute Résolution, Université Sétif 1*

Résumé :

Les techniques de super-résolution SR permettent de produire une image de haute résolution HR à partir de plusieurs images de basse résolution BR.

Dans ce travail, nous simulons les différentes dégradations que subit une image astronomique au cours de sa formation. Pour ce faire, nous considérons une image HR idéale (mire HR réel) à partir de laquelle nous tirons des images dégradées par déplacement de translation et de rotation, par l'application d'un flou, par sous-échantillonnage et par l'ajout d'un bruit et ce à travers un code approprié que nous avons développé. Les images de basse résolution obtenues par les dégradations opérées, sont par la suite utilisées pour générer une image de haute résolution grâce à un algorithme de SR capable de reconstruire une image HR. La procédure proposée est finalement appliquée au cas d'une image astronomique pour juger la robustesse de l'algorithme proposé.

Mots Clés : Simulation numérique, Super-résolution, imagerie astronomique

Références:

- [1] D. Keren, S. Peleg, *Proceedings CVPR'88. Computer Society Conference. IEEE, 1988*, pp. 742-746, Image sequence enhancement using sub-pixel displacements. In Computer Vision and Pattern Recognition.
- [2] F. Kharfi, M. L. YAHIAOUI, F. Boussahoul, *Applied Radiation and Isotopes, 2015, 101, 33-39*. X-ray computed tomography system for laboratory small-object imaging: Enhanced tomography solutions.
- [3] M. Offroy, *Thèse de doctorat. Université des Sciences et Technologie de Lille-Lille I. 2012*, Développement de la super-résolution appliquée à l'imagerie des spectroscopies vibrationnelles.

Simulation de l'effet de la température sur les caractéristiques électriques de la diode Schottky en utilisant le simulateur Atlas-Silvaco.

K.Zeghdar¹, L.Dehipi², S.Mansouri³

^{1,2,3} *Laboratoire Matériaux, Semiconducteurs et Métalliques (LMSM) Université Mohamed Khider Biskra, BP 145 RP, 07000 Biskra, Algérie. k.zeghdar@univ-biskra.dz*

² *Département de sciences de la matière, Université Batna1, Algérie. La_dehipi@yahoo.fr*

³ *Département d'électronique, Université Sétif 1, Algérie. sihemansouri@yahoo.fr*

Résumé :

Le simulateur numérique Atlas-Silvaco est utilisé pour simuler les caractéristiques électriques dans la gamme de température de 280 à 400 K afin de voir l'influence de la température sur l'évolution des courbes et d'évaluer les principaux paramètres qui caractérisent la diode Schottky (Au/n-InP). En effet, l'application de la méthode standard qu'est basée sur l'extraction des paramètres homogènes (Φ_B , n , R_s) présente certaines anomalies telle que la diminution de la hauteur de barrière (Φ_B) et l'augmentation du facteur d'idéalité (n) avec la diminution de la température, L'utilisation du modèle inhomogène proposé par Werner permet d'interpréter d'une part les anomalies observées sur les paramètres électriques extraits et de s'approcher de l'autre part, la valeur de la constante de Richardson qui est en accord avec celle donnée par la théorie ($9.8 \text{ A/K}^2\text{cm}^2$).

Mots Clés : Simulation, diode Schottky, Silvaco, InP, Température.

Référence :

- [1] D.Korucu, T.S.Mammadov, Temperature-dependent current-conduction mechanisms in Au/n-InP Schottky barrier diodes (SBDs), Journal of Optoelectronics And Advanced Materials,2012,Vol.14, p.41.
- [2] J.H Werner et H.H Guttler, Barrier inhomogeneities at Schottky contacts, J. Appl.Phys, 1991, vol.69, p1522.
- [3] F.E. Cimilli, M. Sağlam, H. Efeoğlu, and A. Turut, Temperature-dependent current-voltage characteristics of the Au/n-InP diodes with inhomogeneous Schottky barrier height, Physica B, 2009, Vol.404, p. 1558.
- [4] M.Soylu, B.Abay. Barrier characteristics of gold Schottky contacts on moderately doped n-InP based on temperature dependent I-V and C-V measurements, Microelectron Eng, 2009, Vol.86, p. 88.

NUMERICAL SIMULATION OF SOLAR CELL

¹Hana Zerfaoui, Djalel Dib, Chafia Mebarkia.

¹*Department Science of matter, University of LarbiTébessi, Tebessa- 12002-
Algeria.Email:zerfaouiphysique@gmail.com*

²*Department of electrical engineering, University of LarbiTébessi, Tebessa- 12002-Algeria. Email:
dibdjalel@gmail.com*

Abstract:

Two technologies of the photovoltaic cells are present today the cells known as crystalline (poly and mono),the cell thin layers. The development of the solar cells requires a technological change of materials used in their manufacturing. The thin layers are parts of these materials and which announced their effectiveness and growth of output of the solar cell. Our study has a study by simulation of photovoltaic cells with different materials, contributing to the development of renewable energies, our results was simulated with the SCAPS computer code in one dimension, the results obtained after optimization are V_{co} , J_{sc} , FF and the output energy of conversion of a solar cell, SCAPS is originally developed for cell structures of the CuInSe₂ and the CdTe family.

Keywords : Efficiency ,SCAPS, current-voltage and Quantum efficiency.

Theoretical and Numerical modeling of the bending behavior of composite sandwich beam

Mohammed TOURAB, Salah AGUIB, Abdelkader NOUR, Ahmed SETTAT, Toufik DJEDID

Dynamic of Engines and Vibroacoustic Laboratory, F.S.I., M.B. Boumerdes University, Algeria
mohtou2002@yahoo.fr

Abstract:

This work is devoted to theoretical and numerical study of the behavior, in three-point bending, magnetorheological elastomer (MRE) sandwich beams subjected to a variable magnetic field, under static loading. This study highlights the increase of stiffness and decrease of the maximum deflection according to the increase of the magnetic field. The results show the increase of rigidity and the decrease of elasticity as a function of magnetic field. The MRE sandwich structures can be employed in the near future in many different areas.

Key words: Sandwich beam, bending behavior, FEM, MRE.

References:

- [1] Berthelot, J., M.: Mechanical of materials and composites structures, 4rd ed., Technical & Documentation (2010)
- [2] Chikh, N., Nour, A., Aguib, S., Tawfiq, I. : Dynamic analysis of the non-linear behavior of a composite sandwich beam with a magnetorheological elastomer core, Acta Mechanica Solida Sinica. 29, No. 3 (2016)
- [3] Aguib, S., Nour, A., Djedid, T., Bossis, G., Chikh, N. : Forced transverse vibration of composite sandwich beam with magnetorheological elastomer core. Journal of Mechanical Science and Technology 30 (1) 15–24 (2016)
- [4] Aguib, S., Nour, A., Benkoussas, B., Tawfiq, I., Djedid, T., N. Chikh. : Numerical simulation of the nonlinear static behavior of composite sandwich beams with a magnetorheological elastomer core. Composite Structures 139 111–119 (2016)

Half-metallic behavior in transition metal based ternary compounds $\text{Cd}_{0.75}\text{TM}_{0.25}\text{S}$ (TM = Co and V): a first principle study

YAHY HAKIMA¹, MEDDOUR Athmane²

[#] *Laboratoire de Physique des Matériaux; Université 8 mai 1945- Guelma
BP 401, 24000 Guelma, Algérie*
¹yahihaki@yahoo.fr

Abstract:

We have performed FP-LMTO calculations based on the density functional theory (DFT) to study the electronic and magnetic properties of ternary compounds $\text{Cd}_{0.75}\text{TM}_{0.25}\text{S}$ (TM = Co and V), assuming zinc blende-type structure. The density of states (DOS) and band structures were studied to understand the electronic properties. Among the systems under investigation, $\text{Cd}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{S}$ and $\text{Cd}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{S}$ showed 100 % spin polarization at the Fermi energy (E_F). The total magnetic moment was found to be 3 μ_B , which is an integer value, as expected for half-metallic ferromagnets. The analysis of band structure and density of states shows that the TM-3d states play a key role in generating spin-polarization and magnetic moment in these compounds. Furthermore, we establish that the p-d hybridization reduces the local magnetic moment of Co from its free space charge value of 3 μ_B and creates small local magnetic moments on non-magnetic Cd and S sites.

Keywords: Half-metallic materials, Ferromagnetism, Density functional theory, Electronic structure, Magnetic properties.

References:

- [1] R.A. de Groot, F.M. Mueller, P.G. van Engen, K.H.J. Buschow, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 2024.
- [2] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, D. Ferrand, Science 287 (2000) 1019.
- [3] M. Methfessel, M. van Schifgaarde, R.A. Casali, in: H. Dreysse (Ed.), Electronic Structure and Physical Properties of Solids: The Uses of the LMTO Method, Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [4] O. Madelung, Landolt Borenstein: Numerical Data and Functional Relation- ships in Science and Technology, vol. 7b, Springer, Berlin, 1982.

Calcul DFT+U du matériau FeWN₂.

MESSIAD Meriem¹, ZANET Kamel¹

¹*laboratoire de physique de Guelma, mai24180@hotmail.fr*

Abstract:

Solid-state nitrides are of interest because they exhibit technologically useful properties and FeWN₂ one of them where several researches were applied it. FeWN₂ is a member of a family of layered hexagonal ternary nitrides, consisting of alternating layers FeN₆ octahedra and WN₆ trigonal prisms [1] . The electronic structure, magnetic moment and the exchange coupling of the ternary nitride FeWN₂ have been calculated and the calculation The calculation have been performed within generalized gradient approximation of Perdew-Burk-Erenzhof using linearized augmented plane wave (LAPW) technique, taking account the coulomb correlation through LDA+U(sic) approach. The LAPW method has been applied by using WEIN2K code.

Key words: Ab-initio, DFT+U, antiferromagnetic, ferromagnetic.

Reference:

[1] Synthesis of new ternary transition metal nitride FeWN₂ via ammonolysis of a solid state oxide precursor .D.S.BEM, H.C.ZUR LOYE, J.Solid Stat Chem.104, (1993) 374-378.

Electronic and magnetic properties of Ni-rich ternary alloys

L. Mezhoudi^a, A. Meddour^b

^{a, b} *Materials Physics Laboratory (L2PM), 08 May 1945 Guelma University, Algeria*

^a *Email: mezhoudilatifa@gmail.com*

^b *Email: meddour@yahoo.fr*

Abstract:

The ordered Ni-rich alloys are very interesting materials for study of metallic magnetism. In this work, we have calculated the electronic structure of Ni-Mn-Fe alloys using the scalar relativistic version of spin-polarized of the LMTO method with combined corrections and exchange correlation. In our calculations, we included the SO coupling as a perturbation. The density of states of Ni₃(Mn-Fe) in the minority and majority spin-states show a remarkable character. The values obtained for the magnetic moment are in good agreement with experimental and theoretical results.

Key words: NiMn-Fe, LMTO, DFT, magnetic properties, electronic structure.

Références:

- [1] H. Ebert, Phys. Rev. B 38 (1988) 9390.
- [2] O.K. Andersen, Phys. Rev. B 12 (1975) 3060.
- [3] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B 136 (1964) 864.
- [4] J.P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45 (1992) 13244

Effets de structure sur les propriétés des oxydes magnétiques dilués : CeO₂.

H. REDDAOUI, S. CHETTIBI

*Laboratoire de physique des matériaux Université 8 mai 45 Guelma
abdelalim.136@gmail.com*

Résumé :

Le but de ce travail est d'élucider l'origine du magnétisme dilué dans des oxydes semi-conducteur et isolant. Nous étudions en particulier le cas des oxydes de cérium (CeO₂) dont la nature et l'origine du ferromagnétisme sont encore très controversées. Nous étudions l'influence sur les propriétés magnétiques des effets de structures (lacune d'oxygène, présence de dopants..).

La corrélation propriétés magnétiques, structure, structure électronique est étudiée pour ces matériaux par simulation en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) implémentée dans le code wien2k basée sur la théorie de la densité fonctionnelle (DFT). Les deux approximations GGA et LDA sont employées.

Mots clés : CeO₂, DFT, propriétés magnétiques.

ATELIER 2 : INFORMATIQUE

Synthesis of Linear Arrays with Sidelobe Level Reduction using particle swarm optimization

Ouarda Barkat¹, Mohamed Bensalem¹

*¹Electromagnetism and Telecommunications Laboratory Department of Electronics, University Frères Mentouri
Constantine, Algeria
barkatwarda@yahoo.fr*

Abstract :

The particle swarm optimization (PSO) is proposed here. It is based on the evolutionary algorithms that has been applied successfully in antenna arrays. This technique is an optimizer that models the behaviour and intelligence of a swarm of bees, school or fish or flock of birds in searching for food. In antenna array problems, there are many parameters that can be used to evaluate the fitness function such as; gain, side lobe level, and radiation pattern. Here, we are interested in designing a antenna array with minimum side lobes levels. A comparative study between our results and those available in the literature, shows that PSO is capable of synthesising the unequally spaced linear arrays to produce radiation patterns with a good performance in the sidelobe region.

Simulation des protocoles de routage dans les réseaux véhiculaires(V2V)

Derdour Makhoul¹, Bayaza Rima²

*m.derdour@yahoo.fr*¹

*bayaza.rima@gmail.com*²

Math et Informatique, Chikh el Arbi TebessiUniversity

Résumé :

Les réseaux véhiculaires appelés aussi VANETS sont un type particulier de réseaux Ad hoc mobiles (MANET). Ils présentent un échantillon de systèmes de transports intelligents (ITS). L'objectif principal est d'améliorer la sécurité routière par l'utilisation de la technologie des communications inter-véhicules. Ces systèmes reposent sur des protocoles qui assurent l'échange des informations entre les véhicules. Nous avons simulé quelques protocoles en utilisant le simulateur OPNET, et les évaluer afin de déterminer le meilleur protocole permet de faire l'acheminement des informations dans les VANET.

Mot clés : VANET, Protocole de routage, simulation, AODV, OLSR, DSR.

Référence :

[1] Ahizoune Ahmed. (2011). Un protocole de diffusion des messages dans les réseaux véhiculaires. Thèse de Maîtrise ès sciences (M. Sc.) de l'Université de Montréal .Avril 2011.

[2] Sécurité de routage dans les Réseaux Mobiles Ad Hoc (Khadidja Ayad).

[3]

Détection de visage par caractéristiques de Haar-Like modifiées et réseaux de neurones

Ch. Bencheriet¹, S. Mahieddine², A. Chader²

¹Laboratoire LAIG, Faculté MISM, Université 8 Mai 1945, Guelma, Ch_bencheriet@hotmail.com

²Faculté MISM, Université 8 Mai 1945, Guelma, mehieddine_s@yahoo.com

Résumé :

Le visage est une caractéristique exploitée dans diverses applications de la vision artificielle tel que : l'interaction hommes machines, la vidéoconférence, le contrôle d'accès,...etc. La détection de visages considérée comme une phase primordiale dans ces systèmes fait l'objet du travail présenté dans ce papier où nous utilisons la variance des caractéristiques de Haar-Like pour l'extraction des caractéristiques et les réseaux de neurones pour la classification. Le système mis en œuvre détecte les visages aussi bien sur les images couleurs que sur les images niveau de gris. Afin de booster les performances du système nous avons prévu deux types de traitements. La détection de la couleur chair sur les images couleurs et le traitement multi-résolution (image pyramidale) sur les images niveau de gris. Les performances du système réalisées ont été testées sur les bases Caltech, Bao et CMU où nous avons obtenu un taux d'erreurs relativement faible et un taux de détection considérable comparé aux systèmes existants.

Mots-clés : Haar-Like, Variance de Haar-Like, PMC, image pyramidale, détection de peau.

Référence:

- [1] N.K. Cuong, J. H. Park, H-Y Jung. "Face Detection Using Variance Based Haar-Like Feature And SVM", journal of World Academy of Science, Engineering and technology, no. 60, pp. 165-168, (2009).
- [2] M. Taffar and M. Benmohammed, "Generic Face Invariant Model for Face Detection". Image Processing and Communications Challenges 3, Springer-Verlag Berlin Heidelberg. AISC 102, pp. 43-51, (2011).
- [3] C.S. Modesto, H.S. Daniel and L.N. Javier, "Combining Face and Facial Feature Detectors for Face Detection Performance Improvement". Springer-Verlag Berlin Heidelberg: LNCS 7441, pp. 82-89, (2012).

CD-mooc: context-driven massive open online courses Amélioration du taux d'abandon des apprenants.

Dr. Derdour MAKHLOUF, Nadira BENMEDAKHENE

m.derdour@yahoo.fr, benm.nadhira@gmail.com

Résumé:

Le succès des MOOC Massive Open Online Courses augmente de jour en jour, la plupart des universités étant très intéressées par ce sujet fortement lié à l'enseignement, pour la simple raison que ces derniers présentent une forte simulation du processus d'apprentissage réel. Cependant beaucoup de limitations diminuent les résultats des apprenants, tout cela à cause de la diversité de ces derniers, une seule façon de présenter le cours peut être un grand succès pour les uns, et un grand échec pour les autres. Donc il faut opter pour un mécanisme où nous pouvons diriger les apprenants dans cette classe virtuelle vers leurs propres contextes.

Notre travail consiste à proposer un modèle de personnalisation de plateformes MOOC et du contenu pédagogique. Notre solution (CD-MOOC) traite le problème d'abandon, où chaque apprenant peut trouver ses besoins d'apprentissage sur ces plateformes à l'aide de son contexte.

Mots clés : MOOC, Contexte, Adaptation, personnalisation, Laboratoire virtuelle.

Study of adaptive antenna arrays using least mean square method

Mohamed Bensalem¹, Ouarda Barkat¹

¹*Electromagnetism and Telecommunications Laboratory Department of Electronics, University Frères Mentouri
Constantine, Algeria
barkatwarda@yahoo.fr*

Abstract:

This article describes the application of the LMS algorithm, to adaptively produce weights that minimize the mean-squared error between a desired signal and the antenna arrays output to improve the performance of the array. Also, the optimum weighting of adaptive antenna arrays is accomplished by computing the weight vector that maximizes the signal to interference plus noise ratio. The optimal weight vector is in general complex with each weight having different magnitudes and phases. Using the least squares technique, we have developed a program that allows us to find the current supply, application of adaptive technique has proven to be a good way to improve array performance. In addition, it allows the orientation of the radiation pattern in the desired direction. Simulation results show the effectiveness of the proposed algorithm in pattern synthesis.

Keywords: Adaptive antenna arrays, LMS algorithm, Side lobe level.

Multiple classifiers combination for Off-line handwritten Arabic words recognition

A. Benzenache¹, H. Seridi ², H. Akdag ³

¹LabSTIC, University of 8 Mai 1945 of Guelma, Algeria, aminebenzenache@yahoo.fr

²LabSTIC, University of 8 Mai 1945 of Guelma, Algeria, seridi@labstic.net

³LIASD, University Paris 8 France, Herman.akdag@ai.univ-paris8.fr

—

Abstract:

We presented systems for global recognition of the handwritten Arabic words. We concentrate on the two stages features extraction and classification. We used a combination of three kinds of features for better representing the word: statistical, structural and Hu and Zernike moments. These features, representing the words, are extracted to be used as input, in an individual or combined of the four classifiers used in our contribution: continuous hidden Markov models (CHMMs), Support Vectors Machines (SVM), Fuzzy K Nearest Neighbor algorithm (FKNN) and a Neural Network radial basis function using Orthogonal Least Square (RBFNNs-OLS). The classifiers results are combined by using the following combination rules: the simple vote, behavior knowledge space (BKS), Dempster rule, minimum rule, maximum rule, sum rule, average rule, produced rule, theory of Bayes. To illustrate the efficiency of the proposed systems, we carried out significant experiment on IFN/ENIT benchmark database.

Key words: CHMMs, SVM, FKNN, OLS, RBF, moments.

References:

- [1] R. Al-Hajj, L. Likforman-Sulem, C. Mokbel, "Combining slanted-frame classifiers for improved HMM-based Arabic handwriting recognition," *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* 31 (7), 1165–1177 (2009).
- [2] R. A. Dara, "Cooperative Training in Multiple Classifier Systems," *Thesis* :Doctor of Philosophy, Waterloo, Ontario, Canada, 2007.
- [3] R. S. Kunte, R. D. Sudhaker Samuel, "A simple and efficient optical character recognition system for basic symbols in Printed Kannada Text," *Sadhana*, vol. 32, Part 5, pp. 521–533, 2007.
- [4] S.A. Azeem, H. Ahmed, "Effective technique for the recognition of offline Arabic handwritten words using hidden Markov models," *International Journal on Document Analysis and Recognition (IJDAR)*, vol. 16, Issue 4, pp. 399-412, December 2013.

La mise correspondance entre les points caractéristiques de deux visages différents

Yamina Bordjiba^{1,2}, H.F.Merouani^{2,3}, F. Z. Adjabi¹, A. Guerib¹

¹ Département d'informatique, Laboratoire LabSTIC, Université 8 Mai 1945

²Département d'informatique, Université Badji Mokhtar

³Laboratoire LRI, Université Badji Mokhtar

{bordjiba_yamina, hayet_merouani}@yahoo.fr

Résumé :

La mise en correspondance est une étape clé dans différentes applications, principalement dans la reconstruction tridimensionnelle, où elle consiste à localiser dans deux images les projections des mêmes points de la scène observée. C'est aussi une étape importante dans le transfert des animations faciales, où il faut faire la correspondance entre les points caractéristiques de deux visages différents. Nous nous sommes intéressés au problème de localisation des points de contrôle sur un visage cible par mise en correspondance des points caractéristiques d'un visage expressif.

Après une première étape d'extraction des points caractéristiques du visage source, où nous avons utilisé la méthode des histogrammes cumulés, la seconde étape est la mise en correspondance, qui consiste à trouver les points caractéristiques correspondants dans le visage cible. Pour résoudre ce problème, nous avons utilisé un algorithme évolutionnaire qui est l'algorithme génétique.

Paramètres	Paramètre dimensionnels	Fonction objectif	Codage	Opérateurs	Condition d'arrêt
	de population : 12 pts, 22	corrélation normalisée		selection par tournois	variation entre 0.5 et 1 nombre d'itérations = 1000
	probabilité de croisement : 0,5 probabilité de mutation : 0,1			croisement linéaire mutation	

Les paramètres de l'Algorithme génétique

Les premiers résultats, où nous avons considéré tout le visage comme zone de recherche, étaient peu satisfaisants. Pour cela, nous avons proposé de limiter la zone de recherche aux boîtes englobantes, les résultats se sont nettement améliorés.

Mots-clés : Mise en correspondance, Localisation des points de contrôle, Algorithme génétique.

Références:

[1] Bordjiba. Y, Merouani. HF, "Facial feature points detection and tracking for facial animation retargeting" International Conference of Computing for Engineering and Sciences, Istanbul, Turkey, 2015

[2] Sushil Kumar Paul, Mohammad Shorif Uddin, "Extraction of Facial Feature Points Using Cumulative Histogram". International Journal of Computer and Electronics Research, Volume 1, Issue 3, October 2012..

[3] Holland, J. H. "Adaptation in natural and artificial systems: an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence". U Michigan Press, 1975.

Une Nouvelle Formule de Pondération de Termes pour la Classification de Texte

***Djalila BOUGHAREB**^{1,2}, Nadir FARAH¹, Hamid SÉRIDI²*

¹ LabGED- Université Badji Mokhtar Annaba, BP 12 El-Hadjar 23200, Annaba- Algérie {Boughareb, farah}@labged.net

² LabSTIC-Université 8 Mai 1945-Guelma Avenue du 19 Mai 1956-B.P. 401 Guelma 24000-Algérie
{boughareb.djalila, hamid.seridi}@univ-guelma.org

Résumé:

Web 2.0 est caractérisé par la nouvelle génération de techniques d'usage de l'information basée essentiellement sur le principe de production, d'étiquetage et de partage d'informations, à cette ère, il est devenu indispensable de repérer parmi une masse de documents importante l'information pertinente qui répond au besoin de l'utilisateur.

La classification de document vise à organiser cette masse en attribuant chaque document à une classe préalablement définie.

Dans le but de résoudre le problème de classification inhérent au mauvais étiquetage de documents, on a proposé une nouvelle formule de pondération de termes basée sur la fréquence de termes et leur position au sein du document.

Mots Clés: Web, étiquetage, document.

Référence:

- [1] G. Salton, "Search and retrieval experiments in real-time information retrieval". IFIP Congress, 2, 1968, pp. 1082-1093.
- [2] K. Sparck-Jones, "Experiments in relevance weighting of search terms" Inf. Process. Manage, 15(3), 1979, pp. 133–144.

Artificial Neural Network Applied on Channel Equalization

*Fateh Bouguerra*¹, Lamir Saidi²

¹*Department of Electronics, University of Batna 2, e-mail: Bouguerra_fateh@yahoo.fr*

²*Department of Electronics, University of Batna 2, e-mail: Lamir_saidi@yahoo.fr*

Abstract:

In this work a non-linear technique based on Artificial Neural Network (ANN) using Multi-Layer Perceptron (MLP) is proposed in order to optimize processing, tracking, and minimize errors of the channel effects on numerical shaped signals in the air interface of mobile communication, this appliance will be referenced with the most used linear adaptive algorithm; Normalized Least Mean Square (NLMS) [1] as an evaluation. Through simulations, we will model the channel effects as multipath (multi-delays) and additive noise on the signal designed with complex numbers of QPSK modulation. The signal values are equalized (restored to original shape) [2] to cancel those effects with MLP and NLMS. A comparison is drawn in terms of efficiency and robustness by the Minimum Square Error (MSE) criterion; by that, this work will show the supremacy of MLP in channel equalizing.

Keywords: ANN, MLP, NLMS, Equalizer, QPSK, MSE.

References:

- [1] Paulo S.R. Diniz, "Adaptive Filtering: Algorithms and Practical Implementation," 4th Edition, Springer Science, **2013**.
- [2] K. Burse, R. N. Yadav and S. C. Shrivastava, "Channel Equalization Using Neural Networks: A Review," in *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part C (Applications and Reviews)*, vol. 40, no. 3, pp. 352-357, **May 2010**.

Segmentation of Bio-Images for Aid in the Detection of Abnormal Blood Cells

Abdellatif BOUZID-DAHO¹, Mohamed BOUGHAZI²

^{1, 2} *Department of Electronics, Faculty of Sciences of engineers, Laboratory for the study and research in instrumentation and communication of Annaba, University Badji Mokhtar, Annaba, Algeria*

¹ *daholion@live.fr*, ² *boughazi_m@yahoo.com*

Abstract:

Leukemia is a cancer of the hematopoietic cells. The detection of abnormal cells before the cancerous degeneration is a major problem for the Hematologists. There are several research as a diagnostic aid in biomedical currently based on the algorithmic development which consist in the detection of the leukemia with different methods of treatment of medical images. The objective of our work is to obtain a maximum rate of recognition of cancerous cells. For this, we are interested by elements of the Mathematical morphology, we rely on a mathematical basis to develop our proposed system, which helps us to segment, detect, characterize and describes the blood cells abnormal. This proposal is an important task in the interpretation and diagnosis of pathologies present in blood. This paper shows segmentation based on an algorithmic processing under Matlab Efficient and fast which gives very encouraging results for the identification of blood cells abnormal and fill make a comparison easy in the purpose of the distinction of the leukemia.

Keywords: leukemia, detection, mathematical morphology, diagnosis, segmentation.

References:

- [1] A. Bouzid-Daho, and M. Boughazi, Segmentation of Textured Medical Images: Approach of the K-means, Proceeding of the first International Conference on Computer Science's Complex Systems and their Applications (ICCSA'2016), In Oum El Bouaghi, Algeria, April 2016, pp. 156-161.
- [2] D. Warude and R. Singh, Automatic Detection Method of Leukaemia by Using Segmentation Method, International Journal of Advanced Research in Computer and Communication Engineering, 2016, vol. 5, N°. 3, pp. 495-498.
- [3] A. Bouzid-Daho, M. Boughazi, and C. Tanougast, Algorithmic Processing to Aid Leukemia Detection, Abstract book of International Conference on Health Sciences and Medical Technologies (ICHSMT'2016), In Tlemcen, Algeria, Septembre 2016, Mehr publishing. pp. 10.
- [4] A. Bouzid-Daho, M. Boughazi, and C. Tanougast, Classification of Blood Cells by Method K-means, Proceeding of the 3rd International Conference on Embedded Systems in Telecommunications and Instrumentation (ICESTI'16), In Annaba, Algeria, October 2016, pp. 19.

Aide au diagnostic des pathologies par les images médicales : application aux pathologies du cœur

Sara DAAS¹, Mohamed BOUGHAZI¹, Toufik HAFS¹

¹ *Département d'Electroniques, Faculté de Sciences de l'ingénieur, Laboratoire d'étude et de recherche en instrumentation et en communication d'Annaba, Université Badji Mokhtar, Annaba, Algérie*

boughazi_m@yahoo.com , hafstoufik@gmail.comsara.das@yahoo.com

Résumé :

Depuis son invention, l'imagerie médicale a été employée afin de fournir aux médecins les atouts nécessaires pour les aider dans leurs diagnostics. L'imagerie médicale est mise à leurs dispositions pour apporter des éléments clés au diagnostic et au choix thérapeutique. Les maladies cardiovasculaires étant la première cause de mortalité dans le monde, fait un sujet d'actualité dans le domaine médical. Ainsi, plusieurs cas de mort sont généralement dus à un mauvais diagnostic ou bien à l'identification tardive des pathologies cardiaque. Dans ce travail, on propose un algorithme sous MATLAB d'estimation des déformations myocardique à partir d'image IRM du cœur. Après avoir essayé plusieurs méthodes basées sur le flot optique, on a opté pour une méthode basée sur le recalage non rigide statistique. Les résultats obtenus montrent l'efficacité de la démarche adoptée pour la détection des pathologies cardiovasculaires.

Mot clés : Estimation du mouvement cardiaque, recalage non rigide statistique, IRM, pathologies cardiovasculaires, ACP, flot optique.

Référence:

- [1] Bin Gao, Wanyu Liu, Liang Wang, Zhengjun Liu, Pierre Croisille, Philippe Delachartre, Patrick Clarysse, Estimation of cardiac motion in cine-MRI sequences by correlation transform optical flow of monogenic features distance , 2016 Institute of Physics and Engineering in Medicine, 8640–8663.
- [2] Hou, M., Chen, C., Tang, D., Luo, S., Yang, F., & Gu, N.. Magnetic microbubble-mediated ultrasound-MRI registration based on robust optical flow model. 2015, Biomedical engineering online, 14(1), 1.
- [3] WANG, Liang. Myocardial motion estimation from 2D analytical phases and preliminary study on the hypercomplex signal. 2014. Thèse de doctorat. INSA de Lyon.
- [4] MAGNIER, Marie Xavier. Etude quantitative du mouvement de la paroi du cœur à partir d'images ciné-IRM par des méthodes fréquentielles de flux optique. 2010. Thèse de doctorat. Université de Bourgogne.

Etat de l'art des Modèles Mathématiques et des Applications Informatiques De Simulation Numérique du Trafic Routier

M. Fahsi¹, C. Mouilah², Samir Megnounif²

¹Laboratoire EEDIS, Université Djillali Liabes, Sidi Bel Abbes

²Laboratoire de Biomathématiques, Université Djillali Liabes, Sidi Bel Abbes.

Résumé :

La modélisation et simulation numérique du trafic est un domaine de recherche qui engendre de nombreux problèmes, comme la congestion et la gestion des priorités d'un carrefour, qui sont complexe et ne peuvent pas être résolus par les outils traditionnels d'analyse. La simulation permet la prévention et l'évaluation de des modèles numériques qui représente les systèmes routiers, afin de déterminer les solutions optimales aux différents scénarios qui peuvent se produire dans un trafic. Dans ce papier, nous présenterons un état de l'art des approches de description, de simulation numérique et d'évaluation des phénomènes d'un trafic routier [1]. Cela comprend le modèle macroscopique ou le trafic est considéré comme un groupe de véhicules simulé par un modèle, le modèle microscopique ou le trafic est considéré comme un système de particules en interaction dont chacune est gérée par un modèle, et finalement le modèle mésoscopique qui se est une approche intermédiaire entre les deux précédentes, et le trafic est considéré comme un ensemble de groupes de véhicules. Enfin, une étude de cas sera élaborer pour éclaircir les avancés du théoriques [2], [3] et pratiques [4] du domaine.

Mots Clés : Simulation Numérique, Trafic Routier, Etude de cas, Modélisation.

References:

- [1] Serge Hoogendoorn, P.H.L. Bovy, State-of-the-art of vehicular traffic flow modeling. In Institution of mechanical engineers.
- [2] Marco Antônio de Farah Caldas; Karina Thiebaut Sacramento. Simulation model of discret events applied to the planning and operation of a toll plaza. *Journal of Transport Literature*, 10(3), 40-44, Oct. 2016.
- [3] Doudou GAYE, Roger Marcelin FAYE, and B. MAMPASSI. A car following model for traffic flow simulation. *International Journal of Applied Mathematical Sciences*. Volume 9, Number 1 (2016), pp. 1-9.
- [4] Tiago M. L. Azevedo Paulo J. M. de Araújo Rosaldo J. F. Rossetti Ana Paula C. Rocha. JADE, TraSMAPI and SUMO: A tool-chain for simulating traffic light control. *Proceeding of thirteen international joint conference on autonomous agent and multiagents systems*. May 2014.

Une approche énergétique pour l'estimation de la réflectance d'un objet Lambertien

M. Hachama

Université de Khemis Miliana, hachamam@gmail.com

Résumé :

La réflectance est la capacité d'une surface à réfléchir l'énergie incidente. Elle peut être définie comme une couleur intrinsèque qui caractérise une surface, indépendamment de son illumination. L'estimation de la réflectance est utilisée dans plusieurs applications comme l'édition d'images (ré-éclairage par exemple), la reconstruction tridimensionnelle, et la reconnaissance des objets. Dans ce travail, on s'intéresse au problème d'estimation de la réflectance d'un objet Lambertien dont la surface est reconstruite à partir d'un nuage de points. On adopte une approche variationnelle dans laquelle est minimisée une énergie composée de deux termes. Le premier terme de données décrit l'apparence visuelle de l'objet et la relation entre sa réflectance et les couleurs observées. Le deuxième est une combinaison entre des normes l_1 et l_2 des variations de la réflectance et de l'illumination. Le problème obtenu (optimisation non linéaire) est résolu par un algorithme de descente de gradient. Des simulations sont présentées pour évaluer notre méthode et la comparer avec d'autres techniques de l'état de l'art.

Mots Clés: Décomposition intrinsèque, Albedo, Optimisation, Gradient, Normes l_1 et l_2 .

Référence:

[1] M. Hachama, B. Ghanem and P. Wonka, Intrinsic Scene Decomposition from RGB-D images, in IEEE International Conference on Computer Vision, (2015).

[2] J-T., Barron and J., Malik, Shape, Illumination, and Reflectance from Shading, EECS, UC Berkeley (2013).

Réutilisation des services web pour une plateforme d'apprentissage

Hadjeris Mourad¹, Bourbia Riad²

*Laboratoire des Sciences et Technologies de l'information et de la communication, Université 08 mai 1945 de Guelma,
ALGERIE*

Hadjeris.mourad@univ-guelma.dz

Bourbia.riad@univ-guelma.dz

Résumé :

Le E-Learning se développe en particulier dans les pays en développement comme une solution à la crise de l'éducation vue les exigences en matière de formation qui sont de plus en plus nombreuses ainsi qu'à l'issue du système LMD. L'évolution permanente des nouvelles technologies de l'information et de communication influence et modifie les habitudes et méthodes d'enseignement. Les systèmes basés sur le modèle Clients/Serveur classique sont délaissés au profit du Web. Ce dernier offre à ses utilisateurs par le biais d'internet des possibilités d'accès aux nombreuses sources d'informations ainsi que le partage des ressources à travers le monde.

Ce que l'on propose est de concevoir une plateforme d'apprentissage collaboratif pour le système LMD en réutilisant des web services où le tuteur sera un élément clé du système.

Mot clés : E-Learning, Web Services, Apprentissage collaboratif.

Référence :

[1] Denis Brigitte (2003) « Quel rôle et quelle formation pour les tuteurs intervenant dans des dispositifs de formation à distance ? » in Distance et savoirs vol 1, n°1.

[2] Séridi Ali, Doghmane Ilyes, Lessoued A/Hamid « Conception D'une Plateforme D'apprentissage Adaptatif Assisté par le Tuteur » .Université de 8 mai 1945 Guelma Juin 2011

[3] Sylvain RAMPACEK, « Sémantique, interactions et langages de description des services web complexes », Thèse de doctorat (2006).

[4] Ralphson PIERRE, « Le role du tutorat dans l'enseignement en ligne » Universite Paris VIII.

Nouvelle approche d'extraction des caractéristiques pour la reconnaissance des gestes dans la langue des signes

HALLACI Samir¹, SERIDI Hamid²,

¹LabSTIC, Université 8 mai 1945 GUELMA, B.P. 401, Algérie, hallaci.samir@univ-guelma.dz

²LabSTIC, Université 8 mai 1945 GUELMA, B.P. 401, Algérie, seridi@labstic.com

Résumé :

L'interaction homme-machine gestuelle constitue un axe de recherche particulièrement actif avec un potentiel applicatif important. L'objectif de ce travail est la conception de systèmes de reconnaissance et de compréhension adaptés, afin de pouvoir offrir de nouvelles possibilités d'interaction avec l'ordinateur, plus naturelles et intuitives qu'avec les périphériques classiques. La difficulté provient essentiellement des variations de l'apparence du geste, la complexité du vocabulaire, l'éclairage, l'occlusion partielle des doigts, Et l'écart de temps entre la formation et les tests de capture de données. Par ailleurs, les performances des algorithmes de reconnaissance de geste dépendent fortement de l'étape de localisation des caractéristiques du geste et la localisation de la paume et des points des doigts. Ce travail s'intéresse à la résolution des deux problèmes principaux « variations de l'apparence, Et l'alignement imprécis en raison de la mauvaise localisation des paramètres » pour fonctionner de manière fiable dans des conditions réelles complexes. Comme tout système de reconnaissance, ce système est décomposé en trois étapes : commence par la détection de la main avec la teinte tout en évitant tout conflit avec les autres entités qui ont la même propriété (visage, bras, pieds...), dans cette étape on a fait une compensation d'éclairage pour réduire au maximum la dégradation causée par une mauvaise illumination. Puis, on passe à l'étape la plus importante du système qui est l'extraction des caractéristiques, d'où on cherche à détecter tous les informations nécessaires pour décrire et différencier un geste d'un autre. Et enfin, en termine par l'étape de classification qui sera en fonction du vecteur de caractéristiques extraites dans l'étape précédente.

Mots Clés: reconnaissance de geste, interfaces gestuelles, segmentation, extraction des caractéristiques, compensation d'éclairage, classification

Références:

- [1] H. Mokhtar, M. Pramoud, « Brightness Factor Matching For Gesture Recognition System Using Scaled Normalization », International Journal of Computer Science & Information Technology (IJCSIT), Vol. 3(2) 2011.
- [2] P. Jenifer Martina, P. Nagarajan, P. Karthikeyan, Dept of ECE, PSNA College of Engineering and Technology Dindigul, Tamilnadu, India, « Hand Gesture Recognition Based Real-time Command System », IJCSMC, Vol. 2, Issue. 4, April 2013.
- [3] R.Z. Khan, A.N. Ibraheem, « Hand Gesture Recognition: A Literature Review », International Journal of Artificial Intelligence & Applications And Information Science,(IJAIA), Vol. 3, 2012.
- [4] C.Prema, D.Manimegalai, « Survey on Skin Tone Detection using Color Spaces », International Journal of Applied Information Systems (IJ AIS) – ISSN: 2249-0868, Volume 2– No.2, May 2012.

Two sided estimates of N-points Pade approximants

Fahima Hebhoub

Laboratoire LAMAHIS , Département des Mathématiques, Faculté des Sciences, Université 20 Aout 55 Skikda

Abstract:

In [1] J. Gilewicz present a new developments of the approximation of smooth functions by weighted means of N- points Pade approximant by exploiting the properties of two sided estimates of Stieltjes functions (TSE). In this work we try to characterize other functions having the TSE property rather than convex functions chosen by the authors.

Key Words: Rational approximation, Pade approximant

MSC : 2000: 41A21

References:

- [1] J. Gilewicz , R. Jedynek Approximation of smooth functions by weighted means of N-point Pade approximants Ukrainian Mathematical Journal (2014); 65-76
- [2] R. Jedynek, J. Gilewicz, Approximation of the integrals of the gaussian distribution of asperity heights in the Greenwood-Tripp contact model of two rough surfaces revisited, J. Applied Mathematics (2013) , Article ID 459280.

La reconnaissance automatique de l'écriture manuscrite arabe, appliquée aux montants littéraux des chèques

Az. Menasria¹, A. Bennia²

¹Laboratoire d'Automatique et Informatique Guelma, Guelma, Algérie
Menasria.azzeddine@gmail.com

²Département d'Electronique, Université Mentouri, Constantine, Algérie

Résumé:

Nous proposons un système de reconnaissance d'écriture arabe dédié à la lecture automatique des montants littéraux de chèques libellés en langue arabe. Dans ce travail, nous présentons un nouveau jeu de primitives pour la caractérisation des mots du montant. Le système développé s'articule autour de quatre modules distincts. Un module d'acquisition, un module de prétraitements, un module d'extraction des primitives et un module de reconnaissance (classification et décision). Ce dernier est un classificateur neuronal.

Mots Clés: Reconnaissance d'écriture, extraction des caractéristiques, classification, Réseaux de neurones.

An Immune System Simulation for a Complex Problem Resolution

H. Merabti^{1,*}, M.N. Kouahla², B. Farou² and H. Seridi²

¹LabSTIC Laboratory, May 8, 1945 University, POB 401, 24000, Guelma, Algeria merabti.dr@gmail.com

² Computer Science Department, LabSTIC Laboratory, May 8, 1945 University, POB 401, 24000 Guelma, Algeria farou@ymail.com, {kouahla.nadjib, seridihamid} @yahoo.fr

Abstract:

Bio-inspired methods are a powerful set of technics inspired from nature and enable to provide adequate solutions to complex problems related to the pattern recognition field. In this paper, we present a new variant of the Artificial Immune System (AIS) that allows detecting and recognizing complex shapes such as handwritten digits. The main purpose of the proposed system is to enhance the performance of the multi-classes handwriting recognition problems. Experiments conducted on MNIST database reveals that the proposed system can achieve a good recognition rate of isolated handwritten digits with a minimum set of features compared with similar works.

Keywords. Bio-inspired Methods, Artificial Immune System (AIS), Complex Problems, Pattern Recognition, Handwritten Recognition

References :

1. A. Amin. "Off-line Arabic character recognition: the state of the art". Pattern recognition, **1998**, 31(5), 517.
2. A. Watkins, J. Timmis, L. Boggess. "Artificial Immune Recognition System (AIRS): An Immune-Inspired Supervised Learning Algorithm". Genetic Programming and Evolvable Machines, **2004**, 5(3), 291.
3. C. L. Liu, K. Nakashima, H. Sako, H. Fujisawa. "Handwritten digit recognition: benchmarking of state-of-the-art techniques". Pattern Recognition, **2003**, 36(10), 2271.
4. R. Akerkar, P. S. Sajja. "Bio-inspired computing: constituents and challenges". International Journal of Bio-Inspired Computation, **2009**, 1(3), 135.

A Novel Array-OL model for Self-Generation of a Memory Controller for the High Efficiency Video Coding (HEVC)

Newfel Messaoudi, Salah Toumi, El-Bay Bourennane, Kamel Messaoudi,

*LERICA Laboratory – Badji Mokhtar University of Annaba - Sidi Amar, B.P# 12, Annaba, Algeria
messaoudinewfel@yahoo.fr*

*LERICA Laboratory – Badji Mokhtar University of Annaba - Sidi Amar, B.P# 12, Annaba, Algeria
salah.toumi@univ-annaba.org ;*

*LE2I Laboratory - Burgundy University - BP 47 870, 21078, Dijon Cedex, France
kamel.messaoudi@u-bourgogne.fr ; ebourenn@u-bourgogne.fr*

Abstract:

Recently, the new coding standard HEVC (High Efficiency Video Coding), has been developed in order to handle high quality video resolution. The complexity of video codec depends mainly on its multidimensional data flow dependency for various processing modules. In this paper we propose a new Array-OL model for the modeling of data flow between the different processing modules intended to self-generation of a memory controller for HEVC (H265) using VHDL code. The models will be proposed connected with high level modeling tools should be used to fulfill embedded systems; the objective of these steps is the self generation of the Netlist file from a high level description. Simulation results and synthesizing on two kind of FPGA development kits (Xilinx vertex, Xilinx vertex6) of the proposed model for HEVC .we have verified the work in frequency 263MHZ can they LUTs is less than 10% from they different part of the HEVC. This result demonstrate the accuracy and the efficiency of the proposed architecture.

Keywords: HEVC; Array-ol; Vhdl; Fpga; Netlist; Memory controller.

Reference:

- [1] Jens-Rainer Ohm, Gary J. Sullivan, Heiko Schwarz ,Thiow Keng Tanan Thomas Wiegand, ” Comparison of the Coding Efficiency of Video Coding Standards Including High Efficiency Video Coding (HEVC) ” iee transactions on circuit and systems for video technology, vol.22, no.12, december 2012.
- [2] J. Xiong, H. Li, Q. Wu, and F. Meng. “A fast HEVC inter CU selection method based on pyramid motion divergence,” IEEE Trans. Multimedia , vol. 16, no. 2, pp. 559–564, Feb. 2014.
- [3] MaheshB. Dissanayake and DilangaL. B. Abeyrathna” Performance Comparison of HEVC and H.264/AVC Standards in Broadcasting Environments”484—JInf Process Syst, Vol. 11, No.3, p p . 483494, September 2015.
- [4] Kamel Messaoud i, El-Bay Bourennane, Salah Toumi, Hichem Mayache ,Newfel Messaoudi ,Ouassila Labbani ”Utilization of the Array-OL specification language for self generation of a memory controller especially for the H.264/AVC ”vol10 .IJES .2015 p p133-147.

Reconnaissance Faciale Basée sur les Yeux et l'ACP Diagonale Bilatérale

Chahrazed Rouabhia, Hicham Tebbikh

c_rouabhia@yahoo.fr, tebbikh@yahoo.com

Laboratoire d'Automatique et Informatique de Guelma -LAIG-
Université 8 mai 1945, BP. 401, Guelma, 24000, Algérie

Résumé :

Cet article propose l'identification d'individus par les yeux et l'ACP diagonale bilatérale (BDiaPCA) [1]. Pour démontrer le pouvoir discriminant de cette partie faciale, nous l'avons comparé avec le visage entier. Dans un premier temps, nous avons segmenté les visages et les régions des yeux de manière à ne contenir que les yeux et les sourcils, ensuite effectué l'extraction de signatures suivie de la classification par des mesures de similarité 2D. Les tests de simulations ont été menés sur la base de visages PF01 et cela en comparant trois méthodes à savoir BDiaPCA, DiaPCA [2] et l'ACP2D [3] et trois distances (Yang, Frobenius et AMD). Les résultats montrent clairement l'efficacité des yeux vis-à-vis du visage pour l'identification de personnes notamment couplés avec BDiaPCA et la distance de Yang.

Mots clés: Reconnaissance Faciale, BDiaPCA, Distances de Yang, PF01.

Référence:

- [1]Ch. Rouabhia, H. Tebbikh. Bilateral Diagonal PCA based on Matrix Distance Metrics: a Projection Technique for Face Identification. *Journal of Electronic Imaging*, Vol. 22, No. 2, June 2013.
- [2]D. Zhang, Z-H Zhou, and S. Chen. Diagonal Principal Component Analysis for Face Recognition. *Pattern Recognition*, Vol. 39, pp. 140-142, 2006.
- [3]J. Yang, D. Zhang, A.F. Frangi and J-Y. Yang. Two Dimensional PCA: A New Approach to Appearance- based Face Representation and Recognition. *IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, Vol. 26, No. 1, January 2004.

Un service web pour la détection du niveau des apprenants dans un système d'apprentissage à distance adaptable

Seridi ali, Bourbia Riad

Département d'informatique

Laboratoire LabSTIC

Université 8 Mai 1045

{Seridi.ali, bourbia.riad}@univ-guelma.dz

Résumé :

Le domaine de l'éducation et de l'enseignement à distance continue d'évoluer afin d'attirer le maximum d'apprenants en offrant de nouvelles fonctionnalités, de l'innovation et une formation de qualité. Parmi les innovations, nous trouvons l'intégration des services web. L'avantage d'une plateforme d'e-learning basée sur les services, est que ces parties peuvent être développées dans différents langages et distribuées dans différents serveurs. Ainsi, chaque portion exposée en tant que service peut être utilisée par plusieurs plates-formes. Une telle approche permettrait d'économiser beaucoup d'efforts, de coûts et de temps de mise en œuvre.[1]

Notre objectif à travers ce travail est de concevoir et mettre en œuvre un service web qui permet l'évaluation du niveau des apprenants afin de leur présenter les cours et les tests adaptés à leurs niveaux. Dans un système d'e-learning adaptable chaque cours existe en plusieurs niveaux de difficulté et chaque apprenant aura l'accès au cours qui lui est adapté. Le service web proposé est indépendant de toute plateforme et sera réutilisable et partageables sur un serveur distant en utilisant les standards de la SOA. Il présentera un test conçu par une multitude de spécialiste dans différents domaines (pédagogie, linguistique, etc). Ainsi l'effort effectué pour l'élaboration du test sera bien exploité par différentes institutions.

Mots-clés : E-learning, Service Oriented Architecture, E-learning basé sur les services, Service Web.

References:

[1] Seridi Ali, Bourbia Riad: Towards A Service Oriented Architecture for E-Learning Systems ICCES 2015 Istanbul; Turkey.

[2] Jamuna, Rani S. et ASHOK, Marie Stanislas. A survey on service-oriented architecture for E-learning system. In: Intelligent Agent & Multi-Agent Systems, 2009. IAMA 2009. International Conference on. IEEE, 2009. P.1-3.

Nouvel Algorithme de segmentation de l'écriture arabe manuscrite basé sur une approche de Validation SVM.

Rachid Zaghoudi, Hamid Seridi

LabSTIC, Université 8 mai 1945 Guelma, Algérie, rachid_zmail@yahoo.fr
LabSTIC, Université 8 mai 1945 Guelma, Algérie, seridihamid@yahoo.fr

Résumé :

Dans certains algorithmes, la segmentation de l'image de mot est considérée comme étant la première étape d'un processus de reconnaissance; le but principal de ce papier est de proposer un nouvel algorithme de segmentation des mots arabes manuscrits. La technique utilisée est divisée en deux phases; au premier lieu, un Arabic Heuristic Segmenter (AHS) basé sur des règles morphologiques est appliquée sur l'image du mot afin d'obtenir une liste de points de segmentations probables (PSP). En conséquence, la deuxième phase est une méthode de validation par un SVM mono classe qui a pour but d'examiner tout les (PSP) pour se décider lequel est invalide pour l'enlever et qui est valable pour le garder comme un point de segmentation correct. Des expériences sont menées sur des images extraites de la base de données IFN/ENIT et les résultats obtenus sont très satisfaisantes.

Mots clés : Segmentation, SVM, minima, écriture arabe, HOG, ligne de base.

Références:

- [1] H A. Al Hamad, R A. Zitar, Development of an efficient neural-based segmentation technique for Arabic handwriting recognition, *Pattern Recognition*, **2010**, 43 (8), 2773.
- [2] B. Al-Badr, R M. Haralick, A segmentation-free approach to text recognition with application to Arabic text, *IJDAR*, **1998**, 1, 147.
- [3] T. Sari, M. Sellami, Overview of Some Algorithms of Off-Line Arabic Handwriting Segmentation, *International Arab Journal of information technology*, **2007**, 4 (4), 289.
- [4] C. Chang, C-J. Lin, LIBSVM: A library for support vector machines, *ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology*, **2011**, 2(27), 1.

Improving metric access methods with extended regions

Zine dine KOUAHLA, Jose MARTINEZ

Duke research group, lina laboratory umr 6241, university of Nantes, France labstic laboratory, university of Guelma, Algeria

Email {kouahla.zineddine}@univ-guelma.dz {martinez.jose}@univ-nantes.fr

Abstract:

Search for similar objects in a collection of data, based on a query object and a distance, is a fundamental problem for many applications that use large amounts of complex data. In previous work we have proposed a memory-based metric access method (MAM) that divides recursively the dataset into five disjoint regions by selecting two pivots. Let us note that, at each inner node, only two distances are calculated in order to insert a new object. We found that in large collections, the outliers objects have a negative influence on the quality of the index by the rapid increase in the size of the spheres, consequently, a slow search algorithm. Today we offer a solution that can solve this problem by detecting these objects and inserting them into linked lists attached to nodes of tree. We discussed the quality of our index and the effectiveness of the search algorithm. It will be validated on real-world data sets visual descriptors MPEG7- and compared with MM-tree techniques, Onion-tree and our IM-tree.

Key words. Metric space, indexing, tree, Linked list, parallel, complex data

References:

- [1] D. Arroyuelo. A dynamic pivoting algorithm based on spatial approximation indexes. In Similarity Search and Applications - 7th International Conference, SISAP 2014, Los Cabos, Mexico, October 29-31, 2014. Proceedings, 2014.
- [2] M. Beigbeder and A. Mercier. Etude des distributions de tf et d'idf sur une collection de 5 millions de pages html. In Atelier de recherche d'information sur le passage à l'échelle, congrès INFORSID ` , Nancy, France, June 2003.
- [3] S. Berchtold, D. A. Keim, and H.-P. Kriegel. The X-tree: An index structure for high-dimensional data. In Proceedings of the 22nd International Conference on Very Large Data Bases (VLDB), pages 28–39, Mumbai (Bombay), India, 1996.

ATELIER 3 : CHIMIE

Computational investigations on geometric structures of rhenium(I) and technetium(I) complexes of new pyridyl triazole-based ligands

Yassine Aimene¹, Achour Seridi^{1*}, Mekki Kadri¹

Laboratoire de Chimie physique, Université de 8 Mai 1945, Guelma, Algérie.

**E-mail: seridi_a@yahoo.fr*

Abstract:

In the recent years, organometallic compounds have become recognized as promising anti-cancer drug candidates. While radioactive ^{186/188}Re compounds are already used in clinics for cancer treatment, cold Re organometallic compounds have mostly been explored as luminescent probes for cell imaging and photosensitizers in photocatalysis.¹

Alberto and co-workers have also investigated metal-based drugs, introducing rhenium and technetium tricarbonyl fragments onto the tail unit. This approach was extended with the incorporation of technetium in place of rhenium and as the inert ^{99m}Tc compounds exhibit biological behaviour identical to their Re counterparts this dyad has possible theranostic (therapeutic and diagnostic) applications.²

In this context, we carried out calculations based on the DFT methods for studying the structural, electronic and spectroscopic properties of the Re(I)/Tc(I)complexed with new pyridyltriazole-based ligands.³

The calculations were performed using the GAUSSIAN-09 program package. The geometries of all complexes were fully optimized with the DFT/B3LYP method for the singlet states. Vibrational harmonic frequency analysis of the optimized geometries was utilized to ensure that there were true local minima having no imaginary frequencies. The spin-allowed singlet-singlet electronic transitions of three complexes have been calculated with time-dependent DFT (TD-DFT), and the UV-Vis spectra are discussed based on the theoretical calculations.

Keywords: Rhenium, Technetium, DFT calculations

References:

- [1] A. Leonidova, G. Gasser, ACS. Chem. Biol, **2014**, 9, 2180
- [2] D. Can, ..., and R. Alberto, Angew. Chem. Int. Ed. **2012**, 51, 3354
- [3] M. J. Frisch, ..., and D. J. Fox, GAUSSIAN 09 (Revision A.02), Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

Etude théorique pour la prédiction de temps de rétention d'un ensemble de polluants organiques persistants in silico.

Khadidja Amirat¹, Nadia Ziani², Fatiha Mebarki³, Djelloul Messadi^{4*}

*Laboratoire de sécurité alimentaire et environnementale, université de Badji Mokhtar, , BP 12, 23000, Annaba, -
Algerie-*

khadidja_amirat@yahoo.fr

Abstract :

Les polluants organiques persistants (POPs) sont un groupe de molécules organiques, dont la structure de base repose sur une combinaison d'atomes de carbone et d'hydrogène. Sa dissémination dans l'environnement est problématique du fait de propriétés particulières : Faible biodégradabilité (persistance), effets toxiques à très faible dose, capacité à s'accumuler dans la chaîne alimentaire (bioaccumulation). Ce caractère persistant couplé à une certaine volatilité explique qu'on puisse retrouver des POPs très loin de leurs lieux d'émission, transportés par les courants marins ou atmosphériques. Cela fait de l'élimination des POP un enjeu planétaire[1]. L'objectif de ce travail est de développer un modèle de QSRR robuste qui pourrait prédire les temps de rétention pour un ensemble de polluants organiques persistants, en utilisant les descripteurs moléculaires théoriques et de rechercher les caractéristiques importantes liées aux valeurs des temps de rétention. Une relation structure / temps de rétention a été recherchée pour un ensemble de polluants organiques persistants tout en favorisant une approche hybride algorithme génétique / régression linéaire multiple, les paramètres structurels étant calculés avec les logiciels Spartan [2] et DRAGON [3]. Parmi une centaine de simples modèles à une variable explicative acquis, nous avons choisi celui qui présente les meilleures valeurs du paramètre de prédiction (Q^2) et du coefficient de détermination (R^2). La fiabilité du modèle proposé a également été illustrée en utilisant diverses techniques d'évaluation: leave-many out, validation croisée, test de randomisation, et la validation par l'ensemble de test.

$$\log tr = 0,851 \pm (0,03575) + (0,090) \pm (0,01256) nR06 + 0,0803 \pm (0,006751) AT57v + 0,180 \pm (0,01325) EEig05d$$
$$n_{tot} = 40 ; S = 0.0317; Q^2(\%) = 92.54; R^2(\%) = 93.8; F = 136.23; P = 0,000.$$

Mots-clés: Structure / temps de rétention ; Pops, logiciels; descripteurs moléculaires.

Références

- [1] www.greenpeace.ch. Les polluants organiques persistants. PDF
- [2] Spartan software (2011), "Release for Window, Macintosh and Linux version 1.1.0", Molecular Modeling System, Pittsburg, CA.
- [3] Todeschini, R., Consonni, V. and Pavan, M. (2006), "DRAGON Software for the Calculation of Molecular Descriptors", Release 5.4 for Windows, Talete s.r.l., Milano.

Structures des complexes d'inclusion du 4-AminoChalcone et le β CD

Samia Amirat^a, Fatiha Madi, Amel Zaboub, Rachid Merdes, Abd El Hak Gheid

a) *Chemistry laboratory applied, Department of sciences of the matter, University May 8
45 B.P. 401 Guelma 24000 Algeria
E-mail: asamiachimie2000@yahoo.fr*

Résumé :

Les dérivés de chalcone possèdent de nombreuses activités biologiques⁽¹⁾ comme antibactériens⁽²⁾, antituberculose⁽³⁾, antifongique⁽⁴⁾, antimalarique⁽⁵⁾, et propriétés anticancéreuses⁽⁶⁾.

Dans le but d'améliorer les propriétés pharmacologiques et pharmacocinétique du 4-Amino Chalcone, nous avons fait une simulation moléculaire de l'interaction de ce composé avec la β -cyclodextrine (fig. 1).

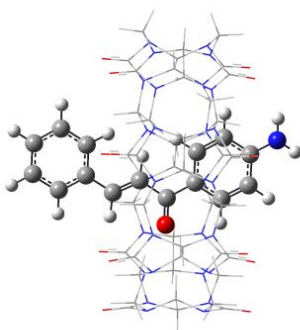


Fig. 1

Références :

- 1) Dimmock, J.R., Elias, D.W., Beazely, M.A., and Kandepu, N.M. (1999) *Curr. Med. Chem.*, 6, p. 1125.
- 2) Anand, N., Singh, P., Sharma, A., Tiwari, S., Singh, V., Singh, D.K., Srivastava, K.K., Singh, B.N., and Tripathi, R.P. (2012) *Bioorg. Med. Chem.*, 20(17), pp. 5150-5163.
- 3) Lin, Y., Zhou, Y., Flavin, M., Zhou, L., Niea, W., and Chen, F. (2002) *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 10, pp. 2795-2802.
- 4) Lahtchev, K.L., Batovska, D.I., Parushev, P., Ubiyovk, V.M., and Sibirny, A.A. (2008) *Eur. J. Med. Chem.*, 43, pp. 2220-2228.
- 5) Agarwal, A., Srivastava, K., Puri, S.K., and Chauhan, P.M.S. (2005) *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 15, pp. 3133-3136.

6) Roman, B.I., Heugebaert, T.S., Bracke, M.E., and Stevens, C.V. (2013) Curr. Med. Chem., 20, pp. 186-221.

Optimisation de flambage d'une plaque stratifiée par algorithme génétique

F. BELKHEIR¹, M. SAFER², L. BOUZID²

^{1,2}*LPCCMCB (laboratoire de physique des Comportement et caractérisations des matériaux composites pour le biomédicale.) USTOMB, Oran, Algérie,
bel.tiha@gmail.com*

Résumé :

Les structures composites stratifiées qui sont largement utilisées de nos jours, deviennent instables lorsqu'elles sont sujettes à des charges de nature mécanique ou thermique et de flamme dans la zone élastique. Par conséquent, le flambement a une grande importance lors de la conception de ce type de structure. Dans ce travail, nous avons étudié le phénomène du flambement qui a été consacré à l'étude de l'optimisation d'un matériau composite stratifié par l'utilisation d'une méthode de traitement de données basée sur une théorie mathématique qui utilise les statistiques stochastiques, c'est la théorie de la génétique Algorithmes (GA). L'objectif de ce travail est de maximiser la rigidité de la plaque laminée en maximisant la charge critique de flambage selon les orientations des plis.

Mot-clé : Matériau composite, optimisation, stratifié, algorithme génétique

Référence :

[1] Book «MATERIAUX COMPOSITES, Comportement mécanique et nalyse des structures ». J-M. BERTHELOT.

[2] DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE spécialité : Génie Mécanique, Mécanique des matériaux « Stratégies de calcul pour l'optimisation multiobjectif des structures composites. », soutenue par François-Xavier IRISARRI, Le 23 Janvier 2009

[3] « 2006 » Optimisation multicritère de stratifié par algorithmes génétiques Laurent-Blanchard ; Nathalie-Blaszka ; Stéphane-Lantéri ; Jean-Antoine Désidéri (Alcatel Space Industries ; Institut National de recherche en Informatique et en Automatique).

Optimization of chitosan using response surface methodology (RSM)

Bachir. Ben Seghir^{1*}, M. H. Benhamza², Omar. Khelifi³

¹²³Laboratory of Industrials Analysis and Materials Engineering, Department of Process Engineering, Faculty of Sciences and Technology, University 8 May 1945 Guelma, BP 401 Guelma 24000, Algeria.

bbachir39@gmail.com*

Abstract:

Chitin and its N-deacetylated derivative chitosan are identified as multipurpose biopolymers for a broad range of applications in medicine, food and bioengineering industries. In this study, chitosan is extracted from shrimp *Parapenaeus longirostris* shells by chemical processes involving demineralization, deproteinization, decolorization and deacetylation. Several factors can influence chitin deacetylation process and different quality of chitosan can be obtained. Hence, this paper focuses on the chitin deacetylation process optimization. The optimized conditions by considering various significant process variables have been investigated using a response surface methodology (RSM) with the ANOVA regression equation. The results give a determination coefficient $R^2 = 0.9853$, indicating the precision of the predicted model, and the optimized conditions are resulting in a highest chitosan Degree of Deacetylation DD% equals to 98%. The validity of the optimum conditions is confirmed experimentally and the obtained DD% values correlated well to the predicted ones. The chitosan prepared with optimum conditions is characterized by means of a spectral analysis infrared (FTIR), Differential Scanning Calorimetry (DSC), X-ray spectroscopy (DRX) and Scanning electron microscopy (SEM) and the results confirm the purity of the product. Thus results from this study establish that RSM is a valuable statistical method for investigating the effect of chitosan preparation. And therefore, the introduction of the most important controlled parameters (temperature T, NaOH concentration C, reaction time t and solid to solvent ratio r) in wider and extended interval ranges give better results for chitin deacetylation process.

Keywords: Chitosan, Shrimp, Degree Deacetylation, Response Surface.

In Silico Modeling of Substitution-Induced Effect and Structure Property/Activity Relationship Profile of 1, 3, 4-Oxadiazole Derivatives

Imane Benbrahim

*Group of Computational and pharmaceutical Chemistry, LMCE Laboratory, University of Biskra, BP 145
Biskra 07000, Algeria; e-mail: benbrahimimane@gmail.com*

Abstract:

Our minimalist design format presents opportunities to reveal the soft and hard characters (HSAB theory) [1] of 1, 3, 4-oxadiazole as a function of the various donating and withdrawing substituent groups using the FMOs energies and the density-based descriptors. Where the quantum mechanical geometry optimization were performed using B3LYP function of density functional theory. With regard to the 2, 5-disubstituted-1, 3, 4-oxadiazoles anti-tuberculosis series, the lipophilicity balance and ionization state seem to play an important role to reveal their pharmacokinetic and pharmacodynamics behavior. The multi-parameter optimization (MPO) [2] process of these anti-tuberculosis compounds was expressed by various approaches such as Per cent Efficiency Index (PEI), [3] Group Efficiency (GE) analysis, Lipinski, [4] Veber rules... to guide the exploration of this new anti-tuberculosis agent with a high probability of achieving the required property/activity profile.

Keywords: 1, 3, 4-oxadiazole, density-based descriptors, PEI and GE analysis, Log P and Log D profile, SAR/SPR.

References:

- [1] R. G. Pearson, J. Amer. Chem. Soc., (1963), 85, 3533.
- [2] M. D. Segall, J. Curr. Pharm. Design., (2012), 18, 1292.
- [3] C. Abad-Zapatero and J. T. Metz, J. Drug. Disc. Today., (2005), 10, 464.
- [4] C. A. Lipinski, F. Lombardo, B. W. Dominy and P. J. Feeney, Adv. Drug. Delivery. Reviews., (2001), 46, 3.

Design, synthesis and anticancer evaluation by molecular docking of novel sulfonamide derivatives containing oxazolidinone moiety.

Besma BENDIF^a, Nadjia BENSOUILAH^b, Nedjoudia CHEGHIB^a Mohamed ABDAOUI^a

^a LCA Laboratory, University 8 MAI Guelma, BP 401, 24000 Guelma, Algeria.

e-mail: Besma.bendif@gmail.com & abdaoui_med@yahoo.fr

^b LCAO Laboratory, USTHB, BP 32, El-Alia, 16111 Bab-Ezzouar, Algeria

Abstract:

Sulfonamides possess many types of biological activities and representatives of this class of pharmacological agents are widely used in clinic as antibacterial, hypoglycemic, diuretic, anti-carbonic anhydrase [1] and antithyroid. Recently, a host of structurally novel sulfonamide derivatives have been reported to show substantial biological activities and have recently been reported to show substantial antitumor activity in vitro and/or in vivo. Sulfonamides and their derivatives are well-known inhibitors of carbonic anhydrase [2].

Recent evidences suggest that cancer treatment based on combination of cytostatic and conventional chemostatic therapeutics, which are usually cytotoxic, can provide an improved curative option. On the sequence of our previous work on Sulfonamide derivatives, we have designed and developed novel Sulfa Drug analogues, containing an oxazolidinone moiety.

For the sake of comparison the CA inhibition activity of the parent sulfa drugs was evaluated. Molecular docking studies of the synthesized compound were carried out to highlight the binding site interactions and showed interesting cytotoxic activities and affinity of the hybrid compound compared to a reference drug at the isozyme active site [3]. ADME properties were calculated too to evaluate drug likeness of the compound [4].

Key words: Sulfanilamide, Carbonic anhydrase-II, Molecular Docking, Lipinsky,

References :

- [1] C.T. Supuran, A. Scozzafava, *Exp. Opin. Ther. Patents* 10 (2000) 575–600.
- [2] B. C. Tripp, K. Smith, and J. G. Ferry, “Carbonic anhydrase: new insights for an ancient enzyme,” *The Journal of Biological Chemistry*, vol. 276, no. 52, pp. 48615–48618, 2001.
- [3] A. Thiry, M. Ledecq, A. Cecchi, J.M. Dogne, J. Wouters, C.T. Supuran, B. Masereel, *J. Med. Chem.* 49 (2006) 2743–2749.
- [4] Lipinski, C. A., Drug-like properties and the causes of poor solubility and poor permeability, *J. Pharmacol. Toxicol. Methods* 2000, 44 (1), 235-249.

Charge transfer complexes of substituted imines with π -electron acceptors: TD-DFT calculations and NBO analysis.

Nadjia bensouilah^{1,2}, Besma bendif¹, Mohamed Abdaoui¹

¹Laboratory of applied chemistry (LAC), University of May 8th, 1945, BP 401, 24000 Guelma, Algeria

² laboratory of applied organic chemistry , faculty of chemistry (LAOC), University of Sciences and Technology Houari Boumediene, USTHB, BP 32, El-Alia, 16111 Bab-Ezzouar, Algiers, Algeria

Abstract:

The formation of the intermolecular charge transfer complexes CTC between donors, Substitued imines (shiff bases) and acceptors such as the bromanil, the chloranil and the 2,3 - dichloro-5,6-dicyano benzoquenone has been experimentally confirmed in liquid as well as in solid state at room temperature.

Spectral characteristics study of six complexes has been performed by density functional theory (DFT) and time dependent DFT (TD-DFT) calculations at CAM-B3LYP/6-31G (d) level of theory using PCM solvation model. Stability of the optimized structures arises from hyperconjugative interactions, charge delocalization and hydrogen bonding has been analyzed using natural bond orbital (NBO) analysis. The theoretical calculations were compared with the experimental data and the satisfactory results were obtained at this fine.

Key words: CTC, π -electron acceptors, shiff base, NBO, TD-DFT.

References:

- [1] M.Abdaoui, D.Messadi, G.Dewinter. Bull.Soc.Chim.Belg.1995, Vol.104, 06.
- [2] M. Dulski , M. Kempa, P. Kozub, J. Wojcik, M. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2013, 104, 315.
- [3] I.M. Khan, A. Ahmad. Journal of Molecular Structure, 2010, 975, 381.

Quantification des interactions intermoléculaires dans les complexes d'inclusion

Belgacem Bezzina ^{a,b,*}, Djameleddine Khatmi ^{a,c}, Humbel Stephane ^c and Carisson Yanick ^c

^aLaboratory of Computational Chemistry and Nanostructures-LCCN, University of 08 May 1945 Guelma, Algeria

^bResearch Centre In Industrial Technology (CRTI), P.O.BOX 64, Cheraga 16014, Algiers, Algeria

^cAix-Marseille Université, Centrale Marseille CNRS, iSm2 UMR 7313, 13397, Marseille (France).

*e-mail :bezzinabelgacem@univ-guelma.dz

Résumé :

La force des interactions intermoléculaires dans le complexe d'inclusion de l'aspirine/ β -cyclodextrine est quantifiée à l'aide de la théorie des atomes dans les molécules de Bader (AIM) [1] et par la méthode NBO [2] en utilisant la fonctionnelle hybride B3LYP [3,4] et la base ccpv-dz. L'analyse QAIM révèle l'existence de trois liaisons d'hydrogène O-H...O modérées dans la face primaire de la B-cyclodextrine et de plusieurs interactions intermoléculaires faibles C-H...O dans le complexe en général. Ces résultats sont en accord avec ceux obtenus par la méthode NBO, où en deux cas, B-cd joue un rôle de donneur de protons, et dans un cas un rôle d'accepteur. Ces interactions contribuent significativement à leur stabilité.

Mots Clés: Complexe d'inclusion, QAIM, analyse NBO, liaisons d'hydrogène.

Référence :

- [1] R.F.W Bader, Chem. Rev. 1991, 91, 893
- [2] A.E. Reed,L.A. Curtiss, F. Weinhold, Chem. Rev. 1988, 88, 899.
- [3] A.D. Becke, J. Chem. Phys. 1993, 98 ,5648.
- [4] C. Lee, W. Yang, R.G. Parr, Phys. Rev. B, 1988,37, 785.

Modèle prédictif de la solubilité aqueuse d'un ensemble de polychlorobiphényles (PCB) en utilisant un ensemble optimal de descripteurs moléculaires théoriques

N. Bouarra^{1,3}, A. Boudjema², D. Messadi^{*3}

1. Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyses Physico-Chimiques (CRAPC), BP 384, Siège ex-Pasna Zone Industrielle, Bou-Ismaïl CP 42004, Tipaza, Algérie, e-mail : nabil.bouarra@univ-annaba.org

2. Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyses Physico-Chimiques (CRAPC), BP 384, Siège ex-Pasna Zone Industrielle, Bou-Ismaïl CP 42004, Tipaza, Algérie, e-mail : amel_boudjema@yahoo.fr

3. Laboratoire de sécurité environnementale et alimentaire, Université Badji Mokhtar-Annaba B.P.12, Annaba, 23000 Algeria, e-mail : d.messadi@yahoo.fr

Résumé

Avec l'avènement du calcul peu coûteux et rapide, il y a eu une croissance remarquable de l'intérêt pour les relations quantitatives structure-propriété (QSPR), qui utilisent des méthodes d'analyses mathématiques multidimensionnelles afin de modéliser des propriétés pertinentes en fonction des paramètres de la structure moléculaire (appelés descripteurs). Dans ce travail une relation quantitative structure-propriété a été effectuée pour la prédiction de la solubilité aqueuse d'une série des PCB. L'ensemble des 123 PCB a été divisé en un ensemble de calibration pour le développement du modèle et un ensemble de prédiction pour la validation externe du modèle, en utilisant la nouvelle version du logiciel QSARINS (V2.2). Le modèle complet avec deux descripteurs moléculaires a été mis au point et les valeurs élevées des paramètres statistiques prouvent la très bonne qualité du modèle.

Mot clés: Chimométrie, modélisation moléculaire, optimisation, solubilité aqueuse, QSPR, validation externe.

Références :

- [1] M.L. Diamond, L. Melymuk, S.A. Csiszar, M. Robson, Environ. Sci. Technol, 2010, 44, 2777.
- [2] P. Gramatica, S. Cassani, P. P. Roy, S. Kovarich, C.W. Yap, and E. Papa. Mol. Inf, 2012, 31, 817.
- [3] G.S. Patil. Chemosphere, 1991. 22, 723.

MODELISATION DE NOUVELLES STRUCTURES INHIBITRICES ANALOGUES DE LA L-ARGININE DE L'OXYDE NITRIQUE SYNTHASE NEURONALE (nNOS) :

F. Bouchair, L. Bencheraiet

Laboratoire de chimie des matériaux, Département de chimie, Faculté des Sciences.

Université Mentouri, Constantine.

farah_sofi@yahoo.fr

sarhou@yahoo.fr

Résumé :

La modélisation des interactions protéine–ligand et le docking moléculaire représentent des techniques performantes dans le domaine de la simulation [1]. L'étude « *in silico* » par le biais du Docking moléculaire vise à prédire la structure 3D d'un complexe formé à partir de molécules isolées, évaluer le mode de fixation et les différentes interactions établies entre les deux entités [2,3].

Pour réaliser notre travail, nous nous sommes basés sur le concept de bioisostérisme pour proposer de nouvelles architectures moléculaires déduites de structures existantes. Les composés ainsi conçus interagissent au niveau du site catalytique de la nNOS en formant des complexes plus au moins stables. Leur IC₅₀ a été déterminé théoriquement.

Mots clé : Analogues d'arginine, nNOS, Docking moléculaire, Arguslab, Bioisostère.

Références:

[1]: Pawson T., Nash P., 2000. - Protein-protein interactions define specificity in signal transduction. *Genes Dev.* 14(9):1027-47.

[2] Wilfred F. van Gunsteren et Herman J. C. Berendsen, *Angew.* 1990. - "Computer Simulation of Molecular Dynamics: Methodology, Applications, and Perspectives in Chemistry" International Edition England. *Chem.*, 29, 992-1023

[3] : Warren G.L., Andrews C.W., Capelli A.M., Clarke B., Lalonde J., Lambert M., Lindvall M., Nevins N., Semus S.F., Senger S., Tedesco G., Wall I.D., Woolven J.M., Peishoff C.E., Head M.S., 2006.- A Critical Assessment of Docking Programs and Scoring Functions, *J. Med. Chem.*, 49:5912-5931.

Investigation théorique du complexe d'inclusion : terpinéole β-cyclodextrine.

Bouchemella houria⁽¹⁾, Madi Fatiha⁽²⁾, nouar leila⁽²⁾

⁽¹⁾ *laboratoire de Chimie computationnelle et nanostructures (LCCN)*

⁽²⁾ *laboratoire de Chimie computationnelle et nanostructures (LCCN)*

E-mail : bouchemella_h@hotmail.it

Résumé :

L'application des différentes méthodes de modélisation moléculaire telle que : PM3, ONIOM2 et B3LYP/6-311G⁺⁺ a été effectué sur le complexe d'inclusion (stœchiométrie 1 :1) formé entre la β-cyclodextrine et la terpinéole.

Pour cela, un processus d'inclusion a été déterminé par la méthode semi empirique PM3 pour localiser le minimum énergétique lors de l'approche de la Terpinéole. vers la β-cyclodextrine selon deux directions différentes.

Après la localisation des deux minimums qui sont soumises à différentes optimisations par les méthodes B3LYP/6-311G⁺⁺ B3LYP/6-31(d,p), les paramètres géométriques ainsi que les énergies des orbitales frontières HOMO et LUMO ont été calculés.

En fin l'analyse NBO montre que les différentes interactions intermoléculaires telles que: les interactions de VDW, la liaison Hydrogène sont responsable de la stabilité du complexe formé.

Keyword: B-CD, PM3, B3LYP/6-311G, NBO

Références:

- [1] Madi, F., Nouar Leila, L., Khatmi, D.E.: Theoretical approach in the study of the inclusion processes of sulconazole with β-cyclodextrin. J. Mol. Liq.,(2010) ,154,1.
- [2] Madi Fatiha, Bounefla Faiza, Kirati Ichraf, Nouar Leila, Khatmi DjamelEddine, TD-DFT calculations of visible spectra and structural studies of carbendazim inclusion complex with cucurbit[7]uril, J. Taiwan Inst. Chem. Eng. (2015),50, 37-42

Host-guest inclusion complex between β -cyclodextrin and chrysin: A theoretical approach

Bouhadiba Abdelaziz^a, Rahim Mohamed^a, Djilani Imene^a, Nouar Leila^a

bouhadibaaziz@yahoo.fr

^a *Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, Department of Material Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics and Material Sciences, University of 08 Mai 1945, Guelma, Algeria*

Abstract:

The structural aspects for the complexation of chrysin / β -cyclodextrin were explored by using PM6, density function theory B3LYP/6-31G(d), M05-2X/6-31G(d), MPW1PW91/6-31G (d), methods and several combinations of ONIOM2 hybrid calculations. Calculations were performed upon the inclusion complexation of β -cyclodextrin (β -CD) with Chrysin. The obtained results with PM6 method clearly indicate that the formed complexes are energetically favored, the complex of Chrysin / β -CD in A model is significantly more favorable than the B model. Finally, natural bonding orbital (NBO) analysis was performed based on ONIOM2 optimized complexes to quantify the donor–acceptor interactions between chrysin and β -cyclodextrin.

Keywords: β -CD, chrysin, PM36, ONIOM2, NBO.

Référence:

- [1] A. Bouhadiba, L. Leila, S. Haiahem, I. Djilani, M. Madi, D.E. Khatmi, *J Incl Phenom Macrocycl Chem* (2013) 77:455–462.
- [2] G. Crini, *Chem. Rev.* 114 (2014) 10940-10975.
- [3] H.Y. Chen, H.B. Ji, *AIChE J.* 56 (2010) 466.

Modeling of silicon nanocrystal formation in a SiN_x matrix using Monte Carlo methods

Adil Bouhadiche

Centre de Développement des Technologies Avancées, Université de Sétif1 Campus El-Bez, 19000 Sétif, Algeria,
a.bouhadiche@gmail.com

Abstract:

Due to their specific properties, silicon nanocrystals have recently attracted much interest for their use in silicon-based devices. However, controlling the formation of these nanocrystals in high matrices remains incomplete. The simulation of the deposit step is therefore necessary for designing the material with the required properties. In this context, this work consists of modeling the formation of silicon nanocrystals by Monte Carlo methods. For this, in order to deduct the optimum deposition conditions allowing the obtain of a high density of amorphous silicon clusters and a controlled size, the deposition process of nitrogen doped silicon thin films obtained by a low-pressure chemical vapor deposition technique with a mixture of disilane and ammonia is simulated by using the kinetic Monte Carlo method. Simulation results describe well the different stages of the silicon nanocrystal formation.

Keywords: nitrogen doped silicon, kinetic Monte Carlo, disilane, ammonia, silicon clusters.

References:

- [1] A. Bouhadiche, H. Bouridah, N. Boutaoui, *Materials Science in Semiconductor Processing*, **2014**, 26, 555.
- [2] J. Huang, G. Orkoulas, P.D. Christofides, *Chemical Engineering Science*, **2013**, 94, 44.
- [3] P. Temple-Boyer, L. Jalabert, E. Couderc, E. Scheid, P. Fadel, B. Rousset, *Thin Solid Films*, **2002**, 414, 13

Modélisation et simulation numérique du reformage catalytique du n-hexane sur un catalyseur bifonctionnel en régime transitoire.

BOUHANK Antar^{1,2}, ***BENCHEIKH Lahcene***²

¹*Research Center in Industrial Technologies (CRTI)*

P.O.Box 64, Cheraga 16014 Algiers, Algeria

E-mail : a.bouhank@crti.dz

²*Laboratoire de Génie des Procédés Chimiques (LGPC), Faculté de Technologie*

Université Ferhat Abbas SETIF 1. Algeria

E-mail : bencheikh_lahcene@yahoo.com

Résumé :

Ce travail est une tentative de modéliser et simuler mathématiquement le comportement, en régime transitoire, d'un réacteur catalytique isotherme à lit fixe avec résistance au transfert et dispersion axiale.

Le modèle est appliqué à la réaction de reformage catalytique du n-hexane sur un catalyseur bi-fonctionnel (métal - acide). Cette réaction est d'une grande importance à l'échelle industrielle pour avoir des essences de haute qualité, ces calculs ont été faits en régime transitoire.

L'objectif du travail était de suivre l'influence sur l'installation du régime stationnaire d'un certain nombre de paramètres à savoir : temps de séjour, concentration moyenne des sites actifs, la position des particules catalytique dans le lit. Les résultats obtenus nous ont éclairés sur le mécanisme d'installation du régime stationnaire dans le réacteur.

Mots clés: Reformage catalytique, réacteur à lit fixe, catalyseur bifonctionnel, résistance au transfert, régime transitoire.

Référence :

- [1] R. Mariscal, J. L. G. Fierro, J. C. Yori, J.M. Parera, J. M. Grau, *Applied Catalysis*, **2007**, 327, 123.
- [2] R. Watanabe, T Suzuki, T. Okuhara, *Catalysis Today*, **2001**, 66, 123.
- [3] M. Morbidelli, A. Servida, S. Carra, A. Varma, *Industrial & engineering chemistry research*, **1987**, 26, 167.
- [4] R. A. Dario, R. Ardilese, *Collect Czech. Chem. Commun*, **1986**, 51,2509.

Modélisation de la cinétique et de l'isotherme d'adsorption d'une substance médicamenteuse sur une poudre argileuse

N. Boukhalfa¹, N. Djebri^{1,2}, M. Boutahala¹

Laboratoire de génie des procédés chimiques (L.G.P.C), université Ferhat Abbas Sétif 1, Algérie,

nadouchette2011@hotmail.fr, mboutahala@yahoo.fr

Laboratoire de Matériaux et Systèmes Electroniques (LMSE), Université Bachir El Ibrahimi, Bordj Bou Arreridj, Algérie, nessmadjebri@yahoo.fr

Résumé :

Cette étude établit l'élimination de diclofénac d'une eau usée par adsorption sur une argile anionique. La détermination de la quantité maximale adsorbée au niveau laboratoire peut prendre du temps et d'énergie, ceux qui rendre le procédé plus coûteux. Aussi, Il est très important de prédire la vitesse au quel le polluant est éliminé.

Toutes ces informations pourront être extraites à partir deux modèles d'équilibre décrivant le processus d'adsorption: modèle de Langmuir et modèle de Freundlich. Pour la cinétique, deux modèles ont été appliqués : Modèle pseudo-premier-ordre et modèle pseudo-second-ordre. Les résultats de la modélisation de l'isotherme ont montré que la capacité d'adsorption maximale de la monocouche de l'adsorbant pour le Diclofénac était 457 mg/g à 25°C, et quel'adsorption suit une cinétique de pseudo-second-ordre.

Mots clés : Modélisation, isotherme, adsorption, cinétique.

Quantum-chemical study of nickel complexes with benzaldehyde thiosemicarbazone derivatives ligands

W. Boussebbat¹, N. Ouddai²

Laboratoire de chimie des matériaux et des vivants : Activité, Réactivité, Université Hadj Lakhdar, BATNA1-ALGERIE, boussebbatw@yahoo.fr

Laboratoire de chimie des matériaux et des vivants : Activité, Réactivité, Université Hadj Lakhdar, BATNA1-ALGERIE, ouddai_nadia@yahoo.fr

Abstract:

Thiosemicarbazone (TSC), as well as their metal complexes, have been the subject of great interest for several years due to their diverse chemical and structural characteristics and the wide spectrum of their biological activity [1]. Our aim using DFT [2] calculations is to study the nature of the bond between bidentate thiosemicarbazone ligands and Ni atom in these three complexes: $[Ni(BTSC)_2]$, $[Ni(Ph-BTSC)_2]$ and $[Ni(Ph-CIBTSC)_2]$. DFT calculations have been carried out on the distorted square planar Nickel complexes with thiosemicarbazone derivatives in order to rationalize the bond nature between the Ni metal and the N, S donor ligand. The presence of two molecular orbitals with bonding character between Ni-S, and Ni-N atoms in the occupied one and antibonding character in the virtual one reveals the covalent character in Ni-L bonding.

Key words: thiosemicarbazone, nickel complexes.

References:

- [1] S. Anitha, J. Karthikeyan, A.N. Shetty, *Indian Journal of Chemistry*, **2013**, 52A, 45.
- [2] L. H. Thomas, *Cambridge Phil. Soc*, **1927**, 23, 713.

Etude Computationnelle Et Spectrophotométrique du Complexe d'Inclusion Du N-[(4-sulfonamidophenyl) ethyl]-5-(1,2-dithiolan-3-yl)pentanamide Avec la B-Cyclodextrine

Habiba BOUZIT^{1,2}, Maamar STITI¹, Mohamed ABDAOUI¹

¹ *Laboratoire de Chimie Appliquée. Université 8 Mai 1945, BP 401, 24000 Guelma, Algérie.*

² *Research Centre in Analytical Chemistry and Physics (CRAPC), BP 248, Algiers RP, Algiers 16004, Algeria*
E-mail: bouzit.habiba@gmail.com

Résumé :

Une étude de la formation du complexe d'inclusion de N-[(4-Sulfonamidophenyl) ethyl]-5-(1,2-dithiolan-3-yl) pentanamide (SULPA) avec la β -cyclodextrine (β -CD) en solution et à l'état solide a été réalisée par Spectrophotométrie UV-Visible, et IR.

Etant donné l'intérêt récent attaché à la modélisation moléculaire des complexes d'inclusion avec les cyclodextrines, nous avons fait une simulation moléculaire de l'interaction de cette molécule biologiquement active avec la β -cyclodextrine et ce dans le but de trouver la structure la plus favorable du complexe obtenu dans le vide et en solution. et de déterminer à la fois la géométrie et certains paramètres caractéristiques de ces complexes. Une analyse NBO, nous a permis de déterminer les conformations énergétiquement les plus favorables et les paramètres thermodynamiques caractéristiques de ces systèmes moléculaires.

Mots-Clés : Arylsulfonamide, Anhydrase Carbonique IX, β -cyclodextrine, Modélisation moléculaire, PM3, DFT, ONIOM2, NBO.

Références :

- [1] H. Maeda, T. Onodera, H. Nakayama, J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem. (2010) **689**, 201–206.
- [2] S.J. Zhang, Q.F. Ge, D.W. Guo, W.X. Hu, H.Z. Liu, Bioorg. Med. Chem. Lett. (2010) **20**, 3078–3083
- [3] A.D. Bani-Yaseen, A. Mo'ala, Spectrochim. Acta. A. (2014) **131**, 424–431.

Synthesis, molecular structure and DFT computational studies on 6-(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxybenzylideneamino)benzo[d]thiazol-2(3H)-one and its 3-methyl-substutued derivative

Hanane Chabane^a, Abdelmalek Khorief Nacereddine^{a,b}, Yasmina Adjeroud^a, Messaoud Liacha^a

^aLaboratoire de Synthèse et Biocatalyse Organique-LSBO, Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université Badji-Mokhtar, PB 12, Annaba 23000, Algérie

^bEcole Normale Supérieure d'Enseignement Technologique de Skikda, Azzaba, Skikda, Algérie

Abstract:

Among the most interesting structural features of Schiff bases with an *ortho*-hydroxy substituent, the presence of intramolecular hydrogen bonding between the C=N nitrogen and OH hydrogen atoms (N···H–O and O···H–N) [1], and especially tautomerism between the enol-imine and keto-enamine forms, which determine the properties of diverse molecular systems and play an important role in many biochemical mechanisms [2].

In the present work, we are interested to the synthesis of two new *o*-hydroxy Schiff bases molecules derived from 2(3H)-benzothiazolone. We report for the first time the theoretical calculations and the thermodynamic properties of the optimized structures obtained theoretically using the 6-31G (d, p) basis set for DFT level. The HOMO and LUMO analyses have been used to elucidate information regarding charge transfer within the title molecules.

Keywords: 2(3H)-benzothiazolone, *o*-hydroxy Schiff bases, DFT, thermodynamic properties.

References:

- [1] L. Sobczyk, S. J. Grabowski, T. M. Krygowski, *Chem. Rev.*, **2005**, *105*, 3513.
- [2] C. A. Szady, E. Grech, Z. Rozwadowski, T. Dziembowska, W. Schilf, B. Kamienski, *J. Mol. Struct.*, **2001**, *565*, 125.

Evaluation des propriétés anticancéreuses de 5-((allyloxyamino) methyl) quinolin-8-ol et 5-((phenylamino) methyl) quinolin-8-ol synthétisées par Docking Moléculaire.

Nedjoua CHEGHIB^a, Besma BENDIF^a, Mohamed ABDAOUI^a, Jean-Louis KRAUS^b

^aLaboratoire de Chimie Appliquée ; département de chimie ; Université 08 Mai 1945- BP401 – Guelma Algérie Tel/Fax: (213)037 20 97 21, e-mail: abdaoui_med@yahoo.fr ou nedjoua11_c@yahoo.fr

^bLaboratoire de Chimie Biomoléculaire, CNRS, Marseille, France

Résumé :

Le cancer est considéré comme une maladie antique qui a très bien su marquer sa présence dans nos sociétés modernes du fait de l'allongement de nos espérances de vie. Ainsi, la lutte contre cette maladie dévastatrice est devenue une priorité absolue à cause du nombre de mortalité et de l'augmentation immodérée du nombre de cancers parmi la population. La nécessité de l'évolutions en matière de traitement ainsi que le développement continu des différents traitements tels que la chirurgie, la radiothérapie et la chimiothérapie et le bon diagnostic contribuent directement à diminuer de manière remarquable la mortalité de la majorité de ces cancers.

Notre rôle au sein de cette thématique a consisté à mettre en place les fondations d'un projet de recherche à savoir la conception, la synthèse, la validation biologique et l'étude du mécanisme d'action de nouvelles molécules thérapeutiques vis-à-vis des cancers en général et des glioblastomes¹ en particulier. Le motif (*N*-(5-méthyl)-quinoléin-8-ol) amine *N*-substitué^{2,3} a servi de pharmacophore de base pour l'élaboration de nouveaux types d'agents anticancéreux et motif de référence aussi dans le but de valider les possibilités de fixation et d'interactions de ses deux dérivés sur les récepteur PPAR par une simulation via le Docking Moléculaire.

Mots clés : 8-hydroxyquinoline, Pharmacophore, Activité antiproliférative, Docking.

Référence:

- [1]. Oien, N. L. et al, Broad-spectrum antiherpes activities of 4-hydroxyquinoline carboxamides, a novel class of herpesvirus polymerase inhibitors, *Antimicrobial Agents and Chemotherapy* 2002, 46 (3), 724-730.
- [2]. Yu'ning Song, Hao Xu, Wenmin Chen, Peng Zhan, Xinyong Liu, 8-Hydroxyquinoline: a privileged structure with a broad-ranging pharmacological potential, *Med.Chem.Commun*, 10(1039).
- [3]. Sébastien, M.; Younes, L.; Vincent, M.; Magali, B. R.; Christophe, B.; Aline, M.; Delphine, L.T. ; Jacques, D. ; Robert, K. ; Marie, H. ; David, C. ; Thierry, C. ; Geneviève, A. and Jean-Louis, K., Structure-Activity relationships and mechanism of action of antitumor bis 8-hydroxyquinoline substituted benzyl amines, *European journal of medicinal chemistry* 2010, 45, 623-638.
- [4]. Lipinski, C. A., Drug-like properties and the causes of poor solubility and poor permeability, *J. Pharmacol. Toxicol. Methods* 2000, 44 (1), 235-249.

Computational study of inclusion complexes in vacuum and in water: Charge transfer, electronic transitions and NBO analysis

Cheriet Mouna^{a*}, Nouar Leila^b, Madi Fatiha^b, Himri Safia^b

a- Laboratory of chemistry applied, Department of material sciences

b- Laboratory of computational chemistry and nanostructures, Department of material sciences

**Email*: mouna.cheriet@gmail.com

Abstract:

The interactions between threonin (THR) and cucurbit[7]uril (CB[7]) have been analyzed employing PM6, ONIOM2 and DFT methods in vacuum and in water. Complexation, deformation, HOMO and LUMO energies were determined and discussed. Finally, TD-DFT of visible spectra and NBO calculations were analyzed and discussed. Theoretical studies propose that hydrophobic interaction and hydrogen bonding play significant role in determining the stability of the complexes.

Keywords: cucurbit [7]uril, threonine, PM6, TD-DFT, NBO.

References:

- [1] Merabet N, Madi F, Nouar L et al ;Journal of Molecular Liquids ;211 , 2015, 40-47
- [2] Madi F, Bounfla F, kirati I et al ;Journal of the Taiwan institute of chemical engineers ;50 , 2015, 37-42

Mise au point d'une méthode prédictive de calcul des propriétés critiques des composés covalents.

S.Daikh^a, A.M.Benkouider ^a.

*^aLaboratoire de chimie Organique, Macromoléculaire et des Matériaux (LCOMM). Université de Mascara.
BP 763, 29000 Mascara, Algérie.*

Email: daikhsamia@gmail.fr

Email: Benkouider_ali@hotmail.com

Résumé:

Les propriétés critiques sont des propriétés thermophysiques nécessaires à la conception, simulation et d'optimisation des installations chimiques. Malheureusement, les données expérimentales de ces propriétés, dans la plupart des cas, ne sont pas disponibles. Par conséquent, les méthodes prédictives sont d'une importance capitale pour les industriels. Dans ce travail trois méthodes prédictives permettant d'estimer avec la meilleure précision possible, les propriétés critiques des composés organiques purs Ces méthodes sont basées sur la technique de contribution de groupes d'ordre deux. En plus des corrections ont été proposées permettant une meilleure description des composés complexes. Les résultats sont comparés avec des méthodes complétives Il a été constaté une nette amélioration de la précision de nos modèles, pour les trois propriétés critiques, par rapport aux autres modèles concurrents.

Mots clés : Les propriétés critiques ; méthode de calcul ; méthode de contribution de groupes ; température critique ; pression critique ; volume critique.

Simulation de la distribution de l'intensité lumineuse dans un réacteur UV

Nabila DJADI¹ & Wahiba KAABAR²

^{1,2} *Département de Chimie, Faculté des Sciences Exactes, Université des Frères Mentouri, Constantine*
nabila_djadi@hotmail.fr

Résumé :

Bien que les technologies d'épuration des eaux aient fortement progressé, elles se heurtent toujours à certaines molécules difficilement dégradables. Ces composés se montrent réfractaires aux traitements traditionnels. Afin de venir à bout de celle-ci, la recherche s'est intéressée à de nouveaux procédés. Les procédés d'oxydation avancée ont largement démontré leur efficacité dans l'oxydation des composés organiques. C'est la raison pour laquelle notre étude s'est intéressée à l'application de ces technologies à l'épuration d'eaux résiduelles industrielles.

Toutefois, à ce jour, peu de recherches ont été menées sur l'application de la modélisation numérique pour optimiser les réacteurs UV. Une approche très efficace qui a récemment émergé comme un outil puissant permettant une meilleure compréhension des systèmes UV est la dynamique computationnelle des fluides (CFD).

Le présent travail s'intéresse à la simulation numérique de la distribution du rayonnement UV à travers une configuration annulaire par la CFD en tenant compte de deux paramètres; la matrice de l'eau ainsi que la puissance de la lampe UV.

Mots clés: Épuration des eaux, procédés d'oxydation avancée, résiduelles industrielles, réacteur UV, modélisation numérique, dynamique computationnelle des fluides.

Références:

- [1] Hofman-Caris, C. H. M.; Harmsen, D. J. H.; Wols, B. A.; Janssen, L. J. J. M.; Beerendonk, E. F.; Knol, A. H.; Hofman, J. A. M. H. Prediction of advanced oxidation performance in UV/H₂O₂ reactor systems with LP-UV lamps. *Water Science & Technology: Water Supply* 11.4 (2011) 460-467.
- [2] Sozzi, D.A.; Taghipour, F. Computational and experimental study of annular photo-reactor hydrodynamics. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 27(2006) 1043-1053.
- [3] Duran, J.E.; Taghipour, F.; Mohseni, M. CFD modeling of mass transfer in annular reactors. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 52 (2009) 5390-5401.
- [4] Santoro, D.; Raisee, M.; Moghaddami, M.; Ducoste, J.; Sasges, M.; Liberti, L.; Notarnicola, M. Modeling hydroxyl radical distribution and trialkyl phosphates oxidation in UV-H₂O₂ photoreactors using computational fluid dynamics. *Environ. Sci. Technol* 44(2010) 6233-6241.

Simulation numérique sur le transfert de matière entre l'emballage et l'aliment en utilisant les Réseaux de Neurones

R. Djefafia¹, A. Gheid²

¹Faculté de Sciences et Technologie, *Université Mohamed Chérif Messaadia, B.P 1553 Souk Ahras*
-Centre de Recherche Scientifique et Technique en Analyses Physico-chimiques (CRAPC)
BP 384, Siège ex-Pasna Zone Industrielle Bou-Ismaïl CP 42002 Tipaza Algérie.
E-mail: samira.djefafia@yahoo.com

²Laboratoire des sciences et techniques de l'eau et de l'environnement, *Université Mohamed Cherif Messaadia, B.P 1553, Souk Ahras*
E-mail: hakgheid@yahoo.fr

Résumé :

Ce travail vise à la prédiction par simulation numérique, la quantité des matières plastiques transférée entre l'emballage et l'aliment, la migration des substances présentes dans les matériaux d'emballage vers les produits[1]. Ces substances là sont des additifs qui sont des matières ajoutées à un polymère pour modifier ses propriétés ou ses caractéristiques[2]. La simulation numérique est effectuée sur des résultats expérimentaux en utilisant les réseaux de neurones dans le but d'estimer les concentrations de DOP (Dioctyle phtalate) du PVC (Polychlorure de Vinyle) dans les huiles comestibles. Les résultats que nous avons trouvés sont très intéressants, où l'indice de corrélation « R » entre la théorie et l'expérience est de R=0,998 et R=0,999 après un bon apprentissage. Donc les résultats théoriques concordent bien avec les résultats expérimentaux, et avec les réseaux de neurones on peut faire la prédiction de la concentration du DOP pénétrée dans les huiles comestibles même après une année ou plus et voire le pourcentage de toxicité.

Mots Clé: Huiles Comestibles, PVC, DOP, Simulation Numérique, Réseaux de Neurones.

Référence:

- [1] M. M. Nir, A. Ram, J. Miltz. *Polymer Engineering and Science*, **1996**, Vol. 36, N°. 6, 862-868
[2] O. LAU, S. WONG. *Journal of Chromatography A*, **2000**, Vol. 882, 255-270

Studies on Chemical Reactivity of Seven Membered Cyclic Sulfonamide Through Quantum Chemical Approaches

S. Drissi¹, T. Abbaz¹, A. Bendjeddou¹, Ak. Gouasmia² and D. Villemin³

¹ *Laboratory of Aquatic and Terrestrial Ecosystems, Org. and Bioorg. Chem. Group, University of Mohamed-Cherif Messaadia, Souk Ahras, 41000, Algeria, souad41000@yahoo.com, tahar.abbaz@univ-soukahras.dz, amel.bendjeddou@univ-soukahras.dz*

² *Laboratory of Organic Materials and Heterochemistry, University of Larbi Tebessi, Tebessa, 12000, Algeria, akgouasmia@hotmail.com*

³ *Laboratory of Molecular and Thio-Organic Chemistry, UMR CNRS 6507, INC3M, FR 3038, Labex EMC3, ensicaen & University of Caen, Caen 14050, France, didier.villemin@ensicaen.fr*

Abstract:

The main purpose of this study was the determination of chemical reactivity and site selectivity of a series of substituted seven membered cyclic sulfonamide. Molecular geometries have been studied using the density functional theory (DFT) with B3LYP/6-31G(d,p) basis set. In addition, the molecular electrostatic potential maps and frontier molecular orbitals were performed at B3LYP/6-31G(d,p) level of theory [1]. DFT global chemical reactivity descriptors (chemical hardness, energy, electronic chemical potential and electrophilicity) are calculated for the title molecules and used to predict their relative stability and reactivity [2]. The active sites for nucleophilic and electrophilic attacks have been chosen by relating them to the Fukui function [3].

Keywords: Cyclic sulfonamide, Density functional theory, Reactivity descriptors.

References:

- [1] DFV. Lewis, C. Ioannides, DV. Parke, *Xenobiotica*, **1994**, 24, 401.
- [2] ED. Glendening, JK. Badenhop, AD. Reed, JE. Carpenter, FF. Weinhold, Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin, Madison, WI, **1996**.
- [3] R. Kurtaran, S. Odabasioglu, A. Azizoglu, H. Kara, O. Atakol, *Polyhedron*, **2007**, 26, 5069.

Investigation théorique du complexe d'inclusion : vanilline/Béta-cyclodextrine.

Gharibi Meryem⁽¹⁾, Madi Fatiha⁽²⁾

⁽¹⁾ laboratoire de Chimie Appliqué (LCA).

⁽²⁾ laboratoire de Chimie computationnelle et nanostructures (LCCN)

E-mail :meriem.gh24@gmail.com

Résumé :

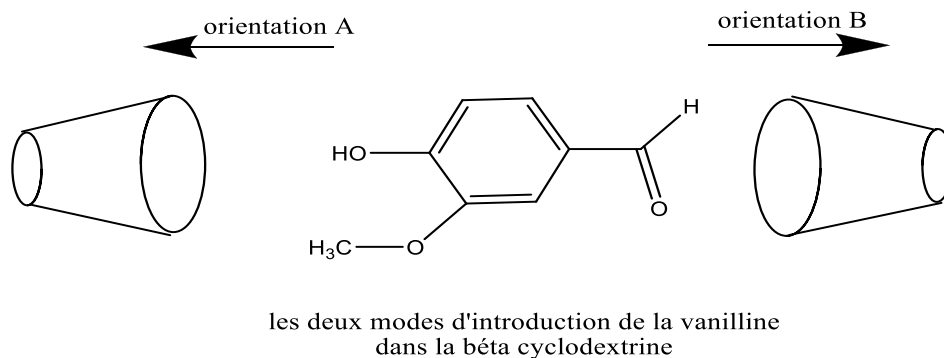
L'application des différentes méthodes de modélisation moléculaire telle que : *PM3*, *ONIOM2* et *B3LYP/6-311G⁺⁺* a été effectuée sur le complexe d'inclusion (stœchiométrie 1 :1) formé entre la Béta-cyclodextrine et la vanilline.

Pour cela, un processus d'inclusion a été déterminé par la méthode semi empirique *PM3* pour localiser le minimum énergétique lors de l'approche de la vanilline vers la Béta-cyclodextrine selon deux directions différentes (Figure).

Après la localisation des deux minimums qui sont soumises à différentes optimisations par les méthodes *ONIOM2* et *B3LYP/6-311G⁺⁺*, les paramètres géométriques ainsi que les énergies des orbitales frontières *HOMO* et *LUMO* ont été calculés.

En fin l'analyse *NBO* montre que les différentes interactions intermoléculaires telles que : les interactions de *VDW*, la liaison Hydrogène sont responsables de la stabilité du complexe formé.

Keyword: Vanilline, B-CD, *PM3*, *B3LYP/6-311G*, *NBO*



Référence:

[1] Madi, F., Leila, L., Khatmi, D.E.: Theoretical approach in the study of the inclusion processes of sulconazole with β -cyclodextrin. *J. Mol. Liq*, 154 (2010)1.

[2] Madi Fatiha, Bounefla Faiza, Kirati Ichraf, Nouar Leila, Khatmi DjamelEddine, TD-DFT calculations of visible spectra and structural studies of carbendazim inclusion complex with cucurbit[7]uril, *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.* (2015) 1–6.

Modélisation de la cinétique d'une réaction d'oxydation catalytique appliquée au traitement des eaux usées

Grabsi Mohammed¹, Zabat Nacéra¹

¹Faculté des Sciences de l'Ingénierat, Laboratoire de Synthèse Organique ; Modélisation et Optimisation des Procédés Chimiques. LOMOP, Département de Génie des Procédés, Université de Annaba B.P 23000 ; Algérie.
E-mail : grabsi2010@yahoo.com

Résumé :

La protection des ressources en eau naturelle et le développement de nouvelles technologies de traitement des eaux usées sont devenus les principaux enjeux environnementaux du 21^{ème} siècle.[1] Cette étude décrit un nouveau procédé de traitement d'un colorant indigoïde toxique (indigo carmin) en milieu aqueux par un procédé d'oxydation catalytique ; en utilisant un hétéropolyanion (HPA) synthétisé de type Dawson ($\alpha_2\text{P}_2\text{W}_{17}\text{O}_{61}\text{Co}$)⁸⁻ comme catalyseur, qui permet d'accélérer la vitesse de la réaction grâce à leurs propriétés physicochimiques spécifiques, avec la présence d'un oxydant de peroxyde d'hydrogène (H₂O₂).

Afin d'étudier la cinétique de cette réaction d'oxydation nous avons étudié l'influence de divers facteurs cinétiques à savoir :

- La vitesse instantanée et la vitesse moyenne de la réaction
- l'ordre global de la réaction ;
- constant de vitesse ;
- le temps de demi-réaction ;

Ces facteurs cinétique sont calculés par des modèles mathématiques connus dans le domaine de la cinétique chimique notamment : la loi de vant 'Hoff ; expressions semi-empirique d'Arrhenius ; les équations différentielles de 1^{ère}, 2^{ème} et 3^{ème} ordre.

Mots clés : H₂O₂, colorant indigoïde, hétéropolyanion, vant 'Hoff ; semi-empirique

Référence :

[1] I.ARSLAN et I. A. BALCIOGLU . Degradation of commercial reactive dyestuffs by heterogenous and homogenous advanced oxidation processes: a comparative study. Dyes Pigments, 43 (1999) 95–108.

Simulation numérique de transfert du polluant dans un milieu poreux

A. Haddad Khoula¹, B. Abdelhak Gheid²

¹Laboratoire (LSTEE), univ-souk ahras, khawlahaddad11@yahoo.com

²Laboratoire (LSTEE), univ-souk ahras, hakgheid@yahoo.fr

Résumé :

La pollution par les pesticides et les polluants organiques est principalement perçue au travers de leur présence dans les eaux et dans les denrées alimentaires. Cependant, beaucoup de polluants transitent par les sols où leur comportement va conditionner la manifestation de leur caractère polluant. La réduction de leur impact environnemental nécessite de comprendre les processus auxquels ils sont soumis dans les sols.

L'objectif de ce travail est l'élaboration d'un modèle de transport d'un pesticide à travers le sol. Ce modèle est basé sur les équations de transports diffusion convection adsorption et réaction. La résolution du système d'équation du modèle a été faite au moyen des méthodes numériques différence finis à l'aide d'un programme fortran.

Mots Clés: pesticides, transfert de la matière, modélisation, sol, eau.

Référence :

[1] Candela L, Marino MA. Simulation of 2,4-D herbicide transport through the unsaturated zone using an analytical model. *Int J Environ Anal Chem* 2004;84(1-3):123-31.

[2] van Genuchten MTh, Wierenga PJ. Mass transfer studies in sorbing porous media: I. Analytical solutions. *Soil Sci Soc Am J* 1976;40(4):473-80.

Etude théorique du complexe d'inclusion cyclodextrines/hespérétine

S.Haiahem, L.Nouar, F.Madi.

«LCCN» Université 08 Mai 45.Guelma.
sakinahaiahem@yahoo.fr

Résumé :

L'étude présentée dans ce travail se situe dans le cadre d'études de la chimie théorique appliquée aux études de propriétés de systèmes physico-chimiques complexes dispensée. Le procédé d'inclusion concerne les cyclodextrines (beta, méta) et l'hespérétine a été étudié en utilisant la méthode semi empirique de la mécanique quantique PM3, NBO et ONIOM2. Toutes les méthodes quantiques ont donné l'orientation A comme la plus favorable dans la béta -cyclodextrine, et l'orientation C la plus favorable dans la méta-cyclodextrine ou les deux cycles aromatique sont profondément à l'intérieur de la cavité hydrophobe de la β -CD et Me-CD sont plus stable. Nous avons trouvé qu'il y a une bonne corrélation entre l'énergie de complexation et les énergies HOMO et LUMO.

Mots clés : Béta-Cyclodextrine, Méta-cyclodextrine, ONIOM2, Hespérétine, PM3, NBO, HOMO et LUMO.

Référence :

- [1] J. Debord, "Introduction à la modélisation moléculaire" 2004, page : 37-41.
- [2] H. Hohenberg, W. Kohn, Phys Rev B 136, 1964, page : 864-871.
- [3] S. Dapprich, I. Komaromi, K S. Byun, K. Morokuma, M J. Frisch, J Mol Struct THEOCHEM, 1999, page: 1-21, 461-462.
- [4] P. Bonnet, "Etude par modélisation moléculaire de dimères de cyclodextrineset de leurs complexes d'inclusion" 2001.

Theoretical investigation of Inclusion complex of 1-Aminoisoquinoline into β -cyclodextrin

SafiaHimria^a, Leila nouar^a, fatihaMadi^a, mounaCheriet^b

(a) *Laboratory of computational chemistry and nanostructures, Department of material sciences*

(b) *Laboratory of chemistry applied, Department of material sciences*

University of 08 Mai 1945 Guelma, Algeria.

Email: himri.safia@gmail.com

Abstract:

The inclusion of 1-Aminoisoquinoline (AIQ) in β -cyclodextrin (β -CD) was studied using PM3 and B3LYP/6-31G calculations. Complexation energy, dipole moment, HOMO and LUMO energies structural parameters of two proposed complexes are investigated. The results show clearly that the complexes formed are energetically favored. Finally, natural bonding orbital (NBO) analysis was employed to quantify the donor-acceptor interactions between AIQ and β -CD.

Key words: β -Cyclodextrin, AIQ, PM3, DFT.

References:

- [1] M. Rahim, F. Madi, L. Nouar, A. Bouhadiba, S. Haiahem, D. E. Khatmi, Y. Belhocine, *Journal of Molecular Liquids* 199 (2014) 501–510.
- [2] I. Djilani, F. Madi, L. Nouar, S. Haiahem, M. Rahim, D. E. Khatmi, A. Bouhadiba, *C. R. Chimie* 18 (2015) 170–177
- [3] F. Madi, F. Bounefla, I. Kirati, L. Nouar, D. E. Khatmi. *Journal of Taiwan Institute of Chemical Engineers* 000(2015) 1-6.

. Crystal structures, DFT calculations of monomer and dimer of N, N Diethyl-4-[(E)-(pyridin-3 yl) diazenyl] aniline compound.

N. Khelloul¹, N. Benhalima², R. Rahmani³, A. Chouaih⁴ et F. Hamzaou⁵.

LTPS, Université Abdelhamid Ibn Badis, Mostaganem, Algérie^[1, 2, 3, 4, 5]
nawelkhelloul@yahoo.fr

Résumé:

In this work, we are interested in the theoretical and experimental study of a compound of optically nonlinear properties. This compound crystallizes in a orthorhombic system with a space group (P21, P21, P21) and the lattice parameters $a = 7.4332 (7) \text{ \AA}$, $b = 9.1093 (8) \text{ \AA}$, $c = 20.1946 (19) \text{ \AA}$ $V = 1367.4 (2) \text{ \AA}^3$, $Z = 4$. The determination of the structure of the test compound was conducted using the method of functional theory of density using two hybrids functional B3LYP and B3PW91 with the base calculation 6-31G (d, p). All calculations were performed by the program GAUSSIAN 09. To highlight the charge transfer phenomenon and its management within the molecule, we determined the dipole moment and the electrostatic potential. Thus the setting: the polarizability α and β , the hyperpolarisability are calculated in the same method. The molecular orbital calculations boundaries clearly show the inverse relationship of the HOMO-LUMO gap with hyper total static polarizability. Vibration frequencies were calculated using the method (DFT) B3PW91 and B3LYP/6-31G(d,p).

Keywords: Vibration frequencies, optically nonlinear, HOMO-LUMO

Modélisation des indices de rétention de 113 pyrazines séparées par chromatographie gazeuse sur deux colonnes de polarités différentes

Kherouf Soumaya¹, Messadi Djelloul¹, Haddag Hamza ¹

¹Laboratoire De Sécurité Environnemental et Alimentaire. Université Badji Mokhtar -Annaba- B.P.12, Annaba, 23000. Algeria

soubio23@hotmail.fr

d_messadi@yahoo.fr

haddaghamza@yahoo.fr

Résumé :

Une des alternatives à l'expérimentation est l'utilisation des relations quantitatives structure-activité (QSAR), qui sont des méthodes pour calculer certains effets ou les propriétés des substances chimiques, en l'absence de données expérimentales. Notre travail s'inscrit dans ce contexte et on se propose d'appliquer l'approche hybride algorithme génétique/régression linéaire multiple pour modéliser, séparément, les indices de rétention d'un même ensemble de 90 pyrazines éluées tour à tour sur les colonnes OV-101 et Carbowax-20M, en utilisant des descripteurs moléculaires théoriques calculés à l'aide du logiciel DRAGON [1]. Un ensemble de 23 autres pyrazines, a servi d'ensemble de validation. Les modèles optimaux ont été sélectionnés en maximisant le coefficient de prédiction (Q^2_{LOO}). Deux modèles de tailles différentes pour les deux colonnes ont été obtenus, ils sont caractérisés par de très bonnes statistiques d'ajustement et de validation.

Mots clés : Modélisation, Pyrazine, Indice de rétention, Algorithme génétique, Régression linéaire multiple, Chimiométrie.

Référence:

1. Todeschini R., Consonni V. et Pavan M., 2005. Dragon, Software for the calculation of Molecular Descriptors. Release 5.3 for Windows, Milano.

Supramolecular interaction of ibuprofen with HP β -cyclodextrin: A molecular modeling approach

Lachi Nadia, Khatmi Djameleddine

*Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures University 8Mai 1945, Guelma, Algeria
Lachi_n@yahoo.fr*

Abstract:

Ibuprofen has been used widely as an anti-inflammatory and anti-pyretic agent. It is slightly soluble in water. Several investigators have conducted studies to improve the dissolution rate of ibuprofen using cyclodextrin complexation. In this study, The inclusion interaction between HP β -cyclodextrin and ibuprofen with 1:1 stoichiometry was investigated using semi-empirical and ONIOM methods. Two modes of complexation were considered for studying such complex. In mode A the carboxyl group of the guest was pointed toward wider side of the host (primary hydroxyl group side), while in mode B the carboxyl group was directed to the narrow side (secondary hydroxyl group side).

The natural bonding orbital (NBO) analysis is also employed to quantify the donor -acceptor interactions between the host and the guest molecule.

The results obtained in this work are in agreement with the experimental data.

Key words: inclusion complex, ibuprofen, HP β -cyclodextrin, ONIOM.

References:

- [1] K.Tang, P.Zhang , H.Li, *Process Biochemistry*.46 (2011) 1817.
- [2] S.An, J.He, L.Sun, D.Ren, Y.Ban, *J.Mol.Struct.* 1037(2013)9.
- [3] C .Yuan, Z.Jin, X.Xu. *Carbohydrate Polymers* 89 (2012) 492.
- [4] M.di Cagno, P.C. Stein, N.S. Basnet, M. Brandl, A.B. Brandl. *J. Pharm. Biomed. Anal.* 55 (2011)446.

Etude théorique de la réactivité chimique de systèmes moléculaires complexes par des approches quantiques et par modélisation moléculaire

Abdelkader Ladjarafi¹, Razika Saihi², Karine Costuas³, Hacène Meghezzi¹, Jean-François Halet³

¹ Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB, Alger, Algérie, ladjarafi@gmail.com

² Laboratoire de Chimie Organique, Faculté de Chimie, Université de Ziane Achour, UZAD, Djelfa, Algérie

³ Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS - Université de Rennes 1, Rennes Cedex, France, jean-francois.halet@univ-rennes1.fr

Résumé :

L'influence du métal M (M=Fe, Mo) sur les propriétés électroniques des complexes neutres [M]-C₂-Ph-C₂-[M] a été étudiée lors des processus de première et seconde oxydation, en utilisant la méthode DFT. La détermination des potentiels d'ionisation et des énergies totales a montré que le fer s'avérant plus stabilisant que le molybdène. L'analyse des orbitales moléculaires a montré que les HOMO des complexes à base de molybdène possèdent un caractère métallique plus fort que celles des complexes du fer. L'influence du pouvoir électro-donneur (ou accepteur) sur la stabilité des complexes et le rôle des orbitales frontières impliquées dans les processus d'oxydation ont été discutés. Un bon accord a été observé avec les données expérimentales disponibles.

Mots clés : complexes organométallique; oxydation; protonation; densité de spin; optique non linéaire; DFT.

Référence :

- [1] A. Ladjarafi, K. Costuas, H. Meghezzi, J-F. Halet, *J. Mol. Model.*, **2015**, 21,71.
- [2] E. C. Fitzgerald, A. Ladjarafi, N. J. Brown, D. Collison, K. Costuas, R. Edge, J.-F. Halet, F. Justaud, P. J. Low, H. Meghezzi, T. Roisnel, M. W. Whiteley, C. Lapinte. *Organometallics*, **2011**, 30, 4180.
- [3] N. Gauthier, G. Argouarch, F. Paul, L. Toupet, A. Ladjarafi, K. Costuas, J.-F. Halet, M. Samoc, M. P. Cifuentes, T. C. Corkery, and M. G. Humphrey. *Chem. Eur. J.*, **2011**, 17, 5561.
- [4] X. Wu, T. Weng, S. Jin, J. Liang, R. Guo, G.-A. Yu, S. H. Liu, *J. Organomet. Chem.*, **2009**, 694, 1877.

Host-guest inclusion complex between β -cyclodextrin and Eugenol: A theoretical approach

Lahcene. Abdelmalek, Nouar. Leila

Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, Department of Material Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics and Material Sciences, University of 08 Mai 1945, Guelma, Algeria..

E-mail: freont121@yahoo.fr, leilanoua@yahoo.fr

Abstract:

Two orientations (Figure 1) namely A and B were considered to investigate the inclusion process of Eugenol (EG) into β -CD cavity by means PM3MM, ONIOM2 and DFT methods. The obtained results with All method clearly indicate that the formed complexes are energetically favored; the A complex is found more favored than B complex. The calculated deformations energies show that the geometry of β -CD is deformed in the complexation process. ¹H nuclear magnetic resonance (NMR) was calculated by the Gauge-Including Atomic Orbital method (GIAO) and compared with available experimental data. Finally, From NBO analysis the donor and acceptor interactions between eugenol and β -CD were analyzed and discussed.

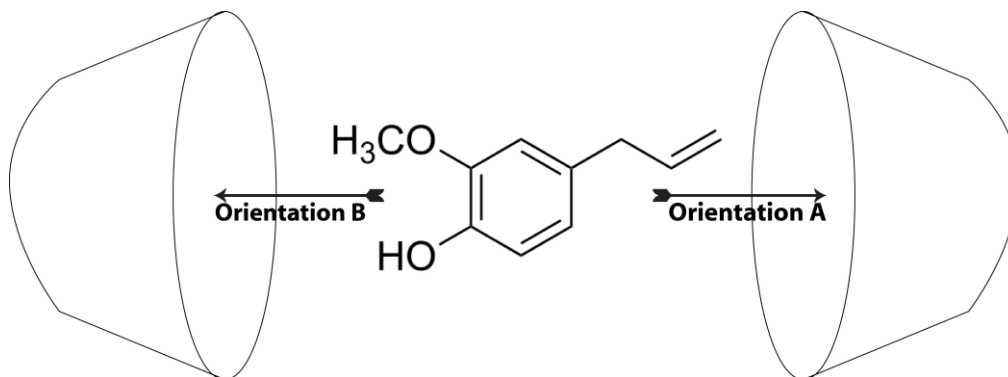


Figure 1: The proposed structures of eugenol / β -CD complex for A and B orientations.

KEY WORDS: β -CD, eugenol, DFT, NBO, GIAO

Bonding interactions in EDDS complexes.

Aicha Lakehal¹, Salima Lakehal²,

¹ *Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Batna PB 05000 Batna, Algeria*

² *Laboratoire Chimie des matériaux et des vivants: Activité, Réactivité Université Hadj Lakhdar, Batna, 05000-
Algérie,*

Lakehal.Salima@yahoo.fr

Abstract:

Hydrometallurgical, electroplating, tanning, as well as dyeing, textile, electrochemical industries are considered to be one of the largest sources of heavy metals in waste water which are particularly dangerous for the environment and living organisms. Efficient removal and recovery of heavy metals from industrial wastewater streams is a major challenge. The combined use of complex agents such as Oxalic acid, malonic acid, glycine, citrate, nitrilotriacetic acid (NTA), iminodiacetic acid (IDA), diethylenetriamine pentaacetic acid (DTPA), and S,S-ethylene-diaminedisuccinic acid (EDDS) with ion exchange membranes has received much attention. It seems to be an effective technique not only for concentration of metal ions but also for their separation. In spite of the practical importance of these complexes, the exact nature of the bonding is not known.

In the present study the structural and bonding characteristics of the EDDS complexes of 6 metal ions (Mg^{2+} , Ca^{2+} , Pb^{2+} , Cu^{2+} , Ni^{2+} , Hg^{2+}) were investigated by means of density functional theory computations. The computed molecular geometries were compared to those in the crystal. We focus on the metal–ligand interactions and analyse the bonding using energy partitioning analysis and AIM method.

Keywords: DFT, AIM, EDDS

Identification of novel inhibitors for α -glucosidase using virtual screening

A. LAOUD¹, K. KRAIM^{1,2}, Y. SAIHI¹, F. FERKOUS¹

¹*Applied Organic Chemistry Laboratory, Department of chemistry, University of Annaba, Algérie*

²*National high school of technological teaching (ENSET) Azzaba – Skikda, Algérie*

aicha.laoud@gmail.com

Kchem@gmail.com

Abstract:

Glucosidases are largely involved in the human metabolic system. Thus, glucosidase inhibitions have many potential therapeutic applications and have been implicated in several diseases such as diabetes [1], cancers [2] and Gaucher's disease [3]. One special category of potent glucosidase inhibitor is naturally occurring and synthesized azasugars such as deoxynojirimycin, acarbose, voglibose and miglitol [4]. The objective of the present work was to identify molecules as potent α -glucosidase inhibitors. Further, in silico screening of the database was carried out by applying the Lipinski rule of five and the hits obtained were then subjected to virtual screening by docking, to obtain the final hits potentially with potent α -glucosidase inhibition activity. The screening resulted in 3 hits with XP > 9.753, these hits may be further developed as novel potential and selective inhibitors.

Key words: α -glucosidase Inhibitors, Virtual screening, Docking, Diabetes.

References:

- [1] Kordik CP.Reitz AB, J Med Chem, 1999, 42, 181–201.
- [2] Goss, P. E., Baker, M., Dennis, J. W. & Carver, J, Clin. Cancer Res, 1995, 1, 935–944.
- [3] Cox , T , Lachmann , R , Hollak , C , Aerts , J , van Weely , S , Hřebíček, M. et al,Lancet ,2000 ,355, 1481–1485.
- [4] Szczepina MG, Johnston BD, Yuan Y, Svensson B, P. B, J Am Chem Soc, 2004,126, 12458–69.

Quantum Chemical Descriptors Of Some A Series Of 1,4,3,5-Oxathiadiazepane-4,4-Dioxides Through Density Functional Theory (DFT)

Soulef Maache^{1,*}, Amel Bendjeddou¹, Tahar Abbaz^{1,2}, Abdelkrim Gouasmia² and Didier Villemin³

¹ Univ Souk Ahras, Fac. Sci and Tech, EAT Lab., 41000 Souk Ahras, Algeria

² Univ Tebessa, Fac. Sci and Tech, MOH Lab., 12000 Tebessa, Algeria

³ Laboratory of Molecular and Thio-Organic Chemistry, UMR CNRS 6507, INC3M, FR 3038, Labex EMC3, Ensicaen & University of Caen, 14050 Caen, France

E-mail :Maachesoulef@yahoo.fr

Abstract:

The optimized molecular structure of a series of 1,4,3,5-oxathiadiazepane 4,4-dioxides have been investigated theoretically using Gaussian09 software package. The HOMO and LUMO analysis were used to determine the charge transfer within the molecule and some molecular properties such as ionization potential, electron affinity, electronegativity, chemical potential, hardness, softness and electrophilicity. The linear polarizability (α) and the first hyperpolarizability (β_{tot}) values of the investigated molecule have been computed using B3LYP with 6-31G (d,p) basis set. Stability of the molecules arising from hyper conjugative interaction and charge transfer delocalization has been analyzed using natural bond orbital (NBO) analysis. Finally, Fukui function analyses on atomic charges, electrophilic and nucleophilic descriptors of the title molecules have been calculated.

Keywords: Oxathiadiazepane; Density functional theory; Computational chemistry; Quantum chemical calculations

Références :

- [1] A. Bendjeddou, T. Abbaz, Z. Regainia, N.E Aouf, *Molecules*. 17 (2012) 1890.
- [2] V.Padmavathi, D.R.C.V.Subbaiah, K.Mahesh, T.R.Lakshmi, *Chem. Pharm.Bull.*55 (2007) 1704.
- [3] D.B.Shinde, M.J.Aaglawe, S.S.Dhule, S.S.Bahekar, P.S.Wakte, *J. Kor. Chem. Sty.*47 (2003) 133.
- [4] M.I. Johnston, D.F. Hoth, *Science*.260 (1993) 1286.

ONIOM study of the inclusion complexes of Flurbiprofen with β -cyclodextrin.

Faiza MEDDOUR^a, Leila NOUAR^a

^a*Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, Department of Material Sciences, Faculty of Mathematical, Informatics and Material Sciences, University of 08 Mai 1945, Guelma, Algeria
faiza_meddour@yahoo.fr*

Abstract:

Flurbiprofen, (2-(2-fluoro-4-biphenyl)) propionic acid, is an anti-inflammatory drug used to treat the inflammation and pain of arthritis [1], however it is a poorly water soluble drug. We theoretically investigated the inclusion complexes of Flurbiprofen with β -cyclodextrin in a molar ratio of 1:1. Two orientation A and B were investigated by semi empirical method PM3, and different hybrid methods (ONIOM2). We chose B3LYP, M06-2X density functional, using 6-31G (d) basis set with semi-empirical PM3 as levels for ONIOM2 method. NBO calculations were performed to investigate host-guest interaction. At last NMR shifts were simulated by mean GIAO-DFT to correlate them to experimental data.

Keywords: β -Cyclodextrin, Flurbiprofen, ONIOM2, NBO, GIAO.

References:

- [1] Fukuhara, A., Imai, T., Inoue, K., Otagiri, M.: Effect of oral multiple-dose administration of anti-inflammatory flurbiprofen chimera drug on gastric lesion, other toxicities and disposition kinetics. *Biol. Pharm. Bull.* 18, 140–147 (1995)
- [2] Otagiri, M., Imai, T., Matsuo, N., Uekama, K.: Improvements to some pharmaceutical properties of flurbiprofen by β - and γ -cyclodextrin complexations. *Acta Pharm. Suec.* 20, 1–10 (1983)

Host-guest inclusion complex between Cucurbit [7]uril/ Albendazole

Merabet Nora¹, MadiFatiha ,Nouar Leila¹.

*I. Laboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, Department of process engineering, Faculty of science and technology,
University of 8 Mai 1945, Guelma, Algeria, e-mail: Merabetnora@gmail.com,
E-mail: leilanoua@yahoo.fr*

Abstract:

Host-guest interactions of Cucurbit [7]uril (CB7) with Albendazole (ABZ) were simulated using (HF/6-31G and B3LYP/6-31G(d) methods. The results obtained clearly indicate that the complexes formed are energetically favored with or without solvent, the A complex (ABZ entering into the cavity of CB7 by C3H7 group) is found more favored than the B complex (ABZ entering into the cavity of CB7 by OCH3 group). Analytical techniques such as UV–vis spectroscopy, Fourier transform infrared spectroscopy, and protons NMR were used to characterize the complex. Finally, natural bonding orbital (NBO) analysis to quantify the donor–acceptor interactions between ABZ and CB7.

Keywords: Quantum chemistry, NBO, UV, NMR.

References:

- [1] F. Pichierri, DFT study of cucurbit[n]uril, n = 5–10. *J. Mol. Struct. (Theochem.)*, **2006**, 765, 151–152.
- [2] R.V .Pinjari, S.P .Gejj, Electronic, structure, molecular electrostatic potential and NMR chemical shifts in cucurbit[n]urils (n = 5–8), ferrocene and their complexes. *J. Phys. Chem. A*, **2008**, 112, 12679–12686.

Molecular modeling investigations of the β -cyclodextrin / n-nitroso-n-(2-chloroethyl)-n'-sulfamoylprolinate inclusion complex stability

A. Bouzitouna¹, D.J. Khatmi ², O. ATTOUI-YAHIA ³,

1. Department of chemistry, Badji-Mokhtar University, Annaba, Algeria am.bouzitouna@gmail.com

2. Laboratory of computational chemistry and nanostructures BP: 401, University of Guelma, Algeria

3 Applied Organic Chemistry Laboratory, Department of Chemistry, Faculty of Science, Badji-Mokhtar University, BP 12 Annaba, Algeria.

Abstract:

Due to the high importance of hydrogen bond in the non-bonded interaction potential between host and guest systems. The inclusion complex of N-Nitroso-N-(2-chloroethyl)-N'-sulfamoylprolinate with β -CD has been studied theoretically using PM6 and PM7 method.

In fact, we have demonstrated that the PM7 are more efficiency than PM6 concerning the complexation energy results: -75.45kcal/mol, -121.27kcal/mol respectively. Thus, the PM7 method could estimate easily the H-bond force between host and guest which improved the stability of the complex.

To improve the precision of the theoretical results, the system was subjected to a full optimization by ONIOM method (DFT, DFT) (DFT, HF) combination.

Key words: β -cyclodextrin, CENS, inclusion complex, H-bond, PM7, PM6, ONIOM.

Référence:

[1] L. Liu, Q.X. Guo, J. Incl. Phenom. Macrocycl.Chem, **2004**, 50, 95–103 Use of quantum chemical methods to study cyclodextrin chemistry.

[2] J.J.P. Stewart, Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters, J. Mol.Model, **2012**, 19, 1–32.

Host–guest interaction of thymol with β -cyclodextrin

Mokhetari abdelaali, Madi Fatiha, Nouar Leila

Abstract:

The complexation of Thymol by β -cyclodextrin (β -CD) was studied using HF and DFT calculations at the HF/6-31G, HF/6-31G (d,p), B3LYP/6-31G and B3LYP /6-31G(d,p) level of theory. Complexation energy, dipole moment, HOMO and LUMO energies structural parameters of formed complexes are investigated. The results show clearly that the complexes formed are energetically favored. The A orientation (Thymol entering into the cavity of β -CD from its wide side by C₃H₇ group) is found more favored than the B orientation (Thymol entering into the cavity of β -CD from its wide side by CH₃ group), the preference being greater in the case of B3LYP /6-31G (d,p) calculations. Finally, natural bonding orbital (NBO) analysis was employed to quantify the donor–acceptor interactions between Thymol and β -CD.

Keywords: β -cyclodextrin, thymol, HF, DFT, HOMO and LUMO.

References:

- [1]. Anna Wattanasatchaa, Sirirat Rengpipatb, Supason Wanichwecharungruang. Thymol nanospheres as an effective anti-bacterial agent. *International Journal of Pharmaceutics* 434 (2012) 360–365
- [2]. Szente, L., & Szejtli, J. Cyclodextrins as food ingredients. *Trends in Food Science & Technology*, 15(2004)137-142.
- [3]. F. Vogtle, *Supramolecular Chemistry. An Introduction*, Wiley, New York, 1991.
- [4]. K. Anzai, H. Kono, J. Mizoguchi, T. Yanagi, F. Hirayama, H. Arima, K. Uekama, Two-dimensional C13–H1 heteronuclear correlation NMR spectroscopic studies for the inclusion complex of cyclomaltoheptaose (β -Cyclodextrin) with a new *Helicobacter*
- [5]. Sanguansri, P., & Augustin, M. A. Nanoscale materials development: a food industry perspective. *Trends in Food Science & Technology*, 17(2006) 547-556.
- [6]. W. Saenger, Cyclodextrin inclusion compounds in research and industry, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 19 (1980) 344–362.
- [7]. H.Y. Ding, J.B. Chao, G.M. Zhang, S.M. Shuang, J.-H. Pan, *Spectrochim. Acta Part A* 59 (2003) 3421.
- [8]. Nouar Leila, Haiahem Sakina, Abdelaziz Bouhadiba, Fatiha Madi. Theoretical study of inclusion complexation of 3-amino-5-nitrobenzisothiazole with β -cyclodextrin. *Journal of Molecular Liquids* 160 (2011) 8–13

New methodology based on combined Fourier Transform Infrared-Synchronous Fluorescence Spectroscopy- Chemometrics for estimation of extra virgin olive oil adulteration with pomace olive oil

Nigri Soraya, Oumeddour Rabah

Département des sciences de la matière, Faculté des Mathématiques et d'Informatique et des Sciences de la Matière ; Université 08 mai 1945 Guelma, B.P 401 Guelma 24000, Algeria.
Laboratoire d'Analyses Industrielles et Génie des Matériaux, Université 08 mai 1945 Guelma, B.P 401 Guelma 24000, Algeria.
E-mail: nigri_s@yahoo.fr; israbah@yahoo.fr

Abstract:

This work describes original method to determine the adulteration of extra virgin olive oil (EVOO) with pomace olive oil (POO). Three different methods are combined: Fourier transform infrared (FTIR), synchronous scanning fluorescence (SynFS) spectroscopic techniques and chemometrics analysis. The spectral regions where the variations were observed were chosen for developing models. The performance of the model was evaluated by the coefficient of determination R^2 and the root mean square error of cross validation RMSECV. EVOO and POO oils have the same botanical origin; SynFS was required as an additional technique to FTIR in order to determine POO models. The methodology presented in this study is a useful tool for analyzing and detecting adulteration of extra virgin olive oil with pomace olive.

Keywords: Extra virgin olive oil; pomace olive oil; FTIR; synchronous fluorescence; chemometric analysis.

Références:

- [1] S. Nigri, R. Oumeddour, *Rivista Italiana Sostanze Grasse*, **2016**, 93, 125.
- [2] N. Vlachos, Y. Skopelitis, M. Psaroudaki, V. Konstantinidou, A. Chatzilazarou, E. Tegou, *Analytica Chimica Acta*, **2006**, 573, 459

Etude théorique des interactions du complexe d'inclusion Guanine-beta cyclodextrine

Nouar Leila, Madi Fatiha, Cheriet Mouna, Himri Safia, meddourFaiza, Merabet Nora

Abstract:

The binding of the guanine with b-CD was investigated using DFT. Two modes of complexation were considered for studying such complex. In A complex the NH₂ group of the guest was pointed toward secondary hydroxyls of b-CD, while in B complex the NH₂ group was directed to primary hydroxyls. The lowest energy structure obtained with DFT for B complex (the preferred complex) showed that the aromatic ring is totally embedded in bCD. This preferred arrangement increases intermolecular H-bond interactions between guanine and b-CD. This is confirmed by NBO analysis.

Keywords: DFT, Guanine, NBO.

Etude théorique de l'effet de l'hétéroatome sur les propriétés électroniques moléculaires des isoindoline-isoindole

Abdelkader Ladjarafi¹, **Razika Saihi**², Hacène Meghezzi¹

¹Laboratoire de Thermodynamique et Modélisation Moléculaire, Faculté de Chimie, USTHB, Alger, Algérie, ladjarafi@gmail.com

²Laboratoire de Chimie Organique, Faculté de Chimie, Université de Ziane Achour, UZAD, Djelfa, Algérie, chimie17@yahoo.f

r

Résumé :

Les isoindolines-isoindoles ce sont des composés hétérocycliques largement utilisés comme intermédiaires de synthèse, ils jouent un rôle important dans la synthèse organique et constituent le noyau de base de divers composés d'intérêt biologique et pharmacologique (activité anti-inflammatoire, anticonvulsivant, anticancéreuse et antimicrobiennes). En particulier l'isoindoline-1,3-dione a suscité dernièrement un intérêt scientifique important en raison de son action contre le cancer et les maladies inflammatoires récemment découvert. On se propose d'étudier dans ce travail l'influence de l'hétéroatome sur les propriétés électroniques et structurales de quelques dérivés d'isoindoline par la prise en compte de l'effet du solvant. Les calculs théoriques ont été effectués par les méthodes AM1, HF/6-31G et la méthode DFT avec la fonctionnelle B3LYP et la base 6-31G par la chaîne de programme Gaussian 03.

Mots clés : isoindolines-isoindoles; l'hétéroatome; effet du solvant; DFT.

Références:

- [1] R. Baharfar and S. Mohajer, *Helvetica Chimica Acta*, **2012**, 95, 185.
- [2] M. Yosuva Suvaikin et al, *Adv. Appl. Sci. Res.*, **2012**, 3, 45.
- [3] Singh *et al. Pharmacologyonline*, **2011**, 2, 976.
- [4] L. Min, S. Wan, Y. Yang, Y. Wen-yuan, L. Zhong-jun & C. Jing-rong, *Acta Pharmacol Sin.*, **2009**, 30, 134.

Spectroscopic and Molecular Modeling Study of the Inclusion Complexation between MethylBenzoxazolinone and β -cyclodextrine

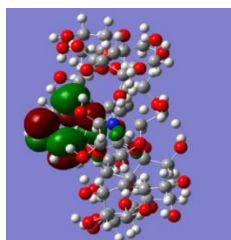
Maamar Stiti¹, Habiba Bouzit^{1,2} and Mohamed Abdaoui¹

¹Laboratoire de Chimie Appliquée. Université 08 Mai 1945, BP 401, 24000 Guelma, Algérie.

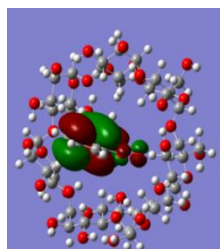
²Research Centre in Analytical Chemistry and Physics (CRAPC), BP 248, Algiers RP, Algiers 16004, E-mail: stiti.maamar@gmail.com

Abstract:

In present work, the interactions between 3-methyl-2-benzoxazolinone and β -cyclodextrine have been investigated by means of FTIR and UV-Vis spectroscopy. Moreover, the molecular modeling study using PM6, AM1, PM3, and ONIOM2 methods, in vacuum, water and acetonitril, imposing a 1:1 stoichiometry were also performed. The simulation results indicate that the A complex, in which the oxazolidinone ring of the guest was inserted into the wide rim of β -CD was determined to be the most favorable in vacuum and in solution.



HOMO (PM6, A comlex)



LUMO (PM6, A comlex)

Fig.1: Typical contour plots of HOMO and LUMO of (Methylbenzo/ β -CD) A complex in vacuum.

Key Words: N-methylbenzoxazolinone, β -Cyclodextrin, inclusion complex, absorption spectroscopy, molecular modeling, AM1, PM3, ONIOM2.

References:

- [1] J. Szejtli, Chem. Rev. (1998) 98 1743–1753
- [2]] K. Pal, F. Chandra, S. Mallick, A.L. Koner, J. Photochem. Photobiol. A, (2015) 306 47–54.
- [3] P.Renard, J.med .chem, (1990) 33.380-386

Simultaneous prediction of liquid-liquid equilibrium of ternary system containing water, formic acid and isoamyl alcohol using NRTL model.

M. Timedjehdine¹, A. Hasseine¹, A. Merzougui¹, I. Bechka¹

¹Department of Chemical Engineering, University of Mohamed Kheider, Biskra, Algeria.

Timedjehdine@hotmail.fr

Abstract:

Liquid-liquid equilibrium data of ternary systems are very important for simulation, design, optimization and control of separation operation. The NRTL model is used to predict liquid-liquid equilibrium data for the ternary system (water + formic acid + isoamyl alcohol) at 291.15 K and 1 atm. The binary interaction parameters of this model were obtained thanks to two evolutionary techniques: the Genetic Algorithm (GA) and the Particle Swarm Optimization (PSO). The results obtained of the prediction of liquid-liquid equilibrium are compared with the experimental values, these results obtained justify that the process of optimization recommended is very practical to estimate the interactions parameters of this ternary system.

Keywords: Liquid-liquid equilibrium, Ternary system, Genetic algorithm (GA), Particle swarm optimization (PSO).

References:

- [1] A. Merzougui, A. Hasseine, D. Laiadi, Fluid Phase Equilibria, 2011, 308, Elsevier, pp. 142-147.
- [2] D. Laiadi, A. Hasseine, A. Merzougui, Fluid Phase Equilibria, 2011, 313, 114-120.

Une nouvelle approche pour comprendre le mécanisme de la réaction de hofmann-loffler-freytag : étude computationnelle.

ZABOUB.A^a, MADI.F^b, DJARID.A^c, AMIRAT.S^a, KEDJADJA.A^a, MERDES.R^a,

a : Laboratoire de Chimie Appliquée, groupe synthèse et développement de composés D'intérêt biologique.

b : Laboratoire de chimie computationnelle et nanostructures. Université 08 Mai 1945. BP 401. Guelma.Algerie.

*c : Laboratoire de chimie théorique. Université Kadi Ayyad, faculté des sciences Semlalia
BP 2390. Marrakech . Maroc*

E-mail : zaboub.a@hotmail.fr, fatihamadi@yahoo.fr, et merdesra@yahoo.fr

Résumé :

Une série des calculs DFT a été utilisée pour étudier le mécanisme réactionnel de la réaction de Hoffman-Loffler-Freytag dans la préparation de la pyrrolidine. Notre intérêt est de proposer d'autres chemins réactionnels supposés à être plus favorables énergétiquement.

Les structures des réactifs, produits, états intermédiaires et états de transition ont été optimisées dans le niveau B3LYP/6-31+G (d,p).

Ainsi, on a déterminé le profil de la surface d'énergie potentielle (PES) pour comparer entre les états énergétiques, et réalisé un calcul IRC dans le but de confirmer la présence et l'unicité de l'état de transition.

Mots Clés : DFT, HLF, PES.

Référence :

- 1- Rasmus Y.Brogaard, Theis I.SØlling. TheoChem 811(2007) 117-124
- 2- a) Wolff, M.E. Chem. Rev,63,(1963) 55.b) Stella, L.Angew.Chem.,Int.Ed.Engl. , 1983, 22, 337-422
- 3- P. Tarakeshwar, S. Manogaran. Journal of Molecular Structure (Theochem), 1997, 417, 255-263
- 4- P. Tarakeshwar, S. Manogaran. Journal of Molecular Structure (Theochem) , 1996, 365, 167- 181

Optimization parameters of cyclohexene epoxidation by hydrogen peroxide

Souheyla Boudjema ^{a,b*}, **Mostapha Zerrouki**^a, Abderrahim Coukchou-Braham^a

^a*Laboratory of Catalysis and Synthesis in Organic Chemistry, Faculty of Sciences, University of Tlemcen, Algeria.*

^b*Kasdi Merbah University - Faculty of hydrocarbons, renewable energy, earth sciences and universe, Ouargla 30000 - Algeria*

Abstract:

The aim of the present work is to identify the highest number of factors that control the oxidation of cyclohexene. The “full factorial design” method was preferred here. Based on a mathematical model that combines the effects of the processing factors, this approach was found to be much more reliable. A full factorial experimental design was adopted, based on the analysis of the experimental data. All five parameters, namely temperature, weight and loading of catalyst, purity of hydrogen peroxide and reaction time, were effective in cyclohexene conversion and selectivity of cyclohexane-1,2 diol. Temperature had the most significant effect among all independent variables. In this study, the reaction time and the two-way interaction between temperature and the catalyst weight were most significant. These optimum conditions were achieved at (1) catalyst weight of 0.05 g, (2) catalyst loading of 20 wt.% PVMo/Hmont, (3) reaction temperature of 70 °C, (4) purity of hydrogen peroxide of 60 % H₂O₂, and (5) reaction time of 9 h. Lewis acid sites from montmorillonite, Bronsted acid sites from polyoxometalates and peroxy species, could be used to catalyze the cyclohexene epoxidation to attain a high conversion efficiency (91 %), and a high selectivity to cyclohexane-1,2 diol (100 %).

Keywords: Factorial experimental design, Cyclohexene epoxidation, Optimization, Polyoxometalates, Vanadium.

Theoretical and experimental investigations on piceatannol /cyclodextrin complexes: molecular modeling studies

B Hanane Messiad^{a,b}, Tarek Yousfi^{a,c}, Rayenne Djemil^d, Habiba Amira-Guebailia^a

^aLaboratory of Applied Chemistry, 8 Mai 1945 Guelma University, Guelma 24000, Algeria

^bDepartment of Environmental Engineering, Faculty of Pharmaceutical Processes Engineering, Constantine 3 University, Constantine, Algeria.

^cBiotechnology Research Center (CRBT), UV 03, BP E73, New City, Ali Mendjli, Constantine, Algeria

^dLaboratory of Computational Chemistry and Nanostructures, 8 Mai 1945 Guelma University, Guelma 24000, Algeria,

Abstract:

In present work, the complexation of Trans 3, 5, 3', 4'-tetrahydroxystilbene, also known as piceatannol (PIC), with β -cyclodextrin (β -CD) was investigated by RP-HPLC in aqueous media and molecular modeling [1,2].

In which, β -CD was added to methanol/water mixtures mobile phases and the apparent formation constant of PIC / β -CD complex was determined. Within the concentration interval studied (0–4 mM), whenever the concentration of β -CD increased, retention time of PIC decreased; indicating an enhancement of solubility due to the formation of the complex which are in agreement with the result of the molecular modeling.

The study of molecular modeling shows that the orientation in which the A aromatic ring of PIC was directed toward the inner cavity of β -CD was named 'A' and that in which the 'B' aromatic ring is located inside the β -CD cavity was named 'B', and the hydroxyl groups are projected outside [3]. The results indicated that both orientations were favorable for the complexation of PIC/ β -CD. Additionally, the negative interaction energies obtained for a 1:1 stoichiometry suggest that the complexation process is exothermic and indicate that the PIC/ β -CD complex was highly stable and enthalpically driven. HOMO and LUMO investigations confirmed these results [4].

Keywords: Cyclodextrin; Piceatannol; HPLC; Molecular modeling

References:

- [1] H. Messiad, H. Amira-Guebailia, O. Houache, J. Chromatogr. B 926 (2013) 21.
- [2] H. Messiad, T. Yousfi, R. Djemil, H. Amira-Guebailia, C. R. Chimie xxx (2016) 10.
- [3] L. Lu, S. Zhu, H. Zhang, F. Li, S. Zhang, RSC. Adv. 5 (2015) 14114.
- [4] J. Q. Zhang, K. Lib, K. M. Jiang, Y. W. Cong, S. P. Pu, J. Lin, RSC Adv. 6 (2016) 17074.

Prédiction du coefficient de partage Octanol / Eau pour une série de composés aromatiques en utilisant l'étude QSPR

M. DIDI, I.TOUHAMI, H.HADDAG, D.MESSADI*

**Laboratoire de Sécurité Environnementale et Alimentaire
Faculté des sciences -Université Badji Mokhtar –Annaba-B.P12, Annaba Algérie.
E-mail : didi_sorayam@yahoo.fr*

Résumé :

Les composés aromatiques sont couramment utilisés dans la synthèse chimique des matières plastiques, des peintures, des colorants, des explosifs, des pesticides, des détergents, des parfums et des médicaments. Ces produits chimiques sont rejetés dans l'environnement et constituent une menace importante pour la santé humaine et la faune.

Le K_{ow} est le rapport entre la concentration à l'équilibre d'une substance chimique dans l'octanol et la concentration en cette même substance dans l'eau [1]. Il est utilisé pour estimer, de façon indirecte, la sorption d'une substance organique dans un sol.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la prédiction du coefficient de partage Octanol /Eau (K_{ow}) d'un ensemble de composés aromatiques [2] en utilisant les relations quantitatives structure / propriété (QSPR). Ces méthodes ont pour but : le gain de temps d'argent et de fiabilité d'analyse.

Nous avons utilisé des descripteurs moléculaires calculés à l'aide des logiciels de commerce afin d'établir des équations mathématiques pour la prédiction du K_{ow} [3].

Les 40 composés traités ont été séparés en deux sous-ensembles disjoints : 30 éléments pour le calcul du modèle, et 10 éléments pour sa validation statistique externe.

Mots clés : Composés aromatiques -Pollution - K_{ow} - relations quantitatives structure / propriété (QSPR) -Régression linéaire multiple / Algorithme Génétique (AG).

Référence :

[1]: www.dictionnaire-environnement.com

[2]: Subhash C . BASAK *and Denise Mills.Arkivoc.2005(ii)60-70

[3]: R. Todeschini, D. Ballabio, Consonni, A. Mauri and M. Pavan Milano Chemometrics and QSAR Research Group Moby Digs Professional – Version 1.0 – 2004.

Self-Assembled Monolayers of 2-Mercaptobenzimidazole on Palladium Density Functional Theory Study Approach

Ourida Mahmoudi^{1,2,3}, Tarik Bordjiba^{1,2}

¹Department of process engineering, 8 mai 1945-Guelma, Algeria, Mahmoudi_o@yahoo.fr

²Laboratory of Electrical Engineering of Guelma, 8 mai 1945-Guelma, Algeria, bordjiba_tarik@yahoo.ca

³Department of Chemistry, Badji-Mokhtar University, Annaba, Algeria

Abstract:

Recent trends in nanotechnology field involve the development of self-assembled monolayers (SAMs) for numerous applications [1]. Attention has been focused on self-assembled monolayers of the 2-mercaptobenzimidazole (2MBI) on a gold substrate [2]. However, Palladium seems to be a suitable substitute for gold for various purposes, and it is better than gold for others [3]. In the goal to a better comprehension of the formation of self-Assembled monolayers of 2-Mercaptobenzimidazole on palladium, this study emphasis on the interaction of 2-Mercaptobenzimidazole and the palladium atom. The density functional theory study (DFT) calculations [4] were performed on 2-Mercaptobenzimidazole (2MBI) and the complex: 2-Mercaptobenzimidazole-palladium atom (2MBI-Pd) and several quantum parameters are determined. This study reveals that palladium atom bonds with 2MBI molecule via nitrogen atom. The results of this work open new opportunities in the development of self-assembly monolayers of 2-Mercaptobenzimidazole molecule on unconventional substrate.

Keywords: 2-mercaptobenzimidazole, self-assembly, adsorption, density functional theory (DFT), energy gap, theoretical calculation, palladium.

References:

- [1] R.K. Shervedani, F. Yaghoobi, A. Hatefi-Mehrjardi, S.M. Siadat-Barzoki, Electrocatalytic activities of gold-5-amino-2-mercaptobenzimidazole-Mn⁺ self-assembled monolayer complexes (Mn⁺: Ag⁺, Cu²⁺) for hydroquinone oxidation investigated by CV and EIS, *Electrochimica Acta*, **2008**, 53, 4185.
- [2] L. Newton, T. Slater, N. Clark and A. Vijayaraghavan, Self assembled monolayers (sams) on metallic surfaces (gold and graphene) for electronic applications, *J. Mater. Chem. C*, **2013**, 1, 376.
- [3] Th. Doneux, F. Tielens, P. Geerlings, and Cl. Buess-Herman, Experimental and Density Functional Theory Study of the Vibrational Properties of 2-Mercaptobenzimidazole in Interaction with Gold, *J. Phys. Chem. A*, **2006**, 110, 11346.
- [4] D.K. Singh, E.-O. Ganbold, E.-M. Cho, C.M. Lee, S.I. Yang, S.-W. Joo, Tautomerism of a thiabendazole fungicide on Ag and Au nanoparticles investigated by raman spectroscopy and density functional theory calculations, *J Mol Struct*, **2013**, 1049, 464.

ATELIER 4 : MATHÉMATIQUES

New fractional Montgomery identity and Čebyšev type inequalities.

Aissaoui Fatima¹, Assia Guezane- Lakoud²

¹ *Laboratoire de Mathématiques Appliquées et de Modélisation, Université 08 Mai 45-Guelma, P.O. Box 401, Guelma 24000, Algérie. Adresse, e-mail: nisaoui@yahoo.fr*

² *Laboratoire de matériaux avancés, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhta Annaba, P.O. Box 12, 23000, Annaba, Algérie. Adresse, e-mail: a_guezane@yahoo.fr*

Abstract:

New fractional Montgomery identity for fractional Riemann-Liouville integrals are established and new Čebyšev type inequalities.

Keywords: Čebyšev type inequalities, Montgomery identities, Riemann-Liouville fractional integrals.

References:

- [1] A. Guezane-Lakoud and F. Aissaoui New Results for Čebyšev type inequalities In-tegral Transforms and Special Functions, Vol. 25, No. 9, 711-720.
- [2] K. B. Oldham, Fractional differential equations in electrochemistry, Advances in En-gineering, Software, vol.41, no.1, pp. 9-12,204.
- [3] Kai Diethelm Fractional Differential Equations Theory and Numerical Treatment February 13, 2003. 103.

Traitement numérique des équations Intégrales et intégral-différentielles non linéaires de volterra

M. Es-s. Aries, H. Guebbai

E-mail : msaliharies@gmail.com

Résumé:

Le but de ce travail est d'étudier l'existence et l'unicité pour l'équation intégral-différentielle non linéaire de l'équation de Volterra et on va étudier l'approximation de la solution par la méthode de Nyström.

Mots Clés: Volterra equation, integro-differential, fix point, Nonlinear, equation, Nostrum method.

Référence :

- [1] Tokui Sato, Sur L'équation Intégrale non Linéaire de Volterra. Compositio Mathmatca. (1953) Tome 11, p 271-290.
- [2] H. Bunner, The numerical treatment of Volterra integro-differential equations, with unbounded delay. Journal of Computational and Applied Mathematics. (1989)28, p5-23.

Contribution à l'étude d'une classe de systèmes de réaction-diffusion avec une méthode de compacité

Nabila Barrouk¹, Abdelkader Moumeni²

¹ Université Mohamed Cherif Messaadia, Faculté des sciences et de technologie, Département de mathématiques-Informatique, B.P. 1553 Souk-Ahras 41000, Algérie

² Laboratoire de Mathématiques, Dynamique et Modélisation, Université Badji Mokhtar Annaba, Faculté des sciences, Département de mathématiques, B.P. 12 Annaba 23000, Algérie.

¹ barrouknabila@hotmail.fr, ² inemuom@yahoo.fr

Résumé :

Le but de ce travail est de prouver l'existence globale en temps des solutions d'une classe pour les systèmes de réaction diffusion

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - d_1 \Delta u = f(u, v) & \text{sur }]0, +\infty[X \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial t} - d_2 \Delta u - d_3 \Delta v = g(u, v) & \text{sur }]0, +\infty[X \Omega. \end{cases}$$

En combinant les méthodes de semi groupes compacts et certaines estimations L^1 , nous montrons que les solutions globales existent pour une large classe de fonctions f et g .

Les mots-clés: Semi groupe, solution locale, solution globale, systèmes de réaction diffusion.

References:

- [1] N. D. Alikakos, L^p -bounds of solutions of reaction-diffusion equations, Comm. Differential Equations 4 (1979), 827-868.
- [2] S. L. Hollis, R. H. Martin And M. Pierre, Global existence and boundedness in reaction-diffusion systems. SIAM J. Math anal, 18: 744-761, 1987.
- [3] K. Masuda, On the global existence and asymptotic behaviour of solution of reaction-diffusion equations. Hokkaido Math, J. 12: 360-370, 1983.
- [4] A. Moumeni, N. Barrouk, Existence of global solutions for systems of reaction-diffusion with compact result, IJPAM. 102(2) (2015), 169-186.
- [5] A. Moumeni, N. Barrouk, Triangular reaction-diffusion systems with compact result, GJPAM. 11(6) (2015), 4729-4747.
- [6] A. Moumeni, L. Salah Derradji, Global existence of solution for reaction diffusion systems, IAENG, Int. J. Appl. Math. 40(2) (2010), 84-90.

Fixed point theorems for single-valued and multivalued operators on set endowed with one or two vector valued b-metrics

S. Bazine¹, F. Ellagoune²

¹Laboratory of applied mathematics and modeling, univ Oum El Bouaghi, bazine-safia@hotmail.fr

²Laboratory of applied mathematics and modeling, univ 8 mai 1945, fellagoune@gmail.com

Abstract:

To our best knowledge, the classical Banach contraction principle was extended for mappings on spaces endowed with vector-valued metrics by Perov in 1964. The concept of b-metric space was introduced by Bakhtin and extensively used by Czerwik. In our work, we prove some common fixed point results for two mappings satisfying generalized contractive condition in a b-metric space, where the b-metric is not necessarily continuous. Many authors in their work have used the b-metric spaces in which b-metric function is continuous, but the techniques used here can be employed in the setup of discontinuous b-metric spaces. we focused on Hardy-Rogers type contractions and present some common fixed point results in generalized b-metric spaces for single-valued and multivalued operators.

Key words: b-metric spaces, vector valued, convergent matrix.

References:

- [1] I. A. Bakhtin, The contraction mapping principle in almost metric space, *Funct. Anal, Unianowsk Gos. Ped. Inst*, **1989**, 30, 26-37.
- [2] S. Czerwik, Nonlinear set-valued contraction mappings in b-metric spaces, *Atti Sem. Mat. Fis. Univ. Modena*, **1998**, 46, 263-276.
- [3] A. I. Perov, On the Cauchy problem for a system of ordinary differential equations, *Pviblizhen. Met. Reshen. Differ. Uvavn*, **1964**, 2, 115-134.

Regularized approximation sinc collocation method for Fredholm integral equations of the first kind

T. Bechouat¹, N. Boussetila²

¹Department of Mathematics and Informatics, University Souk Ahras, Souk Ahras 41000, Algeria.

E-mail : t.bechouat@gmail.com

²Department of Mathematics, University 8 Mai 1945 Guelma, Guelma 24000, P.O. Box 401 Guelma, Algeria.

E-mail : n.boussetila@gmail.com

Abstract :

In the present paper, we solve numerically Fredholm integral equations of first kind, which is known to be an ill-posed problem, by regularized approximation method with Sinc collocation method. The convergence rates can be obtained under the suitable choices of regularization parameters and the number of measured points. Finally, numerical results are given to demonstrate the effectiveness of the new regularization approximation method.

Keywords: Fredholm integral equations of the first kind, Sinc functions, Tikhonov regularization method.

Stability in totally nonlinear neutral dynamic equations on time scales

Belaid Malik¹, Ardjouni Abdelouaheb²

¹ *Department of Mathematics, University of Annaba, malikbelaid51@gmail.com*

² *Department of Mathematics and Informatics, University of Souk Ahras, abd_ardjouni@yahoo.fr*

Abstract:

Let T be a time scale which is unbounded above and below and such that $0 \in T$. Let $\text{id-}\tau: [0, \infty) \cap T \rightarrow T$ be such that $(\text{id-}\tau)([0, \infty) \cap T)$ is a time scale. We use the Krasnoselskii-Burton's fixed point theorem to obtain stability results about the zero solution for totally nonlinear neutral dynamic equation with variable delay. where f^Δ is the Δ -derivative on T and f^Δ is the Δ -derivative on $(\text{id-}\tau)(T)$. The results obtained here extend the work of Ardjouni, Derrardjia and Djoudi [2].

Mots Clés: Fixed points, neutral dynamic equations, stability, time scales.

Références:

- [1] A. Ardjouni, I. Derrardjia and A. Djoudi, Stability in totally nonlinear neutral differential equations with variable delay, Acta Math. Univ. Comenianae, 83 (2014), 119-134.
- [2] M. Bohner, A. Peterson, Dynamic Equations on Time Scales, An Introduction with Applications, Birkhauser, Boston, 2001.
- [3] M. Bohner, A. Peterson, Advances in Dynamic Equations on Time Scales, Birkhäuser, Boston, 2003.
- [4] T. A. Burton, Liapunov functionals, fixed points and stability by Krasnoselskii's theorem, Nonlinear Stud. 9 (2001), 181-190.

Asymptotic comportement of the coagulation equation of water droplets with condensation-evaporation process

Hanane Belhireche

Laboratory of applied mathematics and modeling, univ 8 mai 1945

hanane.belhireche@gmail.com

Abstract:

In this work the equation of transport, coagulation and condensation-evaporation process of water droplets in a strip delimited by two horizontal planes is considered. We prove, under the hypothesis of smallness of the data, the existence and the uniqueness of the global solution to this equation. The convergence of the global solution to the stationary solution is also proved. To obtain this result, we use the method of characteristics, which, because of the presence of an integral operator of coagulation, needs to be combined with the estimates of the solution in some functional spaces, in particular in L^∞ norm.

Key words: Integro-PDE, method of characteristics, coagulation equation.

References:

- [1] D. Ascoli, C. Selvaduray Steave: Wellposedness in the Lipschitz class for a hyperbolic system arising from a model of the atmosphere including water phase transitions. *Nonlinear Differ. Equ. Appl.*, **2014**, vol. 21, 263-287.
- [2] H. Belhireche, M. Z. Aissaoui, H. Fujita Yashima: Solution globale de l'équation de coagulation des gouttelettes en chute. *Ren. Sem. Mat. Univ. Polit. Torino*, **2012**, vol.70, 261–278.
- [3] S. Selvaduray, H. Fujita Yashima: Equazioni del moto dell'aria con la transizione di fase dell'acqua nei tre stati : gassoso, liquido e solido. *Accad. Sci. Torino, Memorie Cl. Sci. Fis., Serie*, **2011**, vol. 35, 37-69.

Applying the Powell's Symmetrical Technique to Conjugate Gradient Methods with the Generalized Conjugacy Condition

Noureddine Benrabia

E- mail : noureddinebenrabia@yahoo.fr

Abstract:

This work proposes new conjugate gradient method for unconstrained optimization by applying the Powell symmetrical technique in a defined sense. Using the Wolfe line search conditions, the global convergence property of the method is also obtained based on the spectral analysis of the conjugate gradient iteration matrix and the Zoutendijk condition for steepest descent methods. Preliminary numerical results for a set of 86 unconstrained optimization test problems verify the performance of the algorithm and show that the Generalized Descent Symmetrical Hestenes-Stiefel algorithm is competitive with the Fletcher-Reeves (FR) and Polak-Ribière-Polyak (PRP+) algorithms.

Keywords: Conjugate gradient method. Symmetrical technique. Generalized conjugacy condition. Spectral analysis. Global convergence.

References:

- [1] Al-Baali, M., Descent property and global convergence of the FletcherReeves method withinexact line-search, IMA J. Numer. Anal. 5, 121-124 (1985).
- [2] Liu, D., Xu, G., Applying Powells symmetrical technique to conjugate gradient methods, Computational Optimization and Applications, DOI 10. 1007/s10589-009-9302-1. (2009).
- [3] Perry, A., A modified conjugate gradient algorithm, Oper. Res. Tech.Notes 26(6), 1073–1078 (1978).
- [4] Hestenes, M. R., Stiefel, E., Methods of conjugate gradients for solving linear systems, J.Res. Nat. B ur. Stand. 49(6), 409-439 (1952).
- [5] Dai, Y.H., Liao, L. Z., An efficient hybrid conjugate gradient method for unconstrained optimization, Ann. Oper. Res., 103 (2001) 33-47.

Equation system describing the radiation intensity and the air motion with the water phase transition

M. Bensaad¹, H. Belhirche², S. Selvaduray³

*Laboratoire de mathématiques appliquées et de modélisation, Université 8 Mai 1945, Guelma*¹²

*Università di Torino, Italy.*³

*E-mail: bensaad.meryem@gmail.com*¹

Abstract:

In this paper we consider the equation system describing the motion of the air and the variation of the radiation intensity and the quantity of water droplets in the air, including also the process of water phase transition. Under a suitable condition we prove the existence and uniqueness of the local solution. By eliminating the approximation by regularization of vapor density and by including the equation of radiation, this result improves previous ones.

Mots Clés : Radiation intensity, local solution.

Référence :

- [1] Bensaad, M., Ellaggoune, F.: Solution stationnaire du système d'équations de la radiation et du mouvement d'un gaz visqueux et calorifique. Rend. Sem. Mat. Univ. Poli. Torino. Vol. 72 (2014), pp. 173-194.
- [2] Selvaduray S. C., Fujita Yashima H.: Equazioni del moto dell'aria con la transizione di fase dell'acqua nei tre stati: gassoso, liquido e solido. Mem. Cl. Sci. Fis. Mat. Nat. Accad. Sci. Torino, Serie V, vol. 35 (2011), pp. 37-69.

Asymptotic stability in delay nonlinear fractional differential equations

Hamid BOULARES

Abstract:

In this paper, we give sufficient conditions to guarantee the asymptotic stability of the zero solution to a kind of delay nonlinear fractional differential equations of order α ($1 < \alpha < 2$). By using the Banach's contraction mapping principle in a weighted Banach space, we establish new results on the asymptotic stability of the zero solution provided that $g(t, 0) = f(t, 0, 0) = 0$, which include and improve some related results in the literature.

References:

- [1] S. Abbas, Existence of solutions to fractional order ordinary and delay differential equations and applications, *Electronic Journal of Differential Equations*, Vol. 2011 (2011), No. 09, pp. 1-11.
- [2] R. P. Agarwal, Y. Zhou, Y. He, Existence of fractional functional differential equations, *Computers and Mathematics with Applications* 59 (2010) 1095-1100.
- [3] T. A. Burton, B. Zhang, Fractional equations and generalizations of Schaefer's and Krasnoselskii's fixed point theorems, *Nonlinear Anal.* 75 (2012) 6485-6495.
- [4] F. Chen, J. J. Nieto, Y. Zhou, Global attractivity for nonlinear fractional differential equations, *Nonlinear Analysis: Real World Applications* 13 (2012) 287-298.
- [5] F. Ge, C. Kou, Stability analysis by Krasnoselskii's fixed point theorem for nonlinear fractional differential equations, *Applied Mathematics and Computation* 257 (2015) 308-316.
- [6] F. Ge, C. Kou, Asymptotic stability of solutions of nonlinear fractional differential equations of order $1 < \alpha < 2$, *Journal of Shanghai Normal University*, Vol. 44, No. 3, 284-290.
- [7] A. A. Kilbas, H. M. Srivastava, J. J. Trujillo, *Theory and Applications of Fractional Differential Equations*, Elsevier, 2006.
- [8] I. Podlubny, *Fractional Differential Equations*, Academic Press, San Diego, 1999.

Une nouvelle classe des méthodes du gradient conjugué pour l'optimisation sans contraintes

Boumediene Amina¹. Hadji Ghania²

⁽¹⁾ Université mouhamed Cherif Messadia Souk-Ahras. Email: aminaboumediene69@yahoo.fr

⁽²⁾ Université mouhamed Cherif Messadia Souk-Ahras. Email: hadjighania@yahoo.fr

Résumé:

On s'intéresse dans ce travail à une nouvelle classe des méthodes du gradient conjugué introduite par Moh Rivaie, Mustafa et Abdelrahman Abashar . On fera une synthèse des derniers travaux concernant ces méthodes.

Mots clés : gradient conjugué, Algorithme ; recherche linéaire exacte ; direction de descente ; convergence globale.

Référence:

[1]Moh . Rivaie, M.Mustafa Mamat; and Abdelrahman Abashar , (2015).A new class of nonlinear conjugate gradient coefficients with exact and inexact line searches. App. Math Comput. 268; 1152-1163.

[2].Mohd, Rivaie, Abashar; M.Mamat; I.Mod (2014) the convergence properties of a new type of conjugate gradient methods.

Etude de la rapidité de la convergence de la MINRES pré-conditionnée pour la résolution du problème généralisé de Stokes discret

A. Chibani N. Kechkar

*Département de Mathématiques
Université Frères Mentouri, Constantine.
almchibani@gmail.com kechkar_nasser@yahoo.com*

Résumé :

Dans ce travail, le pré-conditionnement de la méthode itérative MINRES (Minimal Residual Method) est analysé sur le problème généralisé de Stokes discrétisé au moyen de la méthode mixte $Q1-Q0$ (vitesse bilinéaire-pression constante) stabilisée. La rapidité de la convergence de la MINRES pré-conditionnée dépend des paramètres de stabilité de la méthode $Q1-Q0$. Des résultats obtenus en appliquant la MINRES pré-conditionnée sont présentés pour des valeurs représentatives du paramètre de stabilisation.

Mots clés : Equations de Stokes, Eléments finis mixtes, Stabilisation, Méthodes itératives.

Classification MSC2010 : 74S05, 65F10, 65N30

Référence :

- [1] N. KECHKAR and D. SILVESTER, The stabilization of low order mixed finite element methods for incompressible flow, Vol 2, pp.111-116, Computational Mechanics Publications, 1989.
- [2] D. SILVESTER and N. KECHKAR, Stabilized bilinear-constant velocity-pressure finite elements for the conjugate gradient solution of the Stokes problem, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 79, pp. 71–86, North Holland, 1990.
- [3] H. ELMAN, D. SILVESTER and A. WATHEN, Finite elements and fast iterative solvers with applications in incompressible fluid dynamics, Oxford University Press, 2005.
- [4] Y. SAAD, Iterative Methods for Sparse Linear System, PWS Publishing, Boston 1996, Second Edition, SIAM, Philadelphia, 2003.

The approximate solution of the fractional relaxation equation using Bashforth Moulton predictor-corrector scheme

A. Chidouh, A. Guezane-Lakoud

Laboratory of Dynamic Systems, Houari Boumediene University, Algiers, Algeria, m2ma.chidouh@gmail.com

Laboratory of Advanced Materials, Badji Mokhtar-Annaba University, Annaba, Algeria, a_guezane@yahoo.fr

Abstract:

In this work, by means of some fixed point theorems, we establish the existence and uniqueness of the positive solution of the fractional relaxation equation. The analysis is based on the method of upper and lower solutions. The results are illustrated by a numerical example using MATLAB. Precisely we use the Bashforth Moulton predictor-corrector scheme to approximate the solution and well describe the relaxation phenomena.

Key words: Fixed point theorem, Mittag-Leffler function, relaxation phenomena, Bashforth Moulton scheme, positive solution, integral equations.

References:

- [1] M. Caputo, F. Mainardi, A new dissipation model based on memory mechanism, *Fractional Calculus and Applied Analysis*, **2007**, 10, 309.
- [2] K. Diethelm, An algorithm for the numerical solution of differential equations of fractional order, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, **1997**, 5, 1.
- [3] K. Diethelm, N. J. Ford, A. D. Freed, A predictor-corrector approach for the numerical solution of fractional differential equations, *Nonlinear Dynamics*, **2002**, 29, 3.

Solving nonlinear integral equations in the Urysohn form by Newton-Kantorovich-quadrature method

Djenaoui Meriem, Jafar Saberi-Nadjafi, Mahdi Heidari

Najafi141@gmail.com, Mheidari_mail@yahoo.com, Djenaoui.m@hotmail.com

Résumé:

The Newton-Kantorovich method is a well-known method for solving nonlinear integral equations. This method attempts to solve a sequence of linear integral equations. In this paper, we develop a new method, which is a combination of the Newton-Kantorovich and quadrature methods. The new method solves the nonlinear integral equations of the Urysohn form in a systematic procedure. Some numerical examples are provided, and the obtained numerical approximations are compared with the corresponding exact solutions.

Mots Clés: Non linear integral equation, Newton-Kantorovich method, Quadrature, Urysohn integral equation

Référence:

- [1] K.E. Atkinson, The numerical solution of integral equations of the second kind, Cambridge University Press, 1997.
- [2] A.D. Polyanin, A.V. Manzhirov, Handbook of integral equations, CRC Press, 2008.
- [3] J.Kando, Integral equations, Oxford University press, Kodansha Ltd, 1991.

Sur le nombre maximum de cycles limites pour une classe généralisée des systèmes différentiels polynomiaux

S. Ellaggoune¹, S. Badi²

Laboratoire de mathématiques appliquées et de modélisation, Université 8 Mai 1945, Guelma

E-mail: sellaggoune@gmail.com¹, badisabrina@yahoo.fr²

Résumé :

On étudie le nombre maximum de cycles limites qui bifurquent des orbites périodiques du centre linéaire $\dot{x}=y$ et $\dot{y}=-x$ perturbé par une classe généralisée d'équations différentielles polynomiales comme suit : $\dot{x} = y - f_1(x, y)y$, $\dot{y} = -x - g_2(x, y) - f_2(x, y)y$,
où $f_1(x, y) = \varepsilon f_{11}(x, y) + \varepsilon^2 f_{12}(x, y)$, $f_2(x, y) = \varepsilon f_{21}(x, y) + \varepsilon^2 f_{22}(x, y)$
et $g_2(x, y) = \varepsilon g_{21}(x, y) + \varepsilon^2 g_{22}(x, y)$, où f_{1i} , f_{2i} , g_{2i} de degré l , m et n respectivement pour $i = 1, 2$, ε est un petit paramètre.

On détermine ce nombre maximum pour cette classe de systèmes en utilisant la méthode de la moyenne du premier et du second ordre. De plus, on donne un exemple pour lequel cette borne est atteinte.

Mots Clés : cycle limite, méthode de la moyennisation, orbite périodique.

Références:

- [1] J. Llibre, C. Valls, *Limit cycles for a generalization of polynomial Liénard differential systems*. Chaos Solitons Fractals, **2013**, V 46, 65--74.
- [2] J. A. Sanders, F. Verhulst, *Averaging methods in nonlinear dynamical systems*, Applied Mathematical Sciences, 59, Springer-Verlag, New York, **1985**. x+ 247 pp.
- [3] F. Verhulst, *Nonlinear differential equations and dynamical systems*, Universitext, Springer-Verlag, Berlin, **1996**. x+ 303 pp.

Approximation Stochastique dans un Problème de Calibration Non linéaire

A. ELMOUMEN¹, A. DAHMANI².

Centre Universitaire de Tamanrasset

Résumé :

Dans ce travail on s'intéressera aux problèmes de calibration non linéaire avec la présence des erreurs aléatoires. Les erreurs aléatoires fonctionnelles peuvent être dues au fait que la fonction f est connue approximativement. Elle est le résultat de mesure comme elles peuvent être dues aux erreurs d'arrondi. On proposera des méthodes itératives et on démontre leur convergence vers la solution du problème de calibration. Nous illustrons en fin notre démarche par des exemples numériques.

Mots clés : Condition Markovis ; Borel-Cantelli lemme ; procédure de Robbins-Monro

Référence:

- [1] J.-C. Deville et C.-E. Sarndal, Calibration Estimators in Survey Sampling, JASA, 1992.
- [2] Ding, F., Wang, Y. J., & Ding, J. (2015): Recursive least squares parameter estimation algorithms for systems with colored noise using the filtering technique. Digit. Signal Process, 37, 100-108.
- [3] Ding, J., Fan, C., & Lin, J. (2013): Auxiliary model based parameter estimation for dual-rate output error systems with colored noise. Applied Mathematical Modelling, 37(6), 4051-4058.
- [4] S.R. Kulkarni, C.S. Horn. An alternative proof for Convergence of stochastic approximation algorithms. IEEE Transactions on Automatic Control, vol. 41, N3; MARCH 1996, 419-424.

Higher Order Boundary Value Problems at Resonance on an Unbounded Interval

Assia Frioui¹, Assia Guezane- Lakoud², Rabah Khaldi³

¹ *Laboratoire de Mathématiques Appliquées et de Modélisation, Université 08 Mai 45-Guelma, P.O. Box 401, Guelma 24000, Algérie. Adresse, e-mail: afrioui@yahoo.fr*

² *Laboratoire de matériaux avancés, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhta Annaba, P.O. Box 12, 23000, Annaba, Algérie . Adresse, e-mail: a_guezane@yahoo.fr*

³ *Laboratoire de matériaux avancés, Faculté des Sciences, Université Badji Mokhta Annaba, P.O. Box 12, 23000, Annaba, Algérie . Adresse, e-mail: rkhadi@yahoo.fr*

Abstract:

The aim of this paper is the solvability of a class of higher order differential equations with initial conditions and an integral boundary condition on the half line. Using coincidence degree theory by Mawhin and constructing suitable operators, we prove the existence of solutions for the posed resonance boundary value problems..

Keywords: Fixed point theorem, coincidence degree theory of Mawhin, Fredholm operators, Resonance..

References:

- [1] Y. Cui; Solvability of second-order boundary-value problems at resonance involving integral conditions. *Electron. J. Differ. Equ.*, 2012 (2012), 45, 1-9.
- [2] G. Cupini, C. Marcelli, F. Papalini; On the solvability of a boundary value problem on the real line. *Bound. Value Probl.*, 2011 (2011), no. 26,
- [3] Z. Du, F. Meng; Solutions to a second-order multi-point boundary value problem at resonance. *Acta Math. Sci.* 30(5) (2010), 1567{1576.
- [4] A. Guezane-Lakoud, A. Frioui, R. Khaldi; Third Order Boundary Value Problem with Integral Condition at Resonance, *Theory and Applications of Mathematics & Computer Sciences* 3(1) 2013), 56{64.

Existence de la solution globale du système d'équations du mouvement vertical de l'air dans une cheminée.

S.Ghomrani

Laboratoire de mathématiques appliquées et de modélisation, Université 8 Mai 1945, Guelma

E-mail: sarra.ghomrani@hotmail.fr

Résumé :

Dans le précédent travail nous avons construit une solution numérique du système d'équations décrivant le mouvement vertical ascendant de l'air provoqué par la condensation, en utilisant un système d'équations stationnaire dans le domaine $0 < z < \bar{z}_1$. Dans le présent travail nous étudions l'existence et l'unicité de la solution de cette dernière équation, solution 'globale' dans le domaine $0 < z < \bar{z}_1$.

Mots Clés : Solution globale, mouvement vertical de l'air.

Référence :

- [1] Ghomrani, S., Marin Antuna, J., Fujita Yashima, H.: Un modelo de la subida del aire ocasionada por la condensacion del vapor y su calculo numerico. Rev. Cuba Fis., vol. 32 (2015), pp 3-8.
- [2] Cotton, W., Bryan, G., van den Heever, S.: Storm and cloud dynamics (II ed.). Academic Press, 2011.

Une nouvelle classe de coefficients de gradient conjugué non linéaire avec des recherches linéaires exactes et inexacts

*Hadji Ghania*¹, Boumediene Amina²

⁽¹⁾ Université mouhamed Cherif Messadia Souk-Ahras. Email: hadjighania@yahoo.fr

⁽²⁾ Université mouhamed Cherif Messadia Souk-Ahras. Email: aminaboumediene69@yahoo.fr

Résumé:

Les méthodes de gradient conjugué ont joué un rôle très important pour la résolution des problèmes d'optimisation sans contraintes de grande taille. Dans ce travail nous proposons une nouvelle famille de coefficients GC qui possèdent la condition de descente suffisante et des propriétés de convergence globale. Cette nouvelle B_k est une extension de la déjà prouvée B_k RMIL de Rivaie et al.[2]. Le résultat de la convergence globale est établi en utilisant des recherches linéaires exactes et inexacts. Les tests numériques montrent que la performance de la nouvelle formule proposée est assez similaire à B_k RMIL et elle est plus efficace et supérieur que l'autre bien connue.

Mots clés : Gradient conjugué, direction de descente suffisante ; convergence globale.

Références:

- [1] M.AL.Baali, Descent property and global convergence of Fletcher-Reeves method with inexact line search, IMA.J.Numer.Anal.5 (1985) 121-124.
- [2] M.Rivaie, M.Mustafa.LW.June,I.Mohd, A new class of nonlinear conjugate gradient coefficient with global convergence properties, App.Math.Comp;218(2012) 11323-11332.
- [3] N.Andrei, An unconstrained optimization test functions collection, Adv. Model.Optim10 (2008) 147-161.

Direct Numerical Method For Solving A Nonlinear Fractional Differential Equation

Ahmed HALLACI¹, Abderrazak CHAOUI²

^{1,2} *Laboratoire de Mathématiques Appliquées et de Modélisation, Faculté de Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 8 Mai 1945 Guelma. B.P.*

401 Guelma 24000 Algérie

¹ *hal.ahmedguelm2@gmail.com*

² *chaoui_math@yahoo.fr*

Abstract:

In this paper, we propose a new numerical method to solve a nonlinear fractional differential equation with arbitrary order. Firstly, we write this equation in the form of Volterra integral equation of second kind, then, we define the collocation points, and by using the Trapezoidal integration method we get a recurrent formula, that's gives us our solution directly. The convergence of this method is proved, and some numerical examples are shown to confirm the effectiveness of our method.

Keywords: Fractional differential equation, Volterra integral equation, Nonlinear equation, Nystrom method.

References:

- [1] K. E. Atkinson, **1997**, The numerical solution of integral equations of the second kind, Cambridge university press.
- [2] Ahmad, B., Nieto, J. J., **2009**. Existence results for nonlinear boundary value problems of fractional integrodifferential equations with integral boundary conditions. Boundary value problems, 2009(1), no 1, p. 1.
- [3] Borzabadi, A. H., Fard, O. S., **2009**. A numerical scheme for a class of nonlinear Fredholm integral equations of the second kind. Journal of Computational and Applied Mathematics, 232(2), 449-454.
- [4] Podlubny, I., **1998**. Fractional differential equations: an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications, 198. Academic press.

Etude d'un système d'équations modélisant le mouvement d'un gaz visqueux et calorifère avec la surface libre

Kh. Hallaci¹, H. Fujita Yashima², M.Z. Aissaoui³

^{1,2,3}Laboratoire de mathématiques appliquées et de modélisation, Université 8 Mai 1945, Guelma
E-mail: khadidjahallaci@gmail.com,¹ hisaofujitayashima@qq.com,² aissaouizine@gmail.com³

Résumé :

Nous considérons le problème de l'inter-surface libre entre deux fluides distincts, Particulièrement entre l'air et l'eau liquide, compte tenu également de l'évaporation de la surface du liquide, qui provoque l'échange d'énergie par la chaleur latente. Nous nous intéressons tout d'abord à l'existence et à l'unicité de la solution des équations du mouvement d'un gaz visqueux et calorifère avec la surface mobile fixée.

Mots Clés: surface libre, changement des variables, système d'équations linéarisées.

Références:

- [1] Atusi Tani : Two-phase free boundary problem for compressible viscous fluid motion , J.Math. Kyoto Univ.(JMKYAZ), 24-2 (1984), p. 243-267.
- [2] H.Fujita Yashima : Modélisation de la physique des fluides, cours de l'université de Guelma, 2010-2011.
- [3] Yanjin Wang et Zhouping Xin : Vanishing Viscosity and surface tension limits of incompressible viscous surface waves. arXiv :1504.00152.

Solvability of a multipoint boundary value problem

Khaldi Rabah¹, Assia Guezane-Lakoud² and Hamidane Nacira³

Laboratory of Advanced Materials, Faculty of Sciences,
Badji Mokhtar-Annaba University,

Email: , ¹rkhalidi@yahoo.fr, , ²a_guezane@yahoo.fr, ³nhamidane@yahoo.com

Abstract:

The aim of this work is to study a multipoint boundary value problem for second order ordinary differential equation which is a mathematical model for various phenomena of physics and chemistry, by applying upper and lower solutions method with Schauder's fixed point Theorem. Our nonlinearity depending on the first derivative, it is continuous and satisfying Nagumo condition.

Keywords: boundary value problem, lower solution, upper solution, fixed point theorem.

References:

- [1] W. Feng and J.R.L. Webb, Solvability of m-point boundary value problems with nonlinear growth, *journal of mathematical analysis and applications*, 212 (1997), 467–480.
- [2] J.R. Garef, L. Kong, F.M. Minhos and J. Fialho, On the lower and upper solution method for higher order functional boundary value problems, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, Vol. 5(2011), 133-146.
- [3] H. Lian, J. Zhao and R. P. Agarwal, Upper and lower solutions method for nth-order BVPs on an infinite interval, *Boundary Value Problem*, 2014, 2014: 100.
- [4] A.K. Verma and R.P. Agarwal, Upper and lower solutions method for regular singular differential equations with quasi-derivative boundary conditions, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Vol. 17, Issue 12(2012), 4551-4558.

Fractional Neutral Integro differential Equation with Nonlocal conditions in a Banach space

Harrat Aicha

Laboratory of applied mathematics and modeling, univ 8 mai 1945, fellaggoune@gmail.com

Abstract:

In this work, we are going to study a new class fractional order nonlinear differential equations with impulsive terms and nonlocal conditions to prove the existence of solution by using Krasnoselskii's fixed point theorem.

Key words: fractional integrodifferential equations, neutral equation, Krasnoselskii fixed point theorem.

References:

- [1] Y. Zhou, F.Jiao, Existence of mild solutions for Fractional neutral evolution equations, Computers and Mathematics With Applications 59(2010)1063-1077.
- [2] K. Diethelm, The analysis of fractional differential equations, Lecture Notes in Mathematics, 2010.
- [3] A. A. Kilbas, H. M. Srivastava, J. J. Trujillo, Theory and applications of fractional differential equations, Elsevier Science B.V., 2006.
- [4] K. S. Miller, B. Ross, An introduction to the fractional calculus and differential equations, John Wiley, 1993.

Two sided estimates of N-points Pade approximants

Fahima Hebhoub

Laboratoire LAMAHIS, Département des Mathématiques, Faculté des Sciences, Université 20 Aout 55 Skikda

Abstract:

In [1] J. Gilewicz present a new developments of the approximation of smooth functions by weighted means of N- points Pade approximant by exploiting the properties of two sided estimates of Stieltjes functions (TSE). In this work we try to characterize other functions having the TSE property rather than convex functions chosen by the authors.

Key Words: Rational approximation, Pade approximant

MSC 2000: 41A21

References:

- [1] J. Gilewicz , R. Jedynek Approximation of smooth functions by weighted means of N-point Pade approximants Ukrainian Mathematical Journal (2014); 65-76
- [2] R. Jedynek, J. Gilewicz, Approximation of the integrals of the gaussian distribution of asperity heights in the Greenwood-Tripp contact model of two rough surfaces revisited, J. Applied Mathematics (2013) , Article ID 459280.

Sur l'existence de la solution de l'équation de coagulation et de fragmentation de gouttelettes de rayon positif en chute

W.Kaidouchi¹

Laboratoire de mathématiques appliquées et de modélisation, Université 8 Mai 1945, Guelma

*E-mail: kaidouchi.wahida@gmail.com*¹

Résumé :

Nous considérons l'équation intégral-différentielle qui décrit la chute et le processus de coagulation et de fragmentation des gouttelettes. En construisant les solutions approchées de l'équation de coagulation-fragmentation avec épaisseur de collision positive, nous démontrons l'existence et l'unicité de la solution de l'équation approchée pour tout $n > 0$, et en vérifiant leur convergence on démontre l'existence de la solution faible dans un espace de mesure.

Mots Clés : Solution approchée, coagulation-fragmentation, solution faible.

Références:

- [1] Da Costa, F. P.: Existence and uniqueness of density conserving solutions to the coagulation-fragmentation equations with strong fragmentation. *J. Math. Anal. Appl.*, vol. 192, pp. 892-914, (1995).
- [2] Can, J. : Asymptotic behaviour of solutions to the coagulation-fragmentation equations. I. The strong fragmentation case. *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh.*, vol. I21A, pp. 231-244, (1992).
- [3] Ball, J. M., Carr, J.: The discrete coagulation-fragmentation equations: Existence, uniqueness, and density conservation. *J. Stat. Phys.*, vol. 61, pp. 203-234, (1990).

Formation et transformation des dunes sous les effets du vent

Ammar. KHELLAF¹, Hisao FUJITA YASHIMA²

^{1,2} *Laboratoire de Mathématiques Appliquées et de Modélisation, Faculté de Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 8 Mai 1945 Guelma. B.P. 401 Guelma 24000 Algérie*

¹ amrlasix@gmail.com, ² hisaofujitayashima@qq.com

Résumé :

On s'intéresse dans ce travail à la modélisation mathématique de la formation et la transformation des dunes de sable sous les effets de cisaillement du vent. Les équations des granulaires ont des aspects similaires aux équations des fluides visqueux et incompressibles, et il est utile d'en faire la comparaison. Toutefois on ne peut pas déduire les caractéristiques des équations de la mécanique granulaire à partir des équations de Navier-Stokes. Donc, ce travail présente une nouvelle description cohérente avec les concepts granulaires et le mouvement du vent.

Keywords: Équations de Navier-Stokes, milieu granulaire, collision, friction.

References:

- [1] Cannarsa, P., Cardaliaguet, P.: Representation of equilibrium solutions to the table problem for growing sandpiles. *J. Eur. Math. Soc.*, vol. 6 (2004), pp. 1-30.
- [2] Pudasaini, S. P., Hutter, K.: *Avalanche dynamics - dynamics of rapid flows of dense granular avalanche*. Springer, 2007.
- [3] Pischiutta, M. et al.: Mathematical modelling for the evolution of aeolian dunes formed by a mixture of sands : entrainment-deposition formulation *Comm. Appl. Ind. Math.*, vol. 2 (2011), pp. 97-117.

Existence and localization of positive solutions for a fractional boundary value problem at resonance

S. Kouachi¹, A. Guezane-Lakoud¹, F. Ellagoune²

¹ *Department of Mathematics, Badji Mokhtar Annaba University, Algeria*

E-mail: sa.kouachi@gmail.com, a_guezane@yahoo.fr

² *Department of Mathematics, 08 Mai 45-Guelma University, Algeria*

E-mail: fellaggoune@gmail.com

Abstract:

In this article, we study the existence of positive solutions for a fractional boundary value problem at resonance with Caputo's fractional derivative. By using a fixed point theorem of increasing operators, the minimal and maximal nonnegative solutions for the problem are obtained.

Keywords: Fractional boundary value problem, Resonance, Positive solutions, Fixed point Theorem.

Bibliography :

- [1] C. Bai, J. Fang, J. Math. Anal. Appl, **2004**, 291, 538-549, Existence of positive solutions for boundary value problems at resonance.
- [2] Chen and Tang, Boundary Value Problems, **2012**, 2012:64, Positive solutions of fractional differential equations at resonance on the half-line.
- [3] CT. Cremins, Nonlinear Anal, **2001**, 42, 789-806, A fixed-point index and existence theorems for semilinear equations in cones.
- [4] Qu and Liu, Boundary Value Problems, **2013**, 2013:127, Existence of nonnegative solutions for a fractional m-point boundary value problem at resonance.

Modified product integration method for approximate solutions of Fredholm integral equations defined on great interval with different kernel types

Samir LEMITA¹, Hamza GUEBBAI²

^{1,2} *Laboratoire de Mathématiques Appliquées et de Modélisation, Faculté de Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 8 Mai 1945 Guelma. B.P.*

401 Guelma 24000 Algérie

¹ lem.samir@gmail.com, ² guebaihamza@yahoo.fr

Abstract:

In this work, we propose a new numerical method for solving a linear Fredholm integral equations of the second kind defined on great interval, by using two interrelated methods, Picard iteration and Product integration method, because if we apply some numerical methods directly [1], with a small discretization step, the integral equation is reduced to a linear algebraic system with tremendous dimension, and the computer will not be able to reverse the matrix. And like the lonely model was studied in this sense is the radiation transfer equation in stellar atmospheres [2], where the researchers was based on the decreasing property of the kernel [3. 4], so we choose kernels of convolution type, firstly, a smoothness increasing kernel, secondly, a weakly singular kernel with algebraic type. The convergence analysis of this method is proved and some numerical examples are shown to illustrate its effectiveness.

Keywords: Picard iteration, product integration method, great interval, weakly singular kernel.

References

- [1] K. E. Atkinson, The numerical solution of integral equations of the second kind, Cambridge university press, 1997.
- [2] I. W. Busbridge, The Mathematics of Radiative Transfer, Cambridge University Press, 1960.
- [3] O. Titaud, Reduction of Computation in the Numerical Resolution of a Second Kind Weakly Singular Fredholm Equation, Integral Methods in Science and Engineering. Birkhäuser Boston. (2004), 255-260.
- [4] M. Ahues, A. Largillier, O. Titaud, The roles of a weak singularity and the grid uniformity in relative error bounds, Numer. Funct. Anal. Optim. (2001), 22, 789-814.

Simulation numérique en FreeFem++ de quelques équations de la physique mathématique

Mehri Allaoua

**Mehri Allaoua, Department of Mathematics, University May 8th 1945, P.O.Box 401, Guelma 24000, Algeria,
E-mail : mehri.allaoua@univ-guelma.dz*

Résumé :

L'objectif de ce travail consiste à résoudre numériquement, par la méthode des éléments finis, divers problèmes d'équations de la physique mathématiques en dimension 2 d'espace et sous forme variationnelle. A cet effet, on va utiliser le logiciel libre FreeFem++ développé au Laboratoire Jacques-Louis Lions de l'université Pierre et Marie Curie. Ce dernier permet de résoudre très simplement de nombreux problèmes variationnels. On se limite dans cette partie à l'équation de Poisson, équation de la chaleur, équation des ondes, équation non linéaire et inéquation variationnelle.

Mots clés : éléments finis, polynôme de Lagrange, nœuds, triangles, estimation d'erreur.

Référence :

- [1] <http://www.freefem.org/++/doc.pdf>
- [2] M.Kallel, LAMSIN, Introduction à FreeFem++ (1ere partie) 2008, www.lamsin.rnu.tn.
- [3] M.Kallel, LAMSIN, Introduction à FreeFem++ (2eme partie) 2008, www.lamsin.rnu.tn.
- [4] Georges Sadaka, FreeFem++, a tool to solve PDEs numerically, 2012, www.lamfa.u-picardie.fr/sadaka/.

Nonexistence of positive solution for nonlinear fractional coupled systems

Assia GUEZANE, *Ghania REBIAI*

University of Badji Mokhtar-Annaba; a_guezane-lakoud@yahoo.fr
University of Guelma, rebeai_ghania@yahoo.fr

Abstract:

We consider in this paper the system of nonlinear fractional coupled differential equations

$$\begin{aligned} -D^\alpha u(t) &= \lambda f(t, u(t), v(t)), & t \in [0,1], \\ u(0) = \dot{u}(0) &= 0, & a u(1) - b u(1) = 0, \\ v(0) = \dot{v}(0) &= 0, & a v(1) - b v(1) = 0. \end{aligned}$$

Where $2 < \alpha < 3$, D^α denote the Riemann-Liouville derivatives of order α . We shall give sufficient conditions on λ and f , such that (S) has no positive solutions. The existence of positive solutions for (S) has been studied in [3] by using the Guo-Krasnosel'skii fixed point theorem. The multiplicity of positive solutions of the system (S) with $\lambda = 1$: We will prove some nonexistence results for the positive solutions with respect to a cone for our problem by using necessary definitions and properties properties from the fractional calculus theory and some auxiliary results from [29].

Keywords: Riemann-Liouville Derivatives, Nonexistence, Boundary Value Problem..

References:

- [1] Baleanu, D, Diethelm, K, Scalas, E, Trujillo, JJ: Fractional Calculus Models and Numerical Methods. Series on Complexity, Nonlinearity and Chaos. World Scientific, Boston (2012).
- [2] Das, S: Functional Fractional Calculus for System Identification and Control. Springer, New York (2008).
- [3] Kilbas, AA, Srivastava, HM, Trujillo, JJ: Theory and Applications of Fractional Differential Equations. North-Holland Mathematics Studies, vol. 204. Elsevier, Amsterdam (2006).

Free-surface jet flow in the region between two straight semi-infinities

GASMI Abdelkader¹ & MEFLAH Mabrouk² & AMARA Abdelkader² & **REDOUANI Farouk**²

¹Laboratory of Pure and Applied Mathematics (LPAM) University of M'sila, (28000) Algeria
E-mail address: gasmia@gmail.com

²Laboratoire de Mathématiques Appliquées (LMA) Université Kasdi-Merbah Ouargla (30000) Algérie
E-mail address: meflah.mebrouk@univ-ouargla.dz, amara.abdelkader@univ-ouargla.dz,
farouk89red@gmail.com

Abstract:

We consider a problem to two dimensional potential and irrotational flow of a fluid in the region between two straight semi-infinite intersection at an angle β . The fluid is assumed to be inviscid, incompressible and the flow is irrotational where the effect of surface tension is not neglected. The computed accurate numerical solution with surface tension $T \neq 0$ via a series truncation. However, there is a solution for each value of the Weber number α .

References

- [1] B. Bouderah, A. Gasmi and H. Serguine, Zero Gravity of Free-Surface Jet Flow, International Mathematical Forum, 2, 2007, no. 66, 3273-3277.
- [2] H. Serguine, Numerical resolution of a non-linear problem in a field at free border due to a jet against a infinite plate, Thesis of Magister University of M'sila, (2004).
- [3] E. Abdelkader Gasmi, H. Mekias, A Jet from Container and Flow past a Vertical Flat Plate in a Channel With the Surface Tension Effects, Applied Math Sciences, vol. 1, 2007, no. 54, 2687 - 2698.
- [4] Jean-Marc Vanden-Broeck, The influence of surface tension on cavitating flow past a curved obstacle, J. Fluid. Mech. (1983), vol. 133, pp 255 – 264.

Critère de Hautus pour étudier la Contrôlabilité

REZZOUG Imad, AYADI Abdelhamid

Laboratoire "SDC". Université OEB

Résumé :

L'objectif de ce travail est l'étude de la contrôlabilité des systèmes linéaires de dimension infinie. En général, dans la dimension finie, nous appliquons le critère algébrique de Kalman parce qu'il est facilement applicable. Mais dans la dimension infinie comment définir la contrôlabilité exacte? par Kalman: Non!. Par Hautus: ... Oui pour les systèmes dynamiques conservatifs.

Mots clés : Contrôlabilité, Critère de Hautus

MSC 2010 Classification: Primary 93B05; Secondary 93C20, 92D40.

Références

- [1] A. Ayadi., M. Djebarni., T. Laib T. Sentinelles faibles, Sci: Tech. A-N°24, univ Mentouri Constantine. (2006). PP 07-10.
- [2] J.L. Lions. Sentinelles pour les systèmes distribués à données incomplètes. Masson, Paris. (1992).
- [3] I. REZZOUG et A. AYADI. IDENTIFICATION OF AN UNKNOWN PART OF THE BOUNDARY OF AN NAVIER-STOKES SYSTEM BY PUNCTUAL SENTINEL. Sciences & Technologie A – N°35, Juin. (2012), PP 31-35.
- [4] I. REZZOUG, A. AYADI. Sentinels for the identification of pollution in domains with missing data, ADSA. ISSN 0973-5321, Volume 8, Number 2. (2013). PP 439-449.
- [5] I. REZZOUG, A. AYADI. Weakly sentinels for the distributed system with pollution terms in the boundary. FEJ of AM. V. 63, N1. (2012). PP 25-37.
- [6] I. REZZOUG, A. AYADI. Weakly sentinels for the distributed system with missing terms and with pollution in the boundary conditions. IJ of MA. V. 6, N1, no 45. (2012). PP 2245-2256.
- [7] I. REZZOUG. Étude théorique et numérique des problèmes d'identification des systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles, Thèse de doctorat, Université d'Oum El Bouaghi, Algérie, (2014).
- [8] I. REZZOUG. Identification d'une partie de la frontière inconnue d'une membrane, Thèse de magister, Université de Oum El Bouaghi, Algérie, (2009).
- [9] I. REZZOUG, A. AYADI. Approximate Controllability for the Parabolic Equations of the Fourth Order. ISSN 0973-1768 Volume 12, Number 5 (2016). PP 4495–4509.

Existence et unicité de la solution de l'équation de la composante tangentielle de la circulation générale de l'atmosphère

S. Salah¹, MZ.Aissaoui², H.Fujita Yashima³

Laboratoire de mathématiques appliquées et de modélisation, Université 8 Mai 1945, Guelma

E-mail: selmasalah@hotmail.fr¹, aissaouizine@gmail.com², hisaofujitayashima@qq.com³

Résumé :

Dans ce travail, nous allons démontrer l'existence et l'unicité de la solution de l'équation de la composante tangentielle, qui fait partie du système d'équations du mouvement d'un gaz visqueux et calorifère qui modélise la circulation générale de l'atmosphère qui se réalise globalement dans la couche atmosphérique de la Terre, en utilisant le coefficient de viscosité de turbulence et en proposant certaines simplifications comme l'hypothèse de la symétrie axiale.

Mots Clés : approximation de Galerkin, atmosphère, circulation atmosphérique.

Référence:

- [1] S.Buccellato, H. Fujita Yashima : *Stabilité de l'état d'équilibre du système d'équations d'un gaz visqueux barotrope dans le modèle de l'atmosphère* ., Annali Univ .Ferrara-sez.VII, sc ,mat., vol.52(2006),pp.1-17.
- [2] G. I. Marchuk, et al : A mathematical model of the general circulation of the atmosphere and ocean ., Akademiia Nauk SSSR, Doklady, vol. 253, no. 3, 1980, p. 577-581. In Russian..
- [3] B.Guo, D.Huang, *Existence of weak solutions and trajectory attractors for the moist atmospheric equations in geophysics*, Journal of Mathematical physics 47, 083508 (2006).
- [4] Hsia C-H, Lin C-S, Ma T,Wang S. *Tropical atmospheric circulations with humidity effects*. Proc. R. Soc. A 471:20140353.2015) .

Averaged control

*H. Selatnia*¹, *A. H. Ayadi*²

¹Université Mouhamed chérif Messaadia-Souk Ahras

²Laboratoire du Contrôle et systèmes dynamiques, Université Oum EL Bouagui

houriaselatnia@hotmail.fr¹ et facmath@yahoo.fr²

Abstract:

In this work, we analyze the problem of controlling parameter-dependent systems. We introduce the notion of averaged control according to which the quantity of interest is the average of the states with respect to the parameter.

First we consider the problem of controllability for linear finite-dimensional systems and show that a necessary and sufficient condition for averaged controllability is an averaged rank condition, in the spirit of the classical rank condition for linear control systems, but involving averaged momenta of any order of the matrices generating the dynamics and representing the control action.

Key words: parameterized ODE and PDE, averaged controllability, averaged observability, simultaneous control and averaged optimal control.

References:

- [1] F. Ammar-Khodja, A. Benabdallah, L. de Teresa and M. Gonzalez-Burgos, (2011). Recent results on the controllability of linear coupled parabolic problems: A survey, *Math. Control and Related Fields*, 3, 267 - 306.
- [2] R. D'ager and E. Zuazua, (2006). *Wave Propagation and Control in 1-d Vibrating Multi-structures*. Springer Verlag, Berlin, *Mathematics and Applications*, vol. 50.
- [3] J.-S. Li, (2011). Ensemble control of finite-dimensional time-varying linear systems. *IEEE Trans. Automat. Control*, 56 (2), 345-357.
- [4] F. Luca and L. de Teresa, (2013). Control of coupled parabolic systems and Diophantine approximations. *SeMA Journal*, 61 (1), 1-17.
- [5] S. Micu and E. Zuazua, (2005). An introduction to the controllability of linear PDE, *Control non lineaire et applications*, Sari, T., ed., *Collection Travaux en Cours Hermann*, 67-150.

An Encryption Algorithm Based on a Suitable Use of two Chaotic Maps

Ibtissem TALBI, Soraya BOUGHABA

Université Mentouri Constantine, ibtissem.alg@hotmail.com

Université Mentouri Constantine, soraya_boughaba@hotmail.com

Abstract:

In the recent years, a number of image encryption algorithms based on the permutation-diffusion structure have been proposed. The typical structure of these algorithms has the permutation and the diffusion stages performed alternatively. The confusion and diffusion effect is solely contributed by the permutation and the diffusion stage, respectively. As a result, moreover all rounds than necessary are required to achieve a certain level of security. In this paper, we suggest to introduce certain diffusion effect in the confusion stage by simple sequential add-and-shift operations. The purpose is to reduce the workload of the time-consuming diffusion part so that fewer over all rounds and hence a shorter encryption time are needed. Simulation results show that at a similar performance level, the proposed cryptosystem needs less than one-third of the encryption time of an existing cryptosystem. The effective acceleration of the encryption speed is thus achieved.

Keywords: chaotic generator, cat map, skew tent map, security analysis.

References:

- [1] C. Shannon, "Communication Theory of Secrecy Systems". *System Technical Journal*, vol. 28, no.4, pp. 656-715.
- [2] J. Fridrich, "Symmetric ciphers based on two-dimensional chaotic maps", *Int. J. Bifurcation and chaos*, vol. 8, no. 6, **1998**, pp. 1259-1284.
- [3] G. Chen, Y. Mao, C. K. Chui, "A symmetric image encryption schemes based on 3D chaotic cat maps", *Chaos Solutions and Fractals*, vol. 21, **2004**, pp. 749-761.
- [4] S. Lian, J. Sun, Z. Wang, "A bloc cipher based on a suitable use of the chaotic standard map". *Chaos Solutions and Fractals*, vol. 26, **2005**, pp. 117-129.
- [5] K-W. Wong, B. S-H. Kwok, W-S. Law, "A fast image encryption scheme based on chaotic standard map". *Physics Letters A*, vol. 372, no. 15, **2008**, pp. 2645-2652.

Analyse du comportement des plaques en matériaux à gradient de propriété en utilisant une théorie de cisaillement transverse d'ordre élevé

L. Hadji¹, N. Zouatnia², Y. Tlidji³, A. Kassoul⁴

¹ Département de Génie Civil, Faculté des Sciences Appliquées, Université Ibn Khaldoun, BP 78 Zaaroura, Tiaret, Algérie, had_laz@yahoo.fr

² Laboratoire de Structures, Géotechnique et Risques, Université Hassiba Benbouali de Chlef, Algérie, nissa.hadji@yahoo.com.

³ Département de Génie Civil, Faculté des Sciences Appliquées, Université Ibn Khaldoun, BP 78 Zaaroura, Tiaret, Algérie, tlidji.youcef@gmail.com.

⁴ Laboratoire de Structures, Géotechnique et Risques, Université Hassiba Benbouali de Chlef, Algérie, amarkassoul@gmail.com.

Résumé :

Ce travail porte sur l'analyse du comportement mécanique à la flexion d'une plaque rectangulaire en matériaux à gradient de propriétés (FGM), soumise à un chargement statique transverse. La théorie d'ordre élevé est utilisée dans ce travail. On suppose que les propriétés matérielles de la plaque P-FGM changent sans interruption à travers l'épaisseur, selon la fraction volumique du matériau constitutif suivant une fonction de loi de puissance P-FGM. Les équations d'équilibre sont obtenues en appliquant le principe des travaux virtuels. Les expressions mathématiques de la flèche, les contraintes normales et tangentielles sont obtenues en utilisant l'approche de Navier. L'influence de chargement mécanique et le changement du paramètre du matériau sur comportement mécanique de la plaque est représenté par un exemple numérique.

Mots Clés : Flexion, Matériaux à gradient variable, Contrainte, Plaque FGM, Cisaillement, Solution de Navier.

Références

- [1] S.S. Vel, R.C. Batra, Three-dimensional exact solution for the vibration of functionally graded rectangular plates. *J. Sound Vib*, **2004**, 272.
- [2] M. Touratier, An efficient standard plate theory. *Int. J. Eng. Sci*, **1991**, 29(8), 901–916.
- [3] J.N. Reddy, A simple higher order theory for laminated composite plates, *J. Appl. Mech.* **1984**, 51, 745–752.
- [4] S. Merdaci, A. Tounsi, M. Sid Ahmed Houari, I. Mechab, H. Hebali, S. Benyoucef, Two new refined shear displacement models for functionally graded sandwich plates, *Journal of Springer*, **2010**.
- [5] C.P. Wu, H.Y. Li, An RMVT-based third-order shear deformation theory of multilayered functionally graded material plates, *Compos. Struct*, 2010, 92, 2591–2605.
- [6] M. Karama, K.S. Afaq, S. Mitsou, Mechanical behavior of laminated composite beam by the new multi-layered laminated composite structures model with transverse shear stress continuity, *Int. J. Solids Struct*, **2003**, Vol40, p. 1525-1546.

Estimation des Fréquences de Vibration des structures FGM

L. Ould Larbi¹, L. Hadji², N. Zouatnia³

¹ Laboratoire de Structures, Géotechnique et Risques, Université Hassiba Benbouali de Chlef, Algérie,
latifaouldlarbi@gmail.com

² Département de Génie Civil, Faculté des Sciences Appliquées, Université Ibn Khaldoun, BP 78 Zaaroura,
Tiaret, Algérie, had_laz@yahoo.fr

³ Laboratoire de Structures, Géotechnique et Risques, Université Hassiba Benbouali de Chlef, Algérie,
nissa.hadji@yahoo.com.

Résumé :

Ce travail présente une étude analytique de la vibration libre des poutres à gradient de propriétés 'FGM' sur appuis simple en utilisant une nouvelle théorie de cisaillement transverse raffinée des poutres. On suppose que les propriétés des matériaux tels que le module de Young et la masse volumique de la poutre varient dans la direction de l'épaisseur selon une simple loi de puissance. Les équations du mouvement pour la poutre FGM ont été trouvées en appliquant le principe d'énergie d'Hamilton. La solution de type Navier a été utilisée pour obtenir les fréquences de vibration. La validité des résultats de la présente théorie est montrée par la comparaison avec celle des résultats des théories qui existent dans la littérature.

Mots Clés : Fréquence, Vibration, Solution de Navier, Matériaux à gradient de propriétés.

Références:

- [1] S.P. Timoshenko, J.N. Goodier, 1970, Theory of Elasticity, third ed. McGraw-Hill, New York, **1970**.
- [2] M.A. Benatta, I. Mechab, A. Tounsi, E. A. Adda bedia, Static analysis of functionally graded short beams including warping and shear deformation effects." *Computational Materials Science*, **2008**, Vol 44, 765- 773.
- [3] F. Delale, and F. Erdogan, The crack problem for a nonhomogeneous plane, *J. Appl. Mech.*, **1983**, Vol 50(3), 609-614.
- [4] L. Hadji, T.H. Daouadji, A. Tounsi and E.A. Bedia, A higher order shear deformation theory for static and free vibration of FGM beam, *Steel and Composite Structures*, **2014**, Vol. 16, No. 5 (2014) 507-519.

A refined Hyperbolic Shear Deformation Theory for Bending of Functionally Graded Beams based on neutral surface position

Youcef Tlidji^{1,2}, Lazreg Hadji^{1,2}, Nafissa Zouatnia³, El Abbes Adda Bedia²

¹ Université Ibn Khaldoun, BP 78 Zaaroura, 14000 Tiaret, Algérie.

² Laboratoire des Matériaux & Hydrologie, Université de Sidi Bel Abbès, 22000 Sidi Bel Abbès, Algérie.

³ Laboratoire de Structures, Géotechnique et Risques, Université Hassiba Benbouali de Chlef, Algérie.

Abstract:

In this study, a hyperbolic shear deformation theory is presented for bending analysis of functionally graded beams. This theory used in displacement field in terms of thickness coordinate to represent the shear deformation effects and does not require shear correction factor, and gives rise to transverse shear stress variation such that the transverse shear stresses vary parabolically across the thickness satisfying shear stress free surface conditions. The governing equations are derived by employing the virtual work principle and the physical neutral surface concept. A simply supported functionally graded beam subjected to uniformly distributed loads and sinusoidal loads are considered for detail numerical study. The accuracy of the present solutions is verified by comparing the obtained results with available published ones.

Keywords: Functionally graded; Navier's Solution; Physical neutral surface; virtual work; sinusoidal loads.

References:

- [1] Hadji, L., Daouadji, T.H., Tounsi, A. and Adda bedia, E.A. (2014), "A higher order shear deformation theory for static and free vibration of FGM beam", *Steel and Composite Structures*, **16**(5), 507-519.
- [2] Hadji, L., Zouatnia, N., Kassoul, A., (2016), "Bending analysis of FGM plates using a sinusoidal shear deformation theory", *Wind and Structures*, **23**(6), 543-558.
- [3] Klouche Djedid, I., Benachour, A., Houari, M.S.A., Tounsi, A., Ameer, M. (2014), "A n-order four variable refined theory for bending and free vibration of functionally graded plates", *Steel and Composite Structures*, **17**(1), 21-46.
- [4] Li, X.F. (2008), "A unified approach for analyzing static and dynamic behaviors of functionally graded Timoshenko and Euler-Bernoulli beams", *Journal of Sound and Vibration*, **318**, 1210–1229.

SNSA I-2016

INDEX DES AUTEURS

Conférence plénière

FUJITA YASHIMA Hisao i

BENNECER Badis ii

Atelier 1: Physique

AUTEURS	PAGES	AUTEURS	PAGES
ABDELHADI Sofiane	1	DEHBI Lynda	40
ABDELLI Zeyneb	2	DILMI Samia	41
ACHOURI Mohamed Malik	3	DJAADI Soumaia	42
AGUIB Salah	4	DRIEF Mohamed	43
AIT MAMMAR Sofiane	5	HESSANIA Amar	44
ALLAM Zehor	6	FAID Fares	45
AMARA Ali	7	FNIDES Souhair	46
AOUATI Redha	8	GOUS Mohammed Hadi	47
ARAB kamel	9	GUERMIT Nora	48
AZZAZ Hamza	10	GUERMIT Youcef	49
BAAZIZ Hakim	11	HADDAD Abdenour	50
BAIRA Melouka	12	HADJAB Moufdi	51
BAKHTATOU Ali	13	HAICHOIR Rachida	52
BARAKA Oussama	14	HAMIDANE Ouafa	53
BEKHTI-SIAD Amara	15	HAMMAR Katia	54
BEKKI Belmorsli	16	HAMRI Abdelkrim	55
BELGHIT Rafik	17	HARHOUS Ahlam	56
BELHADJ Mohamed El amine	18	HEBALI Khaled	57
BENAMER Ali	19	KAOUR Selma	58
BENATIA Mohamed	20	KARFAF Saliha	59
BENCHEHIMA Miloud	21	KERROUM Djamel Eddine	60
BENCHEIKH Rabah	22	KRARCHA Hadda	61
BORDJIBA Zeyneb	23	LEGHIGHANE Billel	62
BOUABCA Asma	24	LEKADIR Fazia	63
BOUALLEG Mohamed	25	MOUSSAOUI Bachir	64
BOUAMAMA Lemya	26	OULED ALI Mohammed	65
BOUCERREDJ Noureddine	27	RAHMANI Mohamed	66
BOUDOUR Samah	28	REKAB-DJABRI Hamza	67
BOUDRIFA Ouassila	29	SERDOUK Fadila	68
BOUGRADJA Faiza	30	SOUADIA Zohra	69
BOUROUIS Chahrazed	31	TAGROUT Abdalah	70
BOUROUROU Yahia	32	TOUAM Selma	71
BOUTARFA Bariza	33	YAHIAOUI Mohamed Laid	72
BOUZID Fayçal	34	ZEGHDAR Kamal	73
CHARIFI zoulikha	35	ZERFAOUI Hana	74
CHEDDADI Samir	36	YAHYI Hakima	75
CHELLI Samira	37	TOURAB Mohammed	76
AMRAOUI Rabie	38	MESSIAD Meriem	77
CHORFI Hichem	39	MEZHOUDI Latifa	78
		REDDAOUI Habib	79

Atelier 2 : Informatique

AUTEURS	PAGES	AUTEURS	PAGES
BARAKAT Ouarda	81	HACHAMA Mohammed	93
BAYAZA Rima	82	HADJERIS Mourad	94
BENCHERIET Chems enahar	83	HALLACI Samir	95
BENMEDAKHENE Nadira	84	HEBHOUB Fahima	96
BENSALEM Mohamed	85	MENASRIA Azzeddine	97
BENZENACHE AMINE	86	MERABTI hocine	98
BORDJIBA Yamina	87	MESSAOUDI Newfel	99
BOUGHAREB Djalila	88	ROUABHIA Chahrazed	100
BOUGUERRA Fateh	89	SERIDI Ali	101
BOUZID-DAHO Abdellatif	90	ZAGHDOUDI Rachid	102
DAAS Sara	91	ZINEDDINE Kouahla	103
FAHSI Mahmoud	92		

Atelier 3 : Chimie

AIMENE Yassine	105	GRABSI Mohamed	131
AMIRAT Khadidja	106	HADDAD Khoula	132
AMIRAT Samia	107	HAIHAEM Sakina	133
BELKHEIR Fatiha	108	HIMRI Safia	134
BEN SEGHIR Bachir	109	KHELLOUL Nawel	135
BENBRAHIM Imane	110	KHEROUF Soumaya	136
BENDIF Besma	111	LACHI Nadia	137
BENSOUILAH Nadjia	112	LADJARAFI Abdelkader	138
BEZZINA Belgacem	113	LAHCENE Abdelmalek	139
BOUARRA Nabil	114	LAKEHAL Salima	140
BOUCHAIR Farah	115	LAOUD Aicha	141
BOUCHEMELLA Houria	116	MAACHE Soulef	142
BOUHADIBA Abdelaziz	117	MEDDOUR Faiza	143
BOUHADICHE Adil	118	MERABET Nora	144
BOUHANK Antar	119	BOUZITOUNA Amel	145
BOUKHALFA Nadia	120	MOKHTARI Abdelaali	146
BOUSSEBBAT Wahiba	121	NIGRI Soraya	147
BOUZIT Habiba	122	NOUAR Leila	148
CHABANE Hanane	123	SAIHI Razika	149
CHEGHIB Nedjouda	124	STITI Maamar	150
CHERIET Mouna	125	TIMEDJEGHDINE Mebarka	151
DAIKH Samia	126	ZABOUB Amal	152
DJADI Nabila	127	ZERROUKI Mostapha	153
DJEFAFLIA Rabiaa	128	MESSIAD Hanane	154
DRISSI Souad	129	DIDI Mabrouka	155
GHARIBI Meryem	130	MAHMOUDI Ourida	156

Atelier 4 : Mathématique

AISSAOUI Fatima	158	BELHIRECHE Hanane	164
ARIES Mohammed es-salih	159	BENRABIA Noureddine	165
BARROUK Nabila	160	BENSSAAD Meryem	166
BAZINE Safia	161	BOULARES Hamid	167
BECHOUAT Tahar	162	BOUMEDIENE Amina	168
BELAID Malik	163	CHIBANI Alima	169
		CHIDOUH Amar	170

DJENAOUI Meriem	171	KHELLAF Ammar	184
ELLAGGOUNE Selma	172	KOUACHI Samia	185
ELMOUMEN Abdelkader	173	LEMITA Samir	186
FRIQUI Assia	174	MEHRI Allaoua	187
GHOMRANI Sarra	175	OULD LARBI Latifa	188
HADJI Ghania	176	REBIAI Ghania	189
HADJI Lazreg	177	REDOUANI Farouk	190
HALLACI Ahmed	178	REZZOUG Imad	191
HALLACI Khadidja	179	SALAH Selma	192
HAMIDANE Nacira	180	SELATNIA houria	193
HARRAT Aicha	181	TALBI Ibtissem	194
HEBHOUB Fahima	182	TLIDJI Youcef	195
KAIDOUCHI Wahida	183		