



**Dimanche, 02 Février 2020**

### Horaires

### Grande salle des conférences - Dr. S. Kenouche

08:00 - 08:30

**Accueil**

08:30 - 09:00

**Allocution d'ouverture**

09:00 - 09:40

**Conférence plénière - Pr. H. Aourag**

Does data mining able to detect anomalies on the published data of any theoretical or experimental works

09:40 - 10:20

**Conférence plénière - Pr. J.Y. Saillard**

Electronic structure of ligated transition-metal superatoms and assemblies of superatoms

10:20 - 10:50

**Pause Café**

### Grande salle des conférences - Pr. N. Tchouar

10:50 - 11:30

**Conférence plénière - A. Benyoussef**

Two-dimensional materials for energy conversion and storage : Computational predictions of physical properties using DFT

11:30 - 12:10

**Conférence plénière - P. Jedlovsky**

Investigation of problems related to the Phosphorus Chemistry

12:10 - 14:00

**Déjeuner**

### Salle 1 - Pr. S. Belaidi

### Salle 2 - Pr. B. Zouchoune

14:00 - 14:40

**Conférence plénière - M. Houchlaf**

Multi-scale studies of gas-substrate interactions: Benchmarks and applications

14:40 - 15:00

**Benrezkallah Djamila**

Étude structurale comparative des enzymes homologues psychrophile et mésophile Endonucléase I par simulation

15:00 - 15:20

**Boulbazine Mouhssin**

Stability and electronic properties of Rh-doped ruthenium clusters and their interaction with NH<sub>3</sub> molecule

**Conférence plénière - G. Manca**

Voyage in the Electronic Aspects of Phosphorus Chemistry

**Aissani Linda**

Relation between annealing treatment, microstructural and mechanical properties

**Amar Anissa**

Etude DFT des modes d'empilement dans des cristaux de trihalogénomésitylène

15:20 - 16:20

**Pause Café & Session Poster**

### Salle 1 - Dr. Y. Belhoucine

### Salle 2 - Dr. S. Azizi

16:20 - 16:40

**Brahim Houari**

Theoretical study of the absorption and phosphorescence spectra of platinum(II) and palladium(II) complexes

16:40 - 17:00

**Khalfaoui Hadjer**

Chalcone as a privileged scaffold in drug discovery: Molecular structure, spectroscopic and chemical reactivity

**Belkadi Ahlem**

A relevant tool for K-means clustering analysis

**Chadli A/Hakim**

Semi-conductor magnetic oxide in h-HoMnO<sub>3</sub>  
An ab initio prediction

17:00 - 17:20 **Djebaili Rachida**

Molecular docking study of 1,4-benzodiazepine derivatives against  $\gamma$ -aminobutyric acid type A (GABAA) receptor

**Djaili Salim**

Ab initio molecular dynamic study of the temperature effect on the optic properties

## Lundi, 03 Février 2020

**Salle 1 - Pr. M. Brahimi**

**Salle 2 - Pr. A. Benyoussef**

08:30 - 09:10 **Conférence plénière - P. Reinhardt**

Optimized minimal atomic primitive (MAP)  
Slater-type basis sets

**Conférence plénière - A. Boucekkine**

TD-DFT computations of optical properties

09:10 - 09:50 **Conférence plénière - A. Idrissi**

Microscopic Structure and Dynamics in mixture of Ionic Liquid and solvents : Molecular modelling and Spectroscopy Analysis

**Conférence plénière - B. Bouhafs**

Prediction of a new phase transition pathway for Fe under pressure

09:50 - 10:10 **Boumedal Hicham**

Etude de la réactivité des énantiomères (R et S) de la Naringinine par les méthodes quanto-chimiques

**Mahmoudi Chaima**

Numerical DFT calculations on structural, optical and electronic properties of a new materials

10:10 - 10:30 **Ouassaf Mebarka**

Etude pharmacocinétique et docking moléculaire des inhibiteurs de la BRD4

**Dems Mohamed**

Combinaison des calculs DFT et QSAR pour prédire l'affinité de liaison au récepteur de dérivés organométalliques de l'estradiol

10:30 - 11:30

**Pause Café & Session Poster**

**Salle 1 - Pr. I. Belabbas**

**Salle 2 - Pr. I. Daoud**

11:30 - 11:50 **Kenouche Samir**

Statistical analysis to select an efficient method for calculating atomic charges

**Kias Farida**

Reactivity and redox properties of triscyclopentadienyl uranium(IV) monothiolate complexes : Theoretical investigation

11:50 - 12:10 **Ali Batoul Fatema Zohra**

Prédiction des propriétés thermodynamiques de mélanges binaires avec le modèle COSMO-RS

**Zeroual Samira**

DFT Study of organic-inorganic materials based on TTF-derived ligands

12:10 - 14:00

**Déjeuner**

**Salle 1 - Pr. A. Elkechai**

**Salle 2 - Pr. A. Boucekkine**

14:00 - 14:40

**Conférence plénière (salle 1) - I. Belabbas**

Atomistic scale investigation of dislocations in III nitride materials

14:40 - 15:00 **Hannachi Douniazed**

Optical and nonlinear optical properties of  $\text{Ln}(\text{Tp})_2$  where  $\text{Ln} = \text{La}, \dots, \text{Lu}$ , and  $\text{Tp} = \text{tris}(\text{pyrazolyl})\text{borate}$ : a DFT+TD-DFT study

**Merzoud Lynda 14:00 - 14:20**

The substituent effect on the stereochemistry and kinetics of the Inter-and intramolecular Diels-Alder reaction

15:00 - 15:20 **Benmahfoud Laila**

Ab initio simulations of ultrafast laser-induced destabilization of metallic lattice

**Khamouli Saida 14:20 - 14:40**

Criblage virtuel d'inhibiteurs du récepteur CDK2

15:20 - 16:00

**Pause Café**

**Salle 1 - Pr. J.Y. Saillard**

16:00 - 16:40

**Conférence plénière - H. Chermette**

Di-cyclo nonatetraenyl Europium (II)  $[(\eta^9\text{-C}_9\text{H}_9)_2]\text{Eu}$  Complexes: Structural Properties, Electronic Structure and Photoluminescence

16:40 - 17:20

**Conférence plénière - G. Frapper**

Prédiction de structures cristallines par algorithme évolutionnaire et calculs DFT : étude in silico du diagramme de phase étain-azote sous pression

17:20 - 17:50

**Cérémonie de clôture**