

Liste des communications affichées CIMM2005

CA 01 Application of response surface methodology to optimize a preparation of γ -tricalcium phosphate. S. Belouafa¹, H. Chaair^{1*}, K. Digua¹, O. Britel¹, B. Sallek² And H. Oudadesse³

¹Laboratoire de Génie des procédés, Faculté des Sciences et Techniques Mohammedia, ²Laboratoire de Physico-chimie des Matériaux, Faculté des Sciences Kénitra, ³Laboratoire de Chimie du solide et Inorganique Moléculaire, Université de Rennes 1, * hchaair@yahoo

CA 02 The removal of trivalent chromium by electro coagulation: Application of statistical design and surface plots for the optimization and regression analysis. Z. Zaroual¹, M.Azzi^{1*}, A.H. Essadki², B. Gourich², H. Chaair³

¹Laboratoire d'électrochimie et chimie de l'environnement, Faculté des Sciences Ain Chock, Casablanca, Maroc. ²Laboratoire de Génie des procédés, Ecole supérieure de Technologie, Casablanca, Morocco. ³Laboratoire de Génie des procédés, Facultés des Sciences et Techniques Mohammedia, Morocco. E-mail : z_zaroual@yahoo.fr

CA 03 Etude théorique de l'adsorption de nickel sur l'oxyde de cérium CeO₂. Z. Chafi, N. Keghouche

Laboratoire Microstructures et Défauts dans les Matériaux, Université de Constantine. Constantine, Algérie
M.K. Skalli ^{1,2}, **M. Calatayud** ², **C. Minot** ², et **A. Haoudi** ¹. ¹Laboratoire de Chimie Appliquée, Faculté des Sciences et Techniques Fès. Maroc. ²Laboratoire de Chimie Théorique, UMR 7616 UPMC/CNRS, Université Pierre et Marie Curie, Paris, France

CA 04 Diffusion and Second Virial Coefficients of Krypton in a Helium Gas at Moderate Temperatures. M.T. Bouazza¹ and M. Bouledroua²

¹Physics Department, Badji Mokhtar University, B.P. 12, Annaba 23000, Algeria. ²Laboratoire de Physique des Rayonnements, Badji Mokhtar University, B.P. 12, Annaba 23000, Algeria.
E-mail: boulmoncef@netscape.net

CA 05 Self-Broadening and Shifting of the 4s — 4p Line of Potassium. L. Reggami¹, M. Bouledroua², and F. Bouchelaghem¹

Physics Department, Badji Mokhtar University, B.P. 12, Annaba 23000, Algeria. Laboratoire de Physique des Rayonnements, Badji Mokhtar University, B.P. 12, Annaba 23000, Algeria
E-mail: boulmoncef@netscape.net

CA 06 théorique des propriétés électroniques et structurales des copolymères à base de thiophène et phénylène et leurs dérivés. H. Zgou^{1,2}, M. Hamidi², M. Bouachrine¹

Lrmm_fste@yahoo.fr, ¹Unité de Recherche sur les Macromolécules & Modélisation, Faculté des Sciences et Techniques, Errachidia, Maroc. ²Unité de Chimie Théorique Appliquée, Faculté des Sciences et Techniques, Errachidia, Maroc.

CA 07 Molecular modelling as an effective tool for the mechanistic elucidation of elementary steps in catalytic processes. Jamil Toyir¹, Nacer. E.Elkadri¹, Abdellah Oulmekki² and Jean-Marie Basset³

¹Faculté Polydisciplinaire de Taza, B.P. 1223, Taza Gare, Taza, Morocco. ²Faculté des sciences et techniques de Fès, Morocco. ³Laboratoire de Chimie Organométallique de Surface, UMR 9986 CNRS-CPE Lyon, France

CA 08 Etude du chemin réactionnel entre deux formes polymorphes du diteriobutyl-2,6phényl-4 phénol par modélisation moléculaire. K. Bekkouch. Faculté des sciences , Oujda. M. Perrin. Université Claude Bernard, Lyon, France. C. Decoret. Université Claude Bernard, Lyon , France

CA 09 Etude théorique des propriétés électroniques et structurales des poly (3,4-alkylènesdioxithiophènes). M. Ferza^{1,2}, M. Hamidi², M. Bouachrine¹

Lrmm_fste@yahoo.fr. ¹Unité de Recherche sur les Macromolécules & Modélisation, Faculté des Sciences et Techniques, B.P. 509 Boutalamine, Errachidia, Maroc. ²Unité de Chimie Théorique Appliquée, Faculté des Sciences et Techniques, B.P. 509 Boutalamine, Errachidia, Maroc.

CA 10 Etude ab-initio périodique de l'adsorption de l'or sur l'oxyde de cérium CeO₂. M.K. Skalli ^{1,2}, A. Markovits ², C. Minot ², et A. Haoudi ¹

¹Laboratoire de Chimie Appliquée, Faculté des Sciences et Techniques Fès. BP-2202 Fès, Maroc

²Laboratoire de Chimie Théorique, UMR 7616 UPMC/CNRS, Université Pierre et Marie Curie, 4 Place Jussieu, F-75252 Paris Cedex 05, France.

Z. Chafi, N. Keghouche

Laboratoire Microstructures et Défauts dans les Matériaux, Université de Constantine. Constantine, Algérie

CA 11 Density Functional Study of the Diels-Alder Reaction Between β -ionone and anhydride maleic. Influence of Lewis Acid Catalyst, and inclusion of Solvent Effects. H. Dirhoussi , A. Sbai. Département de Chimie, Faculté des Sciences de Meknès. UFR : Chimie Organique Meknès, Maroc. e-mail :

hind.dirhoussi@laposte.net

CA 12 Examen théorique de la complexation binaire et ternaire des acides phénoxyacétiques composés de pesticides avec les métaux lourds à l'état isolé. L. N. Mounir, H. Eljazouli, H. Kabli, M. Elamine, A. Albourine.

Equipe de chimie de coordination. Faculté des sciences B.P 8106 Agadir. E-mail: naema_m1@yahoo.fr

CA 13 Monte Carlo Simulation of the Collision between Cluster H_n^+ ($3 \leq n \leq 35$) with Helium Atom at Bohr Velocity Range. K. Samraoui¹, S. Ouaskit¹, H. Chakir¹, J. Inchaouh¹, M. Farizon², B. Farizon²

¹ Laboratoire de Physique de la Matière Condensée, Faculté des Sciences Ben M'sik, BP.7955, Avenue Driss El Harty. Casablanca. Maroc.

² Institut de Physique Nucléaire de Lyon, Université Claude Bernard, 43 Boulevard du 11 Novembre 1918. Lyon. France.

CA 14 Computer code for predicting the hydraulic properties of porous media. Nacer. E. Elkadri E.¹, Jamil Toyir¹, And Abdellah Oulmekki²

¹ Université Sidi Mohamed Ben Abdellah - Faculté Polydisciplinaire de Taza, B.P. 1223, Taza Gare, Taza, Morocco. ² Faculté des sciences et techniques de Fès, Morocco

CA 15 Molecular dynamics of many interacting Brownian particles. S. Zayzoune, M. Mazroui and Y. Boughaleb.

Université Hassan II. Faculté des Sciences Ben M'sik. Laboratoire de Physique de la Matière Condensée, Casablanca Maroc

CA 16 Structural modeling using density functional theory and vibrational spectroscopy.

A. Aamouche

Department of Matter Science, Faculté Poly disciplinaire, Cadi Ayyad University, BP-4162, Safi, Morocco. E-mail: mersafi2003@yahoo.fr

CA 17 Heteroatom-Carbon Activation Reactions at d⁰ Metal Centers. Hassan Rabaâ^{1*} and Thomas R. Cundari^{2*}.

¹ Université Ibn Tofail, LCTA, Département de Chimie, P. O. Box 133, Kénitra 14000, Morocco.

² Department of Chemistry, University of North Texas, P.O. Box 305070, Denton, TX 76203-5070, USA

CA 18 Modeling on EHTB and Ab initio Calculation of Silicophosphate Glasses with Sixfold Coordinated Silicon. Hassan Rabaâ*

* Université Ibn Tofail, LCTA, Département de Chimie, P. O. Box 133, 14000 Kénitra, Morocco

CA 19 Theoretical Study of the Reaction of Alkynes with Furan Catalyzed by AuCl₃ and AuCl. Hassan Rabaâ^{1*}, Bernd Engels^{2*} and Thomas Hupp²

¹ Université Ibn Tofail, LCTA, Département de Chimie, P. O. Box 133, Kénitra 14000, Morocco

² Universität Würzburg, Institut für Organische Chemie, Am Hubland, 94074 Würzburg, Germany

CA 20 EHTB Calculation of Methanol Adsorption on ZnO Surface. Hassan RABAA*.

*University Ibn Tofail, Faculty of Sciences, PO BOX, 133, 1400 Kenitra, Morocco

CA 21 Study of the submonolayer deposition by mean field lattice gas model. I. Achik, A.Hader, and Y.Boughaleb

Laboratoire de Physique de la Matière Condensée. Université Hassan II - Mohammedia, faculté des sciences, Ben M'sik Casablanca - Morocco

CA 22 ETUDE QUANTIQUE DFT DE CUMULENES SOUFRES C_nS_2 ET DE LEURS

FORMES PROTONEES $C_nS_2H^+$ ($n = 3-8$). A. M. Benmensour^{1*}, sema djennane^{1**} and abdou boucekine²

1- Laboratoire de Thermodynamique et modélisation moléculaire, Faculté de Chimie, U.S.T.H.B, Alger (Algeria).

2- LCSIM UMR 6511 CNRS, Université de Rennes 1, Institut de Chimie de Rennes, Rennes (France). E-mail : * mohammfr@yahoo.fr ** djennanesema@yahoo.fr

CA 23 Etude de la solvatation de Zn^{2+} et de la stabilité thermodynamique de sa réaction de avec l'ozone. R. Ghailane^a, N. Komiha^b, A. Elhamyani^b. O. Kabbaj

a : Université Ibn Tofail, Faculté des Sciences, Département de Chimie, Kénitra, Maroc

b : Laboratoire de Chimie Théorique, Université Mohamed V- Agdal, Faculté des Sciences, Rabat, Maroc

CA 24 Etude théorique d'une série de molécules peptidiques et de leurs dérivés substitués. R.M. Belmecheri et M. Nait Achour.

Laboratoire de Chimie Théorique. Faculté de Chimie – USTHB BP 32. L-Alia, 16111 Bab-Ezzouar Alger (Algérie)

CA 25 ETUDE THEORIQUE DFT DE LA PERI- ET REGIOSELECTIVITE DE LA REACTION DE CYCLOADDITION DIPOLAIRE-1,3 DE LA 1,5-BENZODIAZEPINE ET LE FORMONITRILIOXYDE. K. Marakchi, O.K Kabbaj, N. Komiha. Laboratoire de Chimie théorique. Université Mohammed V-Agdal, Faculté des Sciences Rabat. e-mail : marakchi_k@yahoo.fr

CA 26 INFRARED AND THEORETICAL STUDIES OF [C₃H₇NH₃]₂sif₆. A. Ouasri^a, A. Rhandour^{*A}, A. F. Jaibout^b, P. Dhamelincourt^c, A. Mazzah^c And A. Haoudi^d

^aLaboratoire de Physico-Chimie des Matériaux Inorganiques, Université Ibn Tofail, Faculté des Sciences Kénitra, B. P. 133, 14000, MAROC. ^bDepartment of Chemistry, The University of New Orleans, New Orleans, LA 70148, U. S. A. ^cLaboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman, U.M.R. - C.N.R.S. 8516, Centre d'Etudes et de Recherches Lasers et Applications, Université des Sciences et Technologies de Lille, 59655 VILLENEUVE D'ASCQ CEDEX – France. ^dLaboratoire de Chimie Appliquée, Faculté des Sciences et Techniques, Fès BP-2202, Fès, MAROC.

CA 27 Approche théorique de l'inhibition de la corrosion du Zn en milieu NaCl. H. Abou El Makarim, N. Komiha. Laboratoire de Chimie Théorique Département de Chimie, Faculté des sciences. Rabat Rabat – Maroc. Z.WAHBI, A.GUENBOUR, A.BEN BACHIR Et S. EL HAJJAJI. Laboratoire d'Electrochimie-Corrosion, Département de Chimie, Faculté des sciences. Rabat – Maroc. e-mail : makarim@fsr.ac.ma

CA 28 Isotopic and Symmetry Effects in Helium Atomic Collisions*. F. Bouchelaghem¹, M. Bouledroua², M.T. Bouazza¹, and L. Reggami¹

Physics Department, Badji Mokhtar University, B.P. 12, Annaba 23000, Algeria Laboratoire de Physique des Rayonnements, Badji Mokhtar University, B.P. 12, Annaba 23000, Algeria. E-mail: boulmoncef@netscape.net

CA 29 Etude ab initio des complexes (oep)ni et (oep)vo : effet du métal sur la dissolution d'une fluorapatite. A. Zrineh^a, S. Zaydoun^b, O.K. Kabba^c Et N. Komiha^c

Laboratoire de Chimie Physique Générale, Faculté des Sciences de Rabat, Maroc. - Laboratoire de Spectroscopie Infrarouge , Faculté des Sciences de Rabat, Maroc. Laboratoire de Chimie Théorique, Faculté des Sciences de Rabat, Maroc.

CA 30 Analyse conformationnelle d'hyxahydro-1H- indeno [2,1 – b] pyrazine par modélisation moléculaire de type MMX. S. Chahboun¹, A. Taleb², M. Taleb³, M. Sfaira³, M. Filali Baba³, R. Taouil^{4,5} et A. Benali⁴

1. Ministère de la Santé Publique – Maroc. 2. Agence pour la Dédensification et la Réhabilitation (ADER) de la Médina de Fès – Maroc. 3. Laboratoire d'analyse physico-chimique et matériaux catalytiques pour l'environnement, Faculté des Sciences Dhar El Mehraz, Université Sidi Mohamed Ben Abdellah, BP. 1796, Fès – Maroc. 4. Département de physique, Oujda, Maroc. 5. Département de physique, Errachidia, Maroc. Adresse de correspondance : msfaira@yahoo.com

CA 31 Étude comparative d'Hexahydro-1H indeno [2,1-b] pyrazine avec la structure active du citalopram par modélisation moléculaire S. Chahboun¹, A. Taleb², M. Taleb³, M. Sfaira³, M. Filali Baba³, R. Taouil^{4,5} et A. Benali⁴

1. Ministère de la Santé Publique – Maroc. 2. Agence pour la Dédensification et la Réhabilitation (ADER) de la Médina de Fès – Maroc. 3. Laboratoire d'analyse physico-chimique et matériaux catalytiques pour l'environnement, Faculté des Sciences. Dhar El Mehraz, Université Sidi Mohamed Ben Abdellah, BP. 1796, Fès – Maroc. 4. Département de physique, Oujda, Maroc. 5. Département de physique, Errachidia, Maroc. Adresse de correspondance : mustaphataleb62@yahoo.fr

CA32 Ion-molecule reactions between AB⁺ and CD: Theoretical investigations. M. Hochlaf

Theoretical Chemistry Group, University of Marne-La-Vallée Champs sur Marne, F-77454, Marne-la-vallée, France. E-mail: hochlaf@univ-mlv.fr

CA 33 Sattelite Feature of Lithium when perturbed by Helium, K. Alioua and M. Bouledroua,

Laboratoire de physique des rayonnements, Badji Mokhtar University, BP 12, Annaba 28000, Algeria, email : boulmoncef@netscape.net

CA 34 Modélisation moléculaire de polyols furaniques. J. Ouhabi & H. EL Mahdi.

Laboratoire de Chimie Bio-organique et Macromoléculaire (LCBM), équipe de modélisation moléculaire, Faculté des Sciences et Techniques -Guéliz, B. P. 549. Marrakech, Maroc.E-mail : ouhabi@hotmail.com

CA 35 Analyse conformationnelle, électronique et lipophile de nouveaux composés nucléosidiques anti-HIV. J. Ouhabi & M. Taourirte

Laboratoire de Chimie Bio-organique et Macromoléculaire (LCBM), Faculté des Sciences et Techniques-Guéliz, B. P. 549. Marrakech, Maroc. E-mail : ouhabi@hotmail.com

CA 36 Etude comparative des mécanismes biochimiques et moléculaires de la résistance au stress hydrique de deux variétés de blé dur. Zerrad W¹, Hillali S², El Antri S¹ et Hmyene A¹. 1: Laboratoire de Biochimie, d'Environnement et d'Agroalimentaire. FST de Mohammedia. Mohammedia – Maroc. 2: Laboratoire de Biochimie. FST de Settat.

CA 37 Etude théorique de l'inclusion des esters de la vitamine A dans les cyclodextrines naturelles
Khatmi djamelddine*, Elhassasna Souhir**, Hadjar Samah**, Madi fatiha et Nouar leila*. * Université de Guelma. ** Centre universitaire de Tébessa

CA 38 Relation structure activité pH-dépendant de l'? cobratoxine déterminée par dynamique dirigée.
A. Mikou², R. Sakhr¹, H. Chakir³, S. Moussamih⁴, E. Guittet⁵ et A. Kettani¹

¹Unité de modélisation moléculaire, Laboratoire de Recherche sur les Lipoprotéines, Faculté des Sciences Ben M'sik, Casablanca, Maroc. ²Département de Chimie, Faculté des Sciences Aïn Chock, Casablanca, Maroc.

³Laboratoire de structure nucléaire et Physique des hautes énergies, Faculté des Sciences Ben M'sik, Casablanca, Maroc. ⁴Département de Biologie, Faculté des Sciences Aïn Chock, Casablanca, Maroc. ⁵Laboratoire de RMN, Institut de Chimie des Substances Naturelles, CNRS, 91190 Gif-sur-Yvette, France.

Contact : akettani9@yahoo.fr, afafmikou@yahoo.fr,

CA 39 Molecular Modeling of the low density lipoprotein receptor mutations responsible for familial hypercholesterolemia in Morocco. R. Chater^{1,2}, D. Perahia³, M. Baaden⁴, K. Aït Chihab^{1,2}, S. Moussamih², A. Adlouni¹, M. El. Messal², K. Zakrewska⁴, R. Lavery⁴, A. Kettani¹

Unité de modélisation moléculaire, Laboratoire de Recherche sur les Lipoprotéines, Faculté des Sciences Ben M'sik, Casablanca. ²Département de Biologie, Faculté des Sciences Aïn Chock, Casablanca. ³Laboratoire de Modélisation et d'Ingénierie des Protéines IBBMC, Université Paris-Sud, Orsay. ⁴Laboratoire de Biochimie Théorique, Institut de Biologie Physico-Chimique, Paris 5. Contact : akettani9@yahoo.fr

CA 40 DETERMINATION STRUCTURALE DES PRODUITS SESQUITERPENIQUES ISSUS D'HEMISYNTHESE PAR RMN ET RX. BENHARREF Ahmed, LASSABA Essèdiya, CHEKROUN Ahmed , AUHMANI Aziz Et ELJAMILI Hamid.

Laboratoire de Chimie des Substances Naturelles. Université Cadi Ayyad, Faculté des Sciences-Semlalia, BP : 2390/ Marrakech E-mail : benharref@ucam.ac.ma

CA 41 Elucidation Structurale par RMN du Constituant Majoritaire

de l'Huile Essentielle de l'Anvillea radiata Coss et Dur. M. Akssira, F. Mellouki, M. Aitigri, F. El Hanbali, S. Ait Abdallah, Oulmokhtar et H. Alilo

Laboratoire de chimie Bioorganique et Analytique UFR 35C/97 F.S.T. Université Hassan II - Mohammedia BP 146.

CA 42 UTILISATION DES TECHNIQUES RMN 2D DANS LA DETERMINATION DE STRUCTURE DE PRODUITS NATURELS CAS DES HUMULENOLIDES. H. ALILO, F. ELHANBALI, A. SAOUF, A. ELHAKMAOUI, F. MELLOUKI, M. AKSSIRA.

Laboratoire de Chimie Bioorganique et Analytique UFR 35C/97(Biotechnologie et Génie de Dépollution), Faculté des Sciences et Techniques - Mohammedia.

CA 43 Construction d'un modèle du récepteur sérotoninergique 5ht_{2c}. A. Farce¹, S. Dilly, S.Yous¹, B. Benaji², P. Berthelot¹, P. Chavatte¹

1- Laboratoire de Chimie Thérapeutique, EA 1043, Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques, 3 rue du Professeur Laguesse, BP 83 - 59006 Lille Cédex, France.

2- Groupe de pharmacologie - Département de Biologie, Faculté des Sciences Aïn Chock, BP 5366 Casablanca, Maroc.

CA 44 l'identification moléculaire des souches de Fusarium oxysporum f.sp. radialis-lycopersici sur la base de la séquence du gène de la tomatinase. Khalid Lairini and Badr Din Rossi Hassani

Lab. Génétique Moléculaire, ERVABIM, FST Tanger, Université Abdelmalek Essaadi. E. mail : lairinikhalid@yahoo.fr

CA 45 ETUDE EXPERIMENTALE ET THEORIQUE DE LA REACTION DE CYCLOADDITION DIPOLAIRE -1,3 DE LA DIARYLNITRILIMINE SUR DES DIPOLAROPHILES FLUORES. N. NAJI*et K. MARAKCHI**.

* Laboratoire de Chimie des Plantes et de Synthèse organique et Bio- organique, département de chimie, Faculté des Sciences, Université Mohammed V, Rabat. ** Laboratoire de Chimie théorique, département de chimie, Faculté des Sciences, Université Mohammed V, Rabat.

CA 46 ETUDE DE LA STRUCTURE-ACTIVITE DE 2 MOLECULES EXTRAITES DE L'ARGANIER (tocopherols et saponines) : INTERET DANS LA PREVENTION DU CANCER DE LA PROSTATE

Bennani H.¹, Drissi A.¹, Giton F.², Charrouf Z.³, Fiet J.², Adlouni A.¹

¹ Laboratoire de Recherche sur les Lipoprotéines, Faculté des Sciences Ben M'sik, Casablanca, Maroc. ² Equipe de Recherche Emi INSERM 03-37, Centre de Recherches Chirurgicales, CHU Henri Mondor, Faculté de Médecine, Créteil, France. ³ Département de chimie, Faculté des Sciences, Université Mohammed V, Rabat, Maroc

CA 47 Etude expérimentale et approche théorique de la chaleur molaire spécifique d'excès en fonction de la température de quelques systèmes binaires oxalcanes + n-alcane. M. Zouine^A, R. Paramo Vela^B & C. Casanova^B. ^a Ecole Nationale d' Agriculture, B.P : S/40 Meknès-Maroc. ^b Departamento de Termodinamica y Fisica Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Valladolid, 47071 valladolid, Spain.

CA 48 - Dynamique moléculaire dans les micelles. "Two and Tree Step Model ", ¹A.Belmajdoub et ²N.Maâzouzi., 1- Labo. d'analyse Physico-Chimique, Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fes, 2- Labo. de Biochimie, Faculté des Sciences et Techniques Fes-Saiss, a.belmajdoub@ caramail .com

CA 49 - MESURE DE DIFFUSION PAR RMN AU MOYEN D'UN GRADIENT DE CHAMP RADIOFREQUENCE ¹A. Belmajdoub, ²D .Canet et ³N. MAAZOUZI. 1- Labo. d'analyse Physico-Chimique, Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fes. 2- Labo. de Methodologie RMN , Nancy. 3- Labo. de Biochimie, Faculté des Sciences et Techniques Fes-Saiss. a.belmajdoub@ caramail .com

CA 50 - Quantitative Structure-Conductivity Relationships of Polythiophenes Using Statistical Methods and Neural Networks. M. Elhallaoui^{1,*}, M. Elasri², M. Bouachrine³, F.C. Ouazzani² T. Lakhlifi⁴. ¹ Département de chimie Faculté des sciences Dhar Elmehrez Université Sidi Mohamed Ben Abdellah BP.2202 ATLAS Fès, MAROC. elhallaouimenana@yahoo.fr