

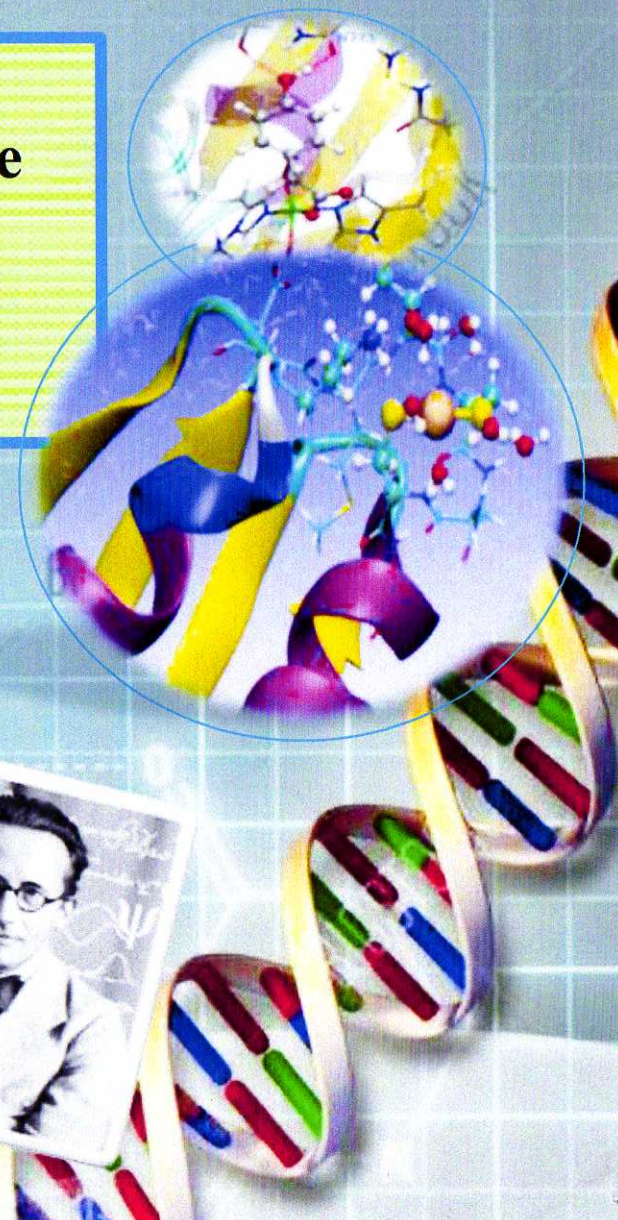
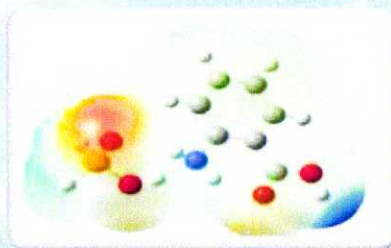


République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Abbes Laghrou – Khenchela
Faculté des Sciences et technologie - Département des Sciences de la Matière
Laboratoire Capteurs, Instrumentations et Procédés (LCIP)



Organisent :
**Les 1^{ères} Journées Nationales d'Etude
sur la Chimie Théorique et ses
Applications (JCTA1-21)**
13,14 et 15 Décembre 2021

Equipe de Chimie des Matériaux (CM)





République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université -Abbes Laghrou – Khenchela
Faculté des Sciences et technologie - Département des Sciences de la Matière
Laboratoire Capteurs, Instrumentations et Procédés (LCIP)



Objectifs

Les 1^{ères} Journées d'Etude sur la Chimie Théorique (JCTA1-21) est une manifestation scientifique organisée par l'équipe de Chimie des Matériaux (CM) du Laboratoire Capteurs, Instrumentations et Procédés (LCIP), en collaboration avec le département des sciences de la matière, faculté des Sciences et de technologie. Cette journée a pour objectif de permettre aux doctorants et enseignants-chercheurs d'assister à des ateliers pour acquérir des nouvelles techniques de calculs quantiques et leurs applications dans des divers domaines de chimie et d'échanger leurs idées et expériences

Thématiques

- A. Chimie théorique et modélisation moléculaire
- B. Chimie pharmaceutique et analytique.
- C. Chimie des matériaux.

Programme des journées

Lundi 13 Décembre 2021		Mardi 14 Décembre 2021	
9:00 – 9:30	Cérémonie d'ouverture (Auditorium) Directeur de l'université : Prof. Chala Abd Elouahab Doyen de la faculté des sciences et Technologie : Dr Aboudi Abd Elaziz Président des journées JCTA1-21 : Dr Benyea Nabil	8:00 – 11:00	Atelier 3 : Dépistage des propriétés de toxicité « Prédiction des propriétés toxicologiques »
9:30-11:00	In silico approches de processus de conception/reconception de médicaments Cas de SARS-CoV-2 (Covid-19) Conférence Plénière : <i>Pr Touhami Lanez, Univ-Eloued</i> " Processus de conception/reconception de médicaments "	11:00 – 13:00	Déjeuner
11:00 – 12:00	Déjeuner	13:00 – 18:00	Atelier 4 : Docking Moléculaire Optimisation structurale Apprentissage sur le logiciel AutoDock Visualisation des interactions protéine-ligand par logiciel Discovery Studio Visualisation des interactions protéine-ligand par le serveur PLIP
12:00 – 15:00	Atelier 1 : Énumération combinatoire d'une bibliothèque de la chloroquine substituée Apprentissage sur l'application SmiLib v2.0	Mercredi 15 Décembre 2021	
15:00 – 15:30	Pause-café	09:00-11 :00	President de la session Plénière : Dr Benlecheb,T <i>Pr Doniazed Hannachi, Univ - Sétif 1.</i> Théorie de la Fonctionnelle de Densité. La réactivité chimique.
15:30 – 18:30	Atelier 2 : Dépistage ADMET Evaluation des paramètres pharmacocinétique et drug-likeness	11:00–13:00	Déjeuner
		13:00 – 17:00	Atelier 5 : Chimie Théorique Modulation des propriétés optiques non linéaires de molécules conjuguées. Étude de la réactivité chimique de la double liaison carbone-carbone par calculs quantiques.
		17:00 – 17:30	Cérémonie de clôture

