

PROJET PNR

SITUATION ACTUELLE DU PROJET:

Intitulé du PNR

SCIENCES FONDAMENTALES

Code du Projet (Réservé à l'administration)

8 /u24 /4814

Nouveau projet : X

Projet reformulé: (Joindre une copie de la notification de l'avis de reformulation)

1.1. Domiciliation du projet

LABORATOIRE DE PHYSIQUE à GUELMA (UNIVERSITE DE GUELMA)

1.2. Identification du projet

1.2.1- Nature de la recherche

Fondamentale X Appliquée Développement Formation

Titre du projet :	INVESTIGATIONS DANS LES COMPLEXES D'INCLUSION VIA LA METHODE ONIOM
Acronyme du projet :	IDCIVMO
Intitulé du thème :	MODELISATION MOLECULAIRE
Intitulé de l'axe :	CHIMIE MOLECULAIRE ET THEORIQUE
Intitulé du domaine :	CHIMIE
Mots-clés (12 max)	Cyclodextrine Inclusion Complexe DFT ab initio ONIOM Solvant Vitamine A CENS Piroxicam Methanephrine Epinephrine
Durée estimée du projet	02 ans

1.2.2 Résumé du projet (250 mots)

Les complexes d'inclusions sont des espèces formées de deux molécules, une molécule hôte, possédant une cavité dans laquelle une deuxième molécule, nommée « invitée », peut être encapsulée, formant ainsi une seule entité stable nommée « supramolécule » sans l'établissement de liaisons covalente. Bien qu'il existe une variété importante de molécules présentant ces « pièges moléculaires », les cyclodextrines (CD) sont les plus connues et les plus utilisées.

Elles peuvent être considérées comme des capsules vides de taille variables pouvant accueillir des molécules très variées, allant des réactifs polaires comme les acides ou les amines, jusqu'aux hydrocarbures aliphatiques et aromatiques, en passant par les halogènes. Leur caractère biodégradable les prédispose à des applications importantes dans les domaines agro-alimentaires et pharmaceutiques. L'encapsulation dans les cyclodextrines permet en effet de protéger des molécules fragiles ou d'assurer leur libération lente et contrôlée. De plus, la solubilisation de médicaments insolubles dans l'eau forme de complexe d'inclusion dans les cyclodextrines permet de disposer de préparations injectables.

La limite des procédures expérimentales pour suivre et étudier ces supramolécules a permis à la modélisation moléculaire d'investir ce domaine et de devenir un outil indispensable dans la détermination géométrique, physico-chimique et biologique de ces systèmes.

Un nombre important d'études expérimentales et théoriques a été réalisé ces dernières années pour mieux prédire et comprendre les structures, les propriétés et les interactions moléculaires des systèmes supramoléculaires. Une combinaison entre ces deux études est avérée très efficace dans la résolution de plusieurs problèmes liés aux complexes d'inclusions.

Sur la base des travaux déjà réalisé dans le cadre des doctorats de Mme Attoui Wassila et Mme Madi Fatiha nous proposons d'étudier d'autres exemples de complexes d'inclusion, susceptibles de donner de modèles performants, au moyen des techniques de la modélisation moléculaire, en particulier la méthode ONIOM (Our own N-layered Integrated molecular Orbital and molecular Mechanics) qui devrait assurer le meilleur compromis entre le coût computationnel et la précision des résultats.

1.3. Problématique du projet

Sommaire (250 mots)

Pour l'étude des différents complexes d'inclusions on procède à :

1. Recherche des minimums énergétiques de la complexation avec la méthode PM3
2. Recherche des minimums énergétiques de la complexation avec la méthode PM6
3. Calculs des énergies de complexation, interaction et de déformation des minimums
4. Analyse et comparaison des résultats
5. Optimisations avec la méthode ONIOM2
6. Analyse des résultats et détermination de la méthode la plus efficace
7. Détermination de l'effet de solvant d'une manière explicite
8. Détermination de l'effet de solvant d'une manière implicite (ONIOM3)
9. Analyse NBO et calcul de l'énergie de stabilisation
10. Dédutions des interactions intermoléculaires
11. Calcul des énergies de liaisons d'hydrogène
12. Analyse des géométries des complexes
13. Relié les données géométriques aux interactions intermoléculaires.
14. Combinaison des résultats théoriques et expérimentaux
15. Conclusion

1.4. Objectifs du projet

Lister les objectifs scientifiques, techniques, technologiques, socio-économiques et/ou socioculturels. (250 mots)

Considérant l'objectif de ce projet et l'état des connaissances relativement à la modélisation moléculaire des complexes d'inclusion, le devis de recherche qui s'impose est de type qualitatif. Déjà nous avons pu déterminer d'une manière quantitative, lors de précédents travaux, une méthode ONIOM permettant de donner de bons résultats avec un meilleur coût computationnel par rapport à des calculs DFT.

Ce projet de recherche vise à améliorer cette méthode sur d'autres modèles théoriques de complexes d'inclusion, tel que : CENS \ β CD, piroxicam \ β CD, vitamine A \ β CD et dans le cas complexe de Deoxycycline \ CRYSMEB (cyclodextrine modifiée).

En plus des déterminations géométriques les techniques de modélisation moléculaire permettent la détermination des différentes interactions intermoléculaires via le calcul de l'énergie de stabilisation des complexes d'inclusions. Ce qui permet de prédire leurs stabilités et de comprendre la logique qui pousse à leurs formations pour pouvoir exploiter leurs propriétés spécifiques afin de proposer un modèle idéal qui pourra servir à la synthèse des complexes sur demande.

A plus long terme, notre objectif est que les concepts développés initialement dans le de système organique puissent être appliqués aux composés biologiques et on peut même proposer des modèles permettant d'améliorer les performances des cyclodextrines vis-à-vis d'une classe thérapeutique donnée.

1.5. Description du projet

1.5-1- Etat des connaissances sur le sujet (500 mots)

Très peu d'études ont été réalisées jusqu'à maintenant sur les complexes d'inclusion via la méthode ONIOM.

Tout à commencer vers la fin des années 90 où Carlo Jaime [Theochem, 1996] et E.A Castro [Theochem, 2000] ont pu déterminer, sur quelques exemples, l'efficacité prédictive des champs de force de la mécanique moléculaire (MM+, MM2, MM3 et OPLS) dans la reproduction de l'observation expérimentale.

Puis il s'est avéré que la mécanique moléculaire ne décrit pas exactement les géométries et les interactions intermoléculaires du fait de la non représentation des densités électroniques et en plus les interactions intermoléculaires d'un certain nombre de champ de force sont connues d'être de mauvais reproducteur.

L'utilisation des méthodes semi empirique, en particulier les méthodes les méthodes AM1 et PM3A, a commencé en 1995. Parmi eux, Bodor et al [Int. J. Quant. Chem, 1997] ont pu relater les performances de la méthode AM1 dans les études de complexes d'inclusion d' α et β cyclodextrine alkylées malgré l'apparition de quelques différences avec les résultats expérimentaux. En 1999 Avakyan et al [Russ. Chem. Bull, 1999] ont judicieusement démontré la performance de la méthode PM3 dans l'estimation des liaisons d'hydrogène de la β -cyclodextrine en proposant pour la première fois une symétrie C7 pour la β -cyclodextrine. L'ors d'une étude comparative entre les méthodes AM1 et PM3 réalisée, en l'an 2000, par Guo et al [J. Incl. Phenom. Chem, 2000] il a été conclu que la méthode PM3 est plus avantageuse dans les études des complexes d'inclusion. Malgré que les méthodes semi empirique soient des méthodes quantiques mais les approximations introduites, qui reposent sur des effets expérimentaux, freine leur précision.

L'utilisation des méthodes ab initio et DFT se résumait au départ à de simples calculs de « single point » des complexes et très peu d'études ont été effectuées sur les optimisations de géométries de complexes d'inclusions en raison du coût computationnel (plus de 30 jours) procréé par la dimension élevée des systèmes.

Ces derniers temps un grand intérêt est porté sur les méthodes dites « hybrides » où des approches différentes avec des précessions variables sont appliquées sur des parties

différentes du système. Elles commencent à trouver de succès auprès des utilisateurs des systèmes supramoléculaires car le coût computationnel diminue considérablement et le système est considéré en entier sans recourir à des simplifications supplémentaires.

Parmi ces méthodes, les méthodes ONIOM développé par Morokuma et al [J.Am.Chem.Soc, 1998] sont une application spéciale des QM\QM et QM\MM. Chun Li, [J. Inc. Phenom. Macro. Chem, 2007] en 2007 , a été le premier à appliquer avec succès une combinaison de méthode semi empirique, PM3, et des calculs Hartree Fock sur le système quercetin \ β cyclodextrine. De son coté, Ming-Ju Huang [Int. J. Quantum. Chem. 2009] a pu obtenir une reconnaissance chirale des énantiomères de salsolinol, le N-Methyl-Salsalinol, et le 1-Benzyl-tetrahydroisoquinoline via des calculs ONIOM2.

Dans le cadre d'une recherche d'ordre structurale du système Venlafaxine- β cyclodextrine et CENS- β CD nous avons pu proposer un modèle géométrique à ce complexe à l'aide des méthodes ONIOM2 et ONIOM3 [Khatmi, Theochem, 2009]. Le coût computationnel ne dépassait pas les 05 jours avec une précession de résultats de qualité DFT. Il en ressort que cette méthodologie va au-delà des limitations rencontrées avec les méthodes ab-initio et DFT, elle permet d'envisager un traitement quantique de systèmes complexes, susceptibles de comporter plusieurs centaines d'atomes, ou plus.

1.5-2- Méthodologie détaillée (300 mots)

La méthode utilisée au cours de ce travail sera divisée en trois étapes :

- Recherche conformationnelle du minimum de l'inclusion
 - Calculs ONIOM
 - Calculs NBO et Analyse
1. La démarche adoptée dans la recherche du minimum global repose sur un mécanisme théorique décrit dans la littérature [Khatmi, Theochem, 2009]. En premier, les molécules de départ sont construites à l'aide des interfaces graphiques des logiciels de modélisation. Puis, les deux structures (hôte et invitée) sont placées à une distance bien définie. La molécule invitée est déplacé selon un axe, par pas de 1 Å, vers la cavité de la cyclodextrine. A chaque pas, la molécule invitée est tournée, d'un angle de 10° jusqu'à 360°, autour d'un deuxième axe, afin d'explorer tout l'espace conformationnel. L'énergie du système est calculée dans chaque étape en utilisant la méthode semi empirique, PM6. Cette opération permettrait, en final, de localiser le minimum global de la complexation.
 2. Une fois le minimum déterminé au niveau de calcul PM6, nous procéderons à des calculs de type ONIOM en utilisant différentes approches et différentes bases. Cette méthode consiste à découper le système en deux couches différentes. La partie active (molécule invitée) est traitée avec le niveau de théorie le plus élevé, en revanche la molécule de cyclodextrine, qui joue le rôle d'environnement, est traité avec un niveau inférieur. A la fin de cette étape nous pourrons proposer un modèle géométrique aux

complexes d'inclusions étudiés.

3. Toutes les propriétés physico chimiques des complexes d'inclusions peuvent être calculées au départ du modèle géométrique proposé. Même les effets de solvant peuvent être envisagés. Ainsi, un nombre de molécules de solvant seront rajoutées au système puis la méthode ONIOM3 est appliquée au système en entier, en affectant le niveau de théorie le plus faible au solvant. L'application des calculs NBO permettra de quantifier, via le calcul de l'énergie de stabilisation E^2 , l'interaction intermoléculaires, entre la molécule hôte et invitée, à l'intérieure de la cavité de la cyclodextrine.

1.5-3- Principales références bibliographiques

1. Liu L., Li X.S., Mu T.W., Guo Q.X., Liu Y.C., *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.*, **2000**, 38, 199-206.
2. Cao Y., Xiao X., Lu R., Guo Q., *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.*, **2003**, 46, 195-200.
3. Yang E.C., Zhao X.J., Hua J.K., *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **2004**, 712, 75-79.
4. Morpurgo S., Bossa M., Morpurgo G.O., *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **1998**, 71, 429.
5. Barbiric D.J., Castro E.A., De Rossi R.H., *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **2000**, 532, 171.
6. Matei I., Nicolae A., Hillebrand M., *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.*, **2007**, 57, 597-601.
7. Morokuma K., *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, **2002**, 360, 1149.
8. Vreven T., Mennucci B., da Silva C.O., Morokuma K., Tomasi J., *J. Chem. Phys.*, **2001**, 115, 62.
9. Kerdcharoen T., Morokuma K., *Chem. Phys. Lett.*, **2002**, 355, 257.
10. Khaldoun A. Al-Sou'od, *J. Incl. Phenom. Macrocyclic Chem.*, **2006**, 54, 123-127.
11. Ming-Ju H, Zhe Q and Yi-Ming L, *Int.J.Quantum.Chem*; 2009, 109, 81-90
12. Attoui W and Khatmi D, *Theochem*, 2009, 912, 38-43

1.6. Impacts attendus

Impacts directs et indirects (Scientifiques, socio-économiques, socioculturels)

Le thème pris en charge par notre équipe est un sujet d'actualité et sur lequel plusieurs laboratoires occidentaux travaillent et l'importance des informations obtenues avec la modélisation moléculaire peuvent se mesurer par l'exigence de certains laboratoires pharmaceutiques d'accompagner les tests in vivo et in vitro par des tests en « computing »,

pour les molécules biologiquement actives.

Son étude va nous permettre de développer un savoir faire à la fois dans le domaine de la modélisation moléculaire, de la chimie informatique, et la simulation moléculaire. L'exploitation des résultats issus de la modélisation moléculaire permettrait d'éliminer un nombre assez important d'activité expérimentale qui est devenue, au fil des temps, très onéreuse.

Créer un pôle régional dans les techniques de la modélisation moléculaire est une nécessité du fait de l'inexistence d'une part de laboratoire de modélisation dans notre région et d'une autre part de l'absence de son enseignement en graduation.

Ce projet devrait exercer un puissant effet fédérateur pour créer une activité dans ce domaine entre les universités de Guelma, Annaba et Tébessa.

1.7. Planning des tâches / année

Taches	semestre 1	semestre 2	semestre 3	semestre 4
Les tâches suivantes sont consacrées à l'étude des complexes suivants : β cd-dopamine, β -cd Vitamine A, crysmeb-deoxycyline et β cd-piroxicam.	- bibliographie - Optimisation des molécules de départ à l'aide de la fonction (B3LYP :6-31G(d)) - localisation des minimums de la complexation avec les méthodes PM3 et PM6	- détermination des minimums avec les différentes méthodes ONIOM. - Détermination de l'effet de solvant avec les méthodes PCM et COSMO. - comparaison des résultats avec un calcul DFT de niveau élevé (B3LYP :631G+(d)).	Les calculs NBO et déterminations des différentes interactions intermoléculaires. Etude particulière sur les liaisons d'hydrogène. Relié les résultats obtenus avec des résultats expérimentaux. Détermination des différentes propriétés physico-chimiques des complexes d'inclusion Validation des résultats	Rédaction d'articles

1. Identification du porteur (chef) de projet

Nom & Prénom	Khatmi Djameleddine		
Grade	Professeur		
Spécialité	Chimie		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input checked="" type="checkbox"/> Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/> Associé(3) <input type="checkbox"/> Autre(4) <input type="checkbox"/>		
Email	Khatmi.djameleddine@gmail.com		
Adresse professionnelle	Université de Guelma Laboratoire de Physique à Guelma- Faculté des Sciences BP : 401 Guelma		
Contacts	Tel : 037200376	Fax :037207268	GSM :0771958078
Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)		Année	Etablissement
1 (Bacc.)	Sciences	1982	Académie d'Annaba
2 (M)	Chimie	1987	Université de Reims

3 (doct.)	Chimie	1991	Université de Bordeaux
Participation à des programmes de recherche (<i>nationaux, Internationaux, multisectoriels</i>)			
Intitulé du Programme		Année	Organisme
Synthèse de nouveaux catalyseurs stanniques pour les polyuréthannes (CNEPRU)		1997	MESRS
Recherche d'une nouvelle composition de produit céramique contenant des produits locaux CNEPRU		2003	MESRS
Détermination des propriétés QSAR entre la structure et l'activité biologique des CENS CNEPRU		2006	MESRS
Modèle moléculaire de complexes d'inclusions de molécules neurotransmetteurs et la β -cyclodextrine (CNEPRU)		2009	MESRS
Les complexes d'inclusion (CNEPRU)		2010	MESRS
Lister vos trois derniers travaux les plus importants (recherche/recherche développement)			
1	F Madi, D Khatmi, N Dhaoui, A Bouzitouna, M Abdaoui, A Boucekkine, CR Chimie, 2009 , 12, 1305-1312		
2	Attoui W and Khatmi D, Theochem, 2009 , 912, 38-43		
3	F Madi, D Khatmi and L Leila, J. Mol. Liq, 2010 , 1, 1-5		

Visé du Chef d'établissement
de rattachement :

Date : 03.10.10
Signature :


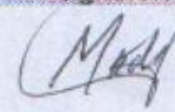
رئيس الجامعة
الأستاذ الدكتور محمد بن محمد



3. Chercheurs impliqués dans le projet (une fiche par chercheur)

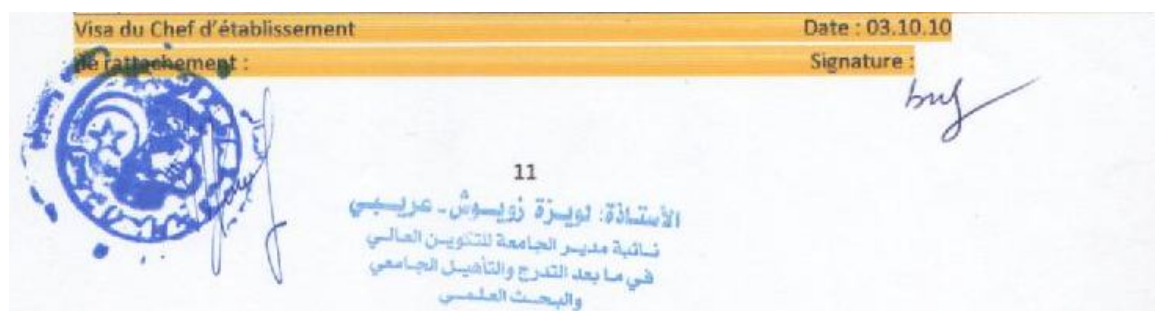
Nom & Prénom	Madi Fatiha
Grade	Maitre de conférences B

Spécialité	Chimie Théorique		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input checked="" type="checkbox"/>	Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/>	Associé(3) <input type="checkbox"/> Autre (4) <input type="checkbox"/>
Email	fatihamad@yahoo.fr		
Adresse professionnelle	Université de Guelma BP 401 Guelma		
Contacts tel :	Tel : 0554842696	Fax :037207268	GSM :
Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)	Année	Etablissement	
1	D.E.S	2002	Université de Guelma
2	MAGISTER	2004	Université de Guelma
3	DOCTORAT	2010	Université de Guelma
Participation à des programmes de recherche			
Intitulé du Programme		Année	Organisme
Détermination des propriétés QSAR entre la structure et l'activité biologique des CENS CNEPRU		2006	MESRS
Modèle moléculaire de complexes d'inclusions de molécules neurotransmetteurs et la β -cyclodextrine (CNEPRU)		2009	MESRS
Les complexes d'inclusion (CNEPRU)		2010	MESRS
A) Lister vos deux derniers travaux les plus importants			
1	F Madi, D Khatmi and L Leila, J. Mol. Liq, 2010 , 1, 1-5		
2	F Madi, D Khatmi, N Dhaoui, A Bouzitouna, M Abdaoui, A Boucekkine, CR Chimie, 2009 , 12, 1305-1312		
B) Lister les autres projets dans lesquels le chercheur est impliqué			
C) Tâches affectées au chercheur (à mentionner clairement):			
1	Etude des inclusions à base d'acides aminés		
2	Calcul de mécanique moléculaire et ONIOM		
3	Détermination des interactions intermoléculaires		

3	Détermination des interactions intermoléculaires
Visa du Chef d'établissement de rattachement: 	
Date: 03.10.10 Signature: 	
الأستاذ الدكتور محمد حماد مادي 10	

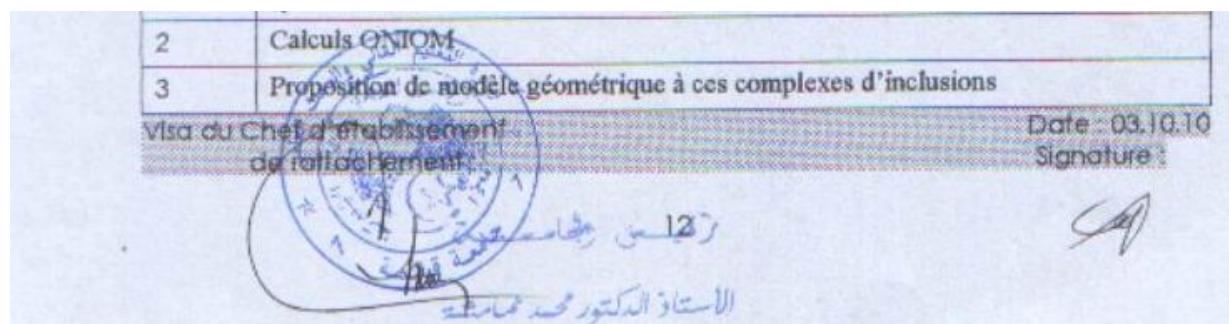
Chercheurs impliqués dans le projet (une fiche par chercheur)

Nom & Prénom	Benghodbane Soraya		
Grade	Chargés de cours		
Spécialité	Chimie Théorique		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input type="checkbox"/>	Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/>	Associé <input type="checkbox"/> X Autre (4)
Email	Benghodbane_soraya@yahoo.fr		
Adresse professionnelle	Université Badji Mokhtar Annaba Faculté des sciences Département de chimie		
Contacts tel :	Tel :	Fax :	GSM :
Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)		Année	Etablissement
1	DES EN CHIMIE	1993	
2	MAGISTER EN CRISTALLOGRAPHIE	1997	
3			
Participation à des programmes de recherche			
Intitulé du Programme		Année	Organisme
A) Lister vos deux derniers travaux les plus importants			
1	-V ^{èmes} journées de chimie 11-12-13 novembre 2001. Université mantouri –constantine Bouchelaghem W , Benghodbane S, Benmoussa A. Université de annaba."Synthèse et caractérisation de l'oxyde P4W8O23.5"		
2	-1 ^{er} SEMINAIRE DE CHIMIE 16-17 Avril 2002. Université de Tebessa Bouchelaghem W , Benghodbane S, Benmoussa A. Université de annaba "Substitution d'un atome de Mg par le Li dans le composé Mg3Ti4P6O24"		
B) Lister les autres projets dans lesquels le chercheur est impliqué			
C) Tâches affectées au chercheur (à mentionner clairement):			
1	Etude du complexe d'inclusion deoxycyline /CRYSMEB		
2	Calcul ONIOM		
3	Calculs des énergie H-bond et proposition de modèle géométrique		



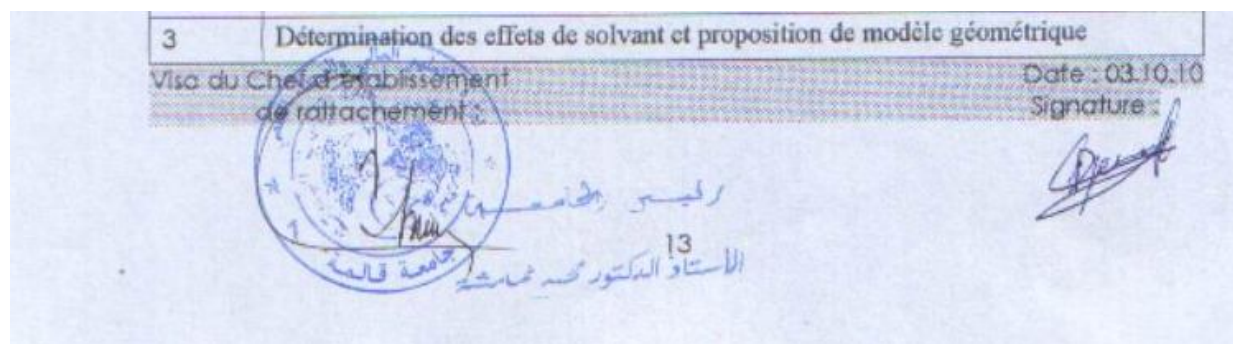
Chercheurs impliqués dans le projet (une fiche par chercheur)

Nom & Prénom	Nouar Leila		
Grade	Maitre de conférences A		
Spécialité	Chimie Théorique		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input checked="" type="checkbox"/> Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/> Associé(3) <input type="checkbox"/> Autre (4) <input type="checkbox"/>		
Email	Nouar.leila@yahoo.fr		
Adresse professionnelle	Universite 8 Mai 45 Guelma		
Contacts tel :	Tel : 0661166767	Fax :	GSM :
Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)		Année	Etablissement
1	INGENIORAT		Université de Guelma
2	MAGISTER		Université d'Annaba
3	DOCTORAT		Université d'Annaba
Participation à des programmes de recherche			
Intitulé du Programme		Année	Organisme
A) Lister vos deux derniers travaux les plus importants			
1	Magister soutenu (JUIN 2010)		
2			
B) Lister les autres projets dans lesquels le chercheur est impliqué			
C) Tâches affectées au chercheur (à mentionner clairement):			
1	Détermination des énergies de complexation des esters de vitamine A avec la β -cyclodextrine		
2	Calculs ONIOM		
3	Proposition de modèle géométrique à ces complexes d'inclusions		



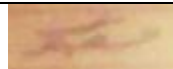



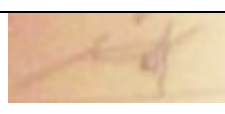
Chercheurs impliqués dans le projet (une fiche par chercheur)

Nom & Prénom	Djemil Rayenne		
Grade	Chargés de Cours		
Spécialité	Chimie Théorique		
Statut	Enseignant chercheur(1) <input checked="" type="checkbox"/> Chercheur permanent(2) <input type="checkbox"/> Associé(3) <input type="checkbox"/> Autre (4) <input type="checkbox"/>		
Email	messdjem@gmail.com		
Adresse professionnelle	Département de chimie Université de 8 mai 45 guelma		
Contacts tel :	Tel : 0778194972	Fax :	GSM :
Diplômes Obtenus (Graduation, Post-Graduation)		Année	Etablissement
1	Ingénieur	1997	Université Badji mokhtar Annaba
2	magister	2004	Université 08 mai 45 guelma
3			
Participation à des programmes de recherche			
Intitulé du Programme		Année	Organisme
Modèle moléculaire de complexes d'inclusions de molécules neurotransmetteurs et la β -cyclodextrine (CNEPRU)		2009	MESRS
A) Lister vos deux derniers travaux les plus importants			
1	séminaire - Homs (Syrie, Avril 2010)		
2	Ecole de chimie théorique (Maroc juin 2009)		
B) Lister les autres projets dans lesquels le chercheur est impliqué			
C) Tâches affectées au chercheur (à mentionner clairement):			
1	Etude des complexes d'inclusion à base de molécules neurotransmetteurs		
2	Calcul ONIOM		
3	Détermination des effets de solvant et proposition de modèle géométrique		



4. Composante de l'équipe de recherche

(Tableau anonyme : six personnes au maximum dont 3 chercheurs confirmés. Inscrire le responsable du projet en début de liste, ne pas inscrire de nom, ni l'intitulé de l'établissement de rattachement)

Grade universitaire ou scientifique	Dernier diplôme obtenu	Tâche principale affectée dans le projet	Emargement
1- professeur	Doctorat	Les calculs ONIOM	
2-maitre de conférences B	Doctorat	Modélisation des complexes à base d'acide aminé	
3-maitre de conférences A	Doctorat	Etude des complexes d'inclusion d'esters de vitamine A	
4- chargé de cours	Magister	Etude des complexes d'inclusion de molécules neurotransmetteurs	
5-chargé de cours	Magister	Modélisation du complexe d'inclusion : CRYSMEB/Deoxycyline	

-Ne pas inscrire dans ce tableau les noms des membres de l'équipe, ni leurs établissements de rattachement.

-Indiquer en tête de liste les informations relatives au porteur (chef) de projet.

5. Equipements scientifiques disponibles

5.1- Matériel existant pouvant être utilisé dans l'exécution du projet			
Nature	Localisation	Observations	
06 ordinateurs bi processeurs	Bureaux des enseignants	On utilise, en plus, nos ordinateurs personnels.	
5.2 – Matériel et Mobilier de Bureau à acquérir pour l'exécution du projet			
Nature	Montant en DA	Destination	Observations
Matériel informatique	2500000.00	Centre de calcul	

Détailler la liste des matériels et mobiliers dont les montants sont mentionnés dans l'annexe financière.

5. Annexe financière : Budget et postes de dépenses prévisionnels (exprimés en DA)

Intitulés des postes de dépenses par année	1 ^{ère}	2 ^{ème}
Frais de séjour scientifique et de déplacement à l'étranger	1000000.00	1000000.00
Frais de séjour scientifique et de déplacement en Algérie	500000.00	500000.00
Frais d'organisation de rencontres scientifiques	1000000.00	1000000.00
Honoraires des enquêteurs	---	---
Honoraires des guides	---	---

Frais de travaux et de prestations	---	---
Matériels et instruments scientifiques	---	--
Matériel informatique	2500000.00	500000.00
Matériels d'expérience (animaux, végétaux, etc..)	---	---
Mobilier de bureau et de laboratoire	---	---
Entretien et réparation	---	---
Produits chimiques	---	---
Produits consommables	---	---
Composants électroniques, mécaniques et audio- visuels	---	---
Accessoires et consommables informatiques	300000.00	200000.00
Papeterie et fournitures de bureau	200000.00	200000.00
Périodiques	---	----
Ouvrages et documentation scientifiques et techniques	----	---
Logiciels	1000000.00	1000000.00
Impression et Edition	100000.00	100000.00
Affranchissements Postaux	5000.00	5000.00
Communications téléphoniques, Fax, Internet	50000.00	50000.00
Droits de douanes, Assurances	---	---
Carburant	---	---
TOTAL DES CREDITS OUVERTS :	7105000.00	5005000.00

Remarque : Les besoins financiers en devises doivent être exprimés en Dinars Algériens, après conversion au taux de change en cours.