



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة قسنطينة 1 – الإخوة منتوري
كلية العلوم الدقيقة



PEOPLE'S DEMOCRATIC REPUBLIC OF ALGERIA
MINISTRY OF HIGHER EDUCATION AND SCIENTIFIC RESEARCH
Constantine 1 University – Frères Mentouri
Faculty of Exact Sciences

ANNONCE DE SOUTENANCE



Conformément à la décision n° 100 du 12 novembre 2025 autorisant la soutenance d'une thèse de doctorat, le Vice-doyennat chargé de la post-graduation, de la recherche scientifique et des relations extérieures, a n n o n c e la soutenance publique d'une thèse de doctorat le :

Judi 18 Décembre 2025 à 16H00

**Lieu : Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale
Constantine 1 – Frères Mentouri**

Filière : CHIMIE

Spécialité : Chimie théorique et modélisation moléculaire des systèmes complexes.

Doctorant : **KHIRECHE Moncef**

Sur le thème : « Détermination de la structure et des propriétés photochimiques des complexes mono-et polymétalliques à base de Schiff »

Devant le jury d'examen :

	Nom et prénoms	Grade	Etablissement d'appartenance
Président	BENSEGUENI Mohamed Abdellatif	M.C.A	Université Constantine1, Frères Mentouri
Directeur de thèse	FERHATI Azedine	Professeur	Université Hadj Lakhdar-Batna-1
Examineurs	BOUDAREN Chaouki	Professeur	Université Constantine1, Frères Mentouri
	ASSABA Rachida	Professeure	Université Constantine-1, Frères Mentouri
	ZAITER Abdallah	M.C.A	Université Larbi Ben M'Hidi – Oum El Bouaghi.
	ZOUCHOUNE Bachir	Professeur	Université Larbi Ben M'Hidi – Oum El Bouaghi.

A b s t r a c t

This theoretical study, based on Density Functional Theory (DFT), investigates two families of metal complexes: sandwich complexes and bimetallic complexes. The objective is to predict and understand their structural and electronic properties, particularly the nature of metal-ligand bonding.

The first part examines sandwich complexes with cyclononatetraenyl (C_9H_9)[−] and 1,4,7- triazacyclononatetraenyl ($C_6N_3H_6$)[−] ligands, exploring the feasibility of their synthesis with various transition metals. Analysis of electron density (EDA and NEDA) quantifies the ionic, covalent, and steric contributions to metal-ligand bonding.

The second part analyzes bimetallic complexes with β -diketiminato (BDI) and imido ligands, using different transition metals (Ti, V, Nb, Cr, Mn, Fe, Co, Ni). The study explores the impact of the metal and its coordination environment on the electronic structure and spin state, employing various DFT functionals (B.P-86, B-3.L.Y.P, OPBE) and including London dispersion interactions (DFT-D). The analysis aims to establish correlations between electronic structure, spin state, and the σ -donation and π -back- donation properties of the ligands.