



# Université Yahia Farès de Médéa

## Conférence & Atelier



### Intervenant

Pr. Yacine Benguerba

Laboratoire de Biopharmacie et Pharmacotechnie (LPBT)

Université Ferhat Abbas Sétif 1 – Algérie

Date : 25/11/2025

Lieu de la conférence : La grande **salle de conférences ARSELAN**, Pole Urban de Médéa.

**Tous les enseignants-chercheurs et les étudiants sont vivement invités à participer à cet événement scientifique.**

9h00-12h00

Titre de la conférence

**« La DFT et la modélisation moléculaire : du calcul quantique à la résolution des défis industriels »**

**(Density Functional Theory and Molecular Modeling: From Quantum Calculations to Industrial Problem-Solving)**

#### ◆ Résumé

La Density Functional Theory (DFT) est aujourd’hui un pilier de la recherche scientifique appliquée.

Au-delà de la théorie, elle constitue un outil stratégique pour l’innovation industrielle, permettant de comprendre et de maîtriser les phénomènes à l’échelle atomique qui conditionnent la performance des matériaux, catalyseurs, solvants et procédés.

Cette conférence montrera comment la DFT et la modélisation moléculaire, associées à des outils tels que COSMOtherm, Materials Studio ou Turbomole, permettent d’optimiser des procédés complexes dans les domaines de :

- a. La conversion catalytique (ex. déshydratation de bioéthanol en éthylène sur Fe-ZSM-5),
- b. Les solvants eutectiques profonds (DES) pour la récupération et le raffinage des métaux,
- c. Et la stabilité des systèmes pétroliers, notamment la dispersion des asphaltènes lors de l’extraction, du transport et du stockage du pétrole.

Les résultats issus de calculs DFT et COSMO-RS/COSMOtherm démontrent comment ces approches prédictives permettent d’identifier les interactions moléculaires responsables de l’agrégation ou de la solubilisation, et de proposer des solutions durables et éco-efficaces.

En conclusion, la conférence ouvrira sur la perspective du couplage DFT-IA, où le machine Learning exploitera les descripteurs quantiques pour accélérer la découverte de matériaux et de solvants innovants.

13h00 – 16h00

### Titre de l’atelier

**"De la DFT à la prédiction moléculaire : initiation à la modélisation quantique appliquée aux procédés industriels"**

Lien d’enregistrement: <https://forms.gle/s9p9CV1aptYoQUe79>

Lieu de l’atelier : **Salle informatique des services communs, Pole Urban de Médéa.**

#### ◆ Résumé pour l'affiche

Cet atelier est conçu comme une immersion pratique dans l’utilisation de la DFT et de la modélisation moléculaire pour comprendre et résoudre des problèmes réels de génie des procédés et de génie des matériaux.

Les participants apprendront à :

- Construire et optimiser des structures moléculaires avec Turbomole ou Materials Studio,
- Calculer des propriétés électroniques clés (énergies HOMO-LUMO, densité de charge, potentiel électrostatique, surfaces COSMO),
- Interpréter les résultats à l'aide de COSMOtherm pour prédire la solubilité, l'activité et la compatibilité de solvants (DES, hydrocarbures, polymères, etc.),
- Et relier ces données à des propriétés macroscopiques mesurables (viscosité, stabilité, rendement catalytique, pouvoir dispersant).

Une introduction à la fin illustrera comment les descripteurs DFT peuvent nourrir des modèles d'intelligence artificielle pour prédire rapidement la performance de matériaux et formulations complexes.