



Amani DIREM

MCA au Département des Sciences de la Matière

et Membre du Laboratoire des Structures, Propriétés et Interactions Interatomiques LASPI²A

 Université "Abbes Laghrour",
Khenchela, 40.000, Algérie

 direm.amani@univ-khenchela.dz

 +213.772.33.02.87

DIPLOMES ET FORMATIONS

Déc. 2021

Habilitation à diriger des recherches,
Spécialité: Chimie

2007-2016

Doctorat en Cristallographie
Université Frères Mentouri, Constantine

2004-2007

Magister en Sciences des Matériaux, Option:
Synthèse et Structure
Université Abbes Laghrour, Khenchela

2000-2004

Diplôme d'Études Supérieures DES en
Chimie, Option: Chimie organique
Université Chikh Larbi Tébessi, Tébessa

LANGUES

Arabe 

Anglais 

Français 

PARCOURS PROFESSIONNEL

Depuis 2022

Chef de l'équipe "MATériaux INNovants pour l'environnement, la santé et le stockage d'énergie"

Depuis Déc. 2021

Maître de conférences classe A

2020-2023

Responsable de Spécialité Master Chimie des matériaux

2019-2022

Membre du comité scientifique du département des sciences de la matière

DOMAINES DE COMPÉTENCES

- Diffraction des RX sur monocristaux et sur poudres.
- Résolutions et affinements structuraux sur monocristaux et sur poudres.
- Interactions interatomiques dans les solides.
- Théorie des graphes de *Bernstein* pour la description des liaisons hydrogène.
- Analyse de la surface de *Hirshfeld* pour l'étude des interactions interatomiques.
- Analyse topologique des complexes métalliques.
- *Docking moléculaire*, études *in vitro* et *in silico* des propriétés biologiques des matériaux.
- Spectroscopie Infra-rouge, Spectroscopie UV, Photoluminescence.
- Synthèse de composés hybrides et à transfert de protons.
- Synthèse de complexes de coordination, métallo-organiques et poreux.
- Conception et synthèse de bases de Schiff et de ligands organiques pour la chimie de coordination.
- Conception de molécules à intérêt biologique.

Publications internationales:

1. Atmospheric reaction of chlorine radical and cyclic amide: A theoretical approach. S. Samai, A. Ferhati, **A. Direm**, C. Parlak. *Computational and Theoretical Chemistry*. (2024). 1234, 114527. DOI: [10.1016/j.comptc.2024.114527](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2024.114527)
2. Spectroscopic characterization, DFT calculations, in vitro pharmacological potentials, and molecular docking studies of N, N, O-Schiff base and its trivalent metal complexes. I. P. Ejidike, **A. Direm**, C. Parlak, A. A. Adeniyi, M. Azam, A. Ata, M. O. Eze, J. W. Hollett, H. S. Clayton. *Chemical Physics Impact*. (2024). 8, 100549. DOI: [10.1016/j.chphi.2024.100549](https://doi.org/10.1016/j.chphi.2024.100549).
3. Interaction between escitalopram and ibuprofen or paracetamol: DFT and molecular docking on the drug–drug interactions. M. Daboe, C. Parlak, **A. Direm**, Ö. Alver & P. Ramasami. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*. (2023). 12, 1-15. DOI: [10.1080/07391102.2023.2195004](https://doi.org/10.1080/07391102.2023.2195004).
4. [Cu₂(ox)(dien)₂](NO₃)₃, a precursor for preparation of CuO nanoparticles: Synthesis, structural, Hirshfeld surface analyses, and physico-chemical investigations. M. Akouibaa, I. Lakkab, **A. Direm**, V. Nasif, K. Sayin, N. Morley, B. El Bali. *Journal of Molecular Structure*. (2023). 1282, 135258.
5. A rhodanine derivative as a potential antibacterial and anticancer agent: crystal structure, spectral characterization, DFT calculations, *Hirshfeld* surface analysis, *in silico* molecular docking and ADMET studies. A. Guerraoui, M. Goudjil, **A. Direm**, A. Guerraoui, İ. Yücel Şengün, C. Parlak, A. Djedouani, L. Chelazzi, F. Monti, E. Lunedei, A. Boumaza. *Journal of Molecular Structure* (2023). 1280, 135025.
6. Dual inhibition of *S. aureus* TyrRS and *S. aureus* gyrase by two 4-amino-4'-acetyldiphenyl sulfide-based Schiff bases: Structural features, DFT study, *Hirshfeld* surface analysis and molecular docking. S. Kadri, **A. Direm**, H. Athmani, B. El Bali, C. Parlak, R. Hebbachi. *Inorganic Chemistry Communications*. (2022). 143, 109779. DOI: [10.1016/j.inoche.2022.109779](https://doi.org/10.1016/j.inoche.2022.109779)
7. Synthesis, structural determination, *Hirshfeld* surface analysis, 3D energy frameworks, electronic and (static, dynamic) NLO properties of *o*-Nitroacetanilide (*o*-NAA): A combined experimental and quantum chemical study. N. Boukabcha, **A. Direm**, M. Drissi, Y. Megrouss, N. Khelloul, N. Dege, M. Tuna & A. Chouaih. *Inorganic Chemistry Communications*. (2021). 133, 108884. DOI: [10.1016/j.inoche.2021.108884](https://doi.org/10.1016/j.inoche.2021.108884)
8. Experimental and *in silico* studies of dichloro-tetrakis(1H-pyrazole)-cobalt(II) : Structural description, photoluminescent behavior and molecular docking. **A. Direm**, B. El Bali, K. Sayin & MSM. Abdelbaky & S. García-Granda. *Journal of Molecular Structure*. (2021). 1235, 130266. DOI: [10.1016/j.molstruc.2021.130266](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130266)
9. A comparative theoretical and spectroscopic study of aminomethylbenzoic acid derivatives as potential NLO candidates. **A. Direm** & K. Sayin. *Chem. Proc.* (2021). 3, 102. DOI: [10.3390/ecsoc-24-08099](https://doi.org/10.3390/ecsoc-24-08099)
10. Experimental and computational studies of di- μ -chlorido-bis [chlorido(1,10-phenanthroline- κ^2 N,N')]nickel(II)] NiCl₂(H₂O)(C₁₂N₂H₈) Crystal structure, quantitative analysis of the intermolecular interactions and electronic properties. B. El Bali, M. Lachkar, **A. Direm**, E. Çetiner, K. Sayin & M. Dusek. *Journal of Molecular Structure*. (2021). 1227, 129576. DOI: [10.1016/j.molstruc.2020.129576](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129576)
11. Crystal structure, physical study and Hirshfeld surface analysis of (C₉H₂₆N₄)[SnCl₆]Cl₂·2H₂O. B. El Bali, M. Lachkar, **A. Direm**, M. Dusek & M. Amores. *Inorganic Chemistry Communications*. (2020). 118, 107981. DOI: [10.1016/j.inoche.2020.107981](https://doi.org/10.1016/j.inoche.2020.107981)

12. Crystal structure, Hirshfeld surface analysis and theoretical calculations of an oxalato-bridged copper(II) complex: μ -oxalato-bis[(2,2'-bipyridine) hydrate copper(II) nitrate].
Z. Boutobba, **A. Direm**, K. Sayin, B. El Bali, M. Lachkar & N. Benali-Cherif. *Journal of the Iranian Chemical Society*. (2020). 17 (3), 671-685. DOI: [10.1007/s13738-019-01805-0](https://doi.org/10.1007/s13738-019-01805-0)
13. A new thin film modified glassy carbon electrode based on melaminium chloride pentachlorocuprate(II) for selective determination of nitrate in water.
H Araar, M Benounis, **A. Direm**, A Touati, S Atailia, H Barhoumi & N. Jaffrezic-Renault. *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly*. (2019). 150 (10), 1737-1744. DOI: [10.1007/s00706-019-02483-7](https://doi.org/10.1007/s00706-019-02483-7)
14. *sev* and *pcu* Topological nets in one-pot newly synthesized mixed-ligand imidazole-containing Cu(II) coordination frameworks: crystal structure, intermolecular interactions, theoretical calculations, magnetic behavior and biological activity.
A. Direm, MSM. Abdelbaky, K. Sayin, A. Cornia, O. Abosedo & S. García-Granda. *Inorganica Chimica Acta*. (2018). 478, 59-70. DOI: [10.1016/j.ica.2018.03.011](https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.03.011)
15. Intermolecular interactions of proton transfer compounds: synthesis, crystal structure and Hirshfeld surface analysis.
A. Direm, A Altomare, A Moliterni, N Benali-Cherif. *Acta Crystallographica Section B: Structural Science*. (2015). 71(4), 427-436. DOI: [10.1107/S2052520615011300](https://doi.org/10.1107/S2052520615011300)
16. Trans-dichlorotetrakis(1H-pyrazole- κ N2)copper(II): Synthesis, crystal structure, hydrogen bonding graph-sets, vibrational and DFT studies.
A. Direm, M Tursun, C Parlak, N Benali-Cherif. *Journal of Molecular Structure*. (2015). 1093, 208-218. DOI: [10.1016/j.molstruc.2015.03.068](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2015.03.068)
17. Diaquabis (ethylenediamine- κ^2 N,N') copper(II) bis(sulfamery-zinate).
A. Direm, W Falek, G Pilet, N Benali-Cherif. *Acta crystallographica. Section E, Structure reports online*. (2014). 70, m222-m223. DOI: [10.1107/S160053681401068X](https://doi.org/10.1107/S160053681401068X)
18. Synthesis of new cyano-quinoline derivatives by the Baylis-Hillman reaction.
F Guenfoud, **A. Direm**, M Laabassi, N Benali-Cherif. *Journal of Chemical Crystallography*. (2012). 42(10), 989-996. DOI: [10.1007/s10870-012-0325-6](https://doi.org/10.1007/s10870-012-0325-6)
19. (4S)-4-Benzyl-N-[[[(4S)-4-benzyl-2-oxo-1,3-oxazolidin-3-yl]sulfo-nyl]-2-oxo-1,3-oxazolidine-3-carboxamide.
M Berredjem, A Allaoui, **A. Direm**, N Aouf, N Benali-Cherif. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. (2010). 66(7), 01611-01612. DOI: [10.1107/S1600536810020866](https://doi.org/10.1107/S1600536810020866)
20. Anilinium hydrogen sulfate.
Z Boutobba, **A. Direm**, N Benali-Cherif. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. (2010). 66(3), 0595-0596. DOI: [10.1107/S1600536810004782](https://doi.org/10.1107/S1600536810004782)
21. Creatinium perchlorate.
A Messai, **A. Direm**, N Benali-Cherif, D Luneau, E Jeanneau. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. (2009). 65(3), 0460-0460. DOI: [10.1107/S1600536809003171](https://doi.org/10.1107/S1600536809003171)
22. Cytosinium-hydrogen maleate-cytosine (1/1/1).
N Benali-Cherif, W Falek, **A. Direm**. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. (2009). 65(12), 03058-03059. DOI: [10.1107/S1600536809046571](https://doi.org/10.1107/S1600536809046571)
23. Hydrogen bonding in 2-carboxyanilinium dihydrogen phosphite at 100 K.
N Benali-Cherif, F Allouche, **A. Direm**, K Soudani. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. (2009). 65(4), 0664-0665. DOI: [10.1107/S1600536809007077](https://doi.org/10.1107/S1600536809007077)
24. Ammonium tris(tetraethylammonium) hexacosaoxidocta-molybdate.
I Zebiri, L Bencharif, **A. Direm**, M Bencharif, N Benali-Cherif. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. (2008). 64(3), m474-m475. DOI: [10.1107/S1600536808004182](https://doi.org/10.1107/S1600536808004182)

25. 4-Carboxyanilinium hydrogensulfate.
N Benali-Cherif, **A. Direm**, F Allouche, K Soudani. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. (2007). 63(5), 02054-02056. DOI: [10.1107/S160053680701272X](https://doi.org/10.1107/S160053680701272X)
26. Hydrogen bonding in 2-carboxyanilinium dihydrogenphosphate.
N Benali-Cherif, F Allouche, **A. Direm**, K Soudani. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. (2007). 63(5), 02643-02645. DOI: [10.1107/S1600536807016303](https://doi.org/10.1107/S1600536807016303)
27. Hydrogen bonding in 4-carboxyanilinium dihydrogenphosphate.
N Benali-Cherif, **A. Direm**, F Allouche, K Soudani. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. (2007). 63(5), 02272-02274. DOI: [10.1107/S1600536807014948](https://doi.org/10.1107/S1600536807014948)

Communications (3 dernières années):

1. Synthèse, étude structurale, caractérisation spectroscopique et ASH du complexe Cu(II)-bis(benzoylacetate).
A. Guerraoui, A. Guerraoui, **A. Direm**, A. Djedouani & A. Boumaza. The 2nd Workshop of matter and radiation 'WMR23'. 17-18.05.2023. University of Batna1.
2. Synthèse, étude structurale et l'analyse de surface *Hirshfeld* des ligands base de Schiff dérivé de l'acide déhydroacétique.
A. Guerraoui, **A. Direm**, A. Djedouani & A. Boumaza. The 5th international days of organic chemistry of Annaba. 04-05.12.2022. Université d'Annaba.
3. Synthesis, crystal structure and evaluation of the intermolecular interactions by *Hirshfeld* surface analysis of a 2,2'-bipyridine oxalato-bridged dinuclear copper(II) complex.
Z. Boutobba, **A. Direm** & K. Sayin.. The 5th international days of organic chemistry of Annaba. 04-05.12.2022. Université d'Annaba.
4. Étude *in silico* par docking moléculaire des interactions établies entre une base de *Schiff* et les protéines de SARS COV-2.
A. Guerraoui, A. Guerraoui, **A. Direm**, A. Djedouani & A. Boumaza. 6^{ème} Colloque International de Chimie. 24-26.11.2022. Université de Batna.
5. Synthesis, crystal structure, spectral characterization of hydrazine-pyrandione derivative and molecular docking studies.
A. Guerraoui, A. Guerraoui, **A. Direm**, A. Djedouani & A. Boumaza. The 6th International Symposium on Chemistry (CIC-6)-2022. 24-26.11.2022. Université de Batna1.
6. Dual inhibition of *S. aureus TyrRS* and *S. aureus gyrase* by two 4-amino-4'-acetyldiphenyl sulfde-based Schiff bases: Structural features, DFT study, *Hirshfeld* surface analysis and molecular docking.
S. Kadri, A. Guerraoui, **A. Direm**, A. Djedouani & R. Hebbachi. The 1st international congress of innovations in chemistry for therapeutic aims. 23-24.10.2022. University Larbi Ben M'hidi, Oum El Bouaghi.
7. Double inhibition de *S. aureus TyrRS* et *S. aureus Gyrase* par une bade Schiff se: (E)-1-[4-({4-[(4-méthoxybenzylidène)amino]phényl}- sulfanyl)phényl]éthan-1-one (ligand II).
S. Kadri, A. Guerraoui, **A. Direm**, A. Djedouani & R. Hebbachi. The 6th International Symposium on Chemistry (CIC-6)-2022. 22-24.11.2022. University of Batna1.
8. Synthesis, structural characterization and HSA of the interactions in a zwitterionic DHA-Schiff base.
A. Guerraoui, A. Guerraoui, Z. Fellahi, **A. Direm**, A. Djedouani & A. Boumaza. The First national conference on materials sciences and engineering MSE'22". 28-29.06.2022. Université "Abbes Laghrour", Khenchela.

- 9.** Structural description, computational study and *Hirshfeld* surface analysis of an oxalato-bridged complex.
Z. Boutobba, **A. Direm** & K. Sayin. The first national Seminar on Green Chemistry and Natural Products (GCNP'22). 14-15.03.2022. University of Echahid Hamma Lakhdar, El-Oued.
- 10.** In Silico Study of the Dehydroacetic Acid Derivatives Against SARS-CoV-2 by Molecular Docking Method.
A. Guerraoui, S. Kadri, **A. Direm**, A. Djedouani & A. Boumaza. The 1st International Conference on Materials Science and Technology (MatScience-2022). 13-15.02.2022. Abbes Laghrour University, Khenchela.
- 11.** Structural features and in silico prediction of the biological properties of a pyrazole-based coordination complex.
A. Direm, B. El Bali, K. Sayin, M.S.M. Abdelbaky & S. García-Granda. The 7th International Electronic Conference on Medicinal Chemistry ECMC2021. 01-30.11.2021. Online.
- 12.** Synthesis, spectral, structural characterizations and HSA of the interactions in a new zwitterionic Schiff base.
A. Guerraoui, Z. Fellahi, **A. Direm**, S. Thabti, A. Djedouani, A. Boumaza. The 1st International conference on materials sciences and engineering. 17-18.11.2021. University Abbes Laghrour, Khenchela.
- 13.** Unraveling the structural, optical and photoluminescent properties of a pyrazole-based cobalt(II) framework.
M.S.M. Abdelbaky, **A. Direm** & S. García-Granda. Symposium of the Spanish Royal Society of Chemistry, RSEQ 2021. 27-30.09. 2021. Online Conference.
- 14.** Synthèse, étude structurale et activité biologique d'un complexe de coordination à base de Sulfamérazine.
A. Guerraoui, **A. Direm**, A. Guerraoui, A. Djedouani & A. Boumaza. Le 2^{ème} Séminaire National Sciences d'Interfaces Chimie-Biologie. Synthèse organique. 20.02.2021. Université Mohammed Chérif Messaadia, Souk-Ahras. En ligne.

Expérience pédagogique

Modules enseignés:

Cristallographie géométrique, Cours et TD (1^{ère} Master Chimie des matériaux),

Cristallographie géométrique approfondie : CRIS1, Cours et TD (1^{ère} Master Chimie-physique de la matière condensée),

Anglais, Cours (1^{ère} et 2^{ème} Master Chimie des matériaux),

Chimie 1, Cours et TD (1^{ère} ST),

Résolution structurale, Cours et TD (1^{ère} Master Chimie des matériaux),

Résolution structurale sur monocristaux : CRIS3, Cours et TD (2^{ème} Master Chimie-physique de la matière condensée),

Résolution structurale sur monocristal et sur poudres : CRIS2, Cours et TD (1^{ère} Master Chimie-physique de la matière condensée),

Chimie structurale, Cours et TD (1^{ère} Master Chimie des matériaux et 1^{ère} Master Chimie-physique de la matière condensée),

Chimie bio-organique : CHIM 15, Cours et TD (3^{ème} Chimie et 3^{ème} Chimie fondamentale),

Chimie organique, TP CHIM ORG (3^{ème} Chimie),

Chimie minérale, TP CHIM. MIN. (3^{ème} Chimie),

Anglais, Cours (3^{ème} Chimie et 3^{ème} Chimie analytique et environnement),

Techniques analytiques de contrôle dans l'industrie, Cours et TD (3^{ème} Chimie analytique et traitement des eaux),

Techniques physico-chimiques d'analyse, Cours et TD (3^{ème} Chimie analytique et traitement des eaux),

Liaisons chimiques et structure cristalline : CHIM 09, Cours et TD (3^{ème} Chimie),

Chimie analytique, TP (3^{ème} Chimie),

Chimie organique, TP CHIM 03 (2^{ème} Chimie),

Cristallographie : CHIM-503, Cours et TD (3^{ème} Chimie).

Liaisons chimiques et structure cristalline : CHIM 09, Cours et TD (3^{ème} Chimie),

Thermodynamique et cinétique, TP CHIM 02 (1^{ère} ST),

Structure de la matière, TP CHIM 01 (1^{ère} SNV).

Production pédagogique:

1. "Cours et exercices de Chimie générale".
Destiné aux étudiants de : 1^{ère} année ST.
2. "Cours de Chimie structurale".
Destiné aux étudiants de : 1^{ère} année master chimie des matériaux.
3. "Cours de Chimie bio-organique".
Destiné aux étudiants de : 3^{ème} année chimie fondamentale.
4. "Cours de Cristallographie géométrique".
Destiné aux étudiants de : 1^{ère} année master chimie des matériaux.
5. "Manuel de TD de Chimie générale".
Destiné aux étudiants de : 1^{ère} année ST.