

Programme

1^{ère} édition du colloque national eau, matériaux et modélisation moléculaire (E3M-2025)

sous le thème:

Intelligence artificielle : Enjeux pour une recherche doctorale de qualité, applications à la détection de la pollution de l'eau et à la modélisation moléculaire avancée

Organisé par:

Faculté Polydisciplinaire de Safi-Université Cadi Ayyad
&

Laboratoire Education, Sciences et Techniques, Ecole Supérieure de l'Education et de la Formation de Berrechid-Université Hassan 1^{er}

Mercredi 25 juin à 9h00

Salle de conférences

Faculté Polydisciplinaire de Safi

Coordonnateurs: – Pr. Zouhair LAKBAIBI
– Pr. Adil JAAFAR

Enseignant-Chercheur
Enseignant-Chercheur

FP-Safi
ESEF-Berrechid



z.lakbaibi@uca.ac.ma / adil.jaafar@uhp.ac.ma



SIDI BOUZID, B.P. 4162, 46000 SAFI – MAROC



<https://forums.ci.sciencesconf.org/>

“E3M-2025”

Intitulé de colloque :

Intelligence artificielle : enjeux pour une recherche doctorale de qualité, applications à la détection de la pollution de l'eau et à la modélisation moléculaire avancée

Contexte :

Cet événement explore l'impact de l'intelligence artificielle (IA) sur la qualité de la recherche doctorale, en particulier les thèses de doctorat, en abordant les enjeux et les opportunités qu'offre cette technologie pour améliorer les méthodes de recherche, l'analyse des données et proposer des solutions innovantes. Il met également en lumière les applications récentes de l'IA dans la modélisation moléculaire et la détection de la pollution des eaux, en mettant l'accent sur la conception de médicaments et l'ouverture de nouvelles perspectives dans la discipline de biologie.

Objectifs du colloque

- Explorer les enjeux méthodologiques de l'intégration de l'intelligence artificielle dans la recherche doctorale, notamment en termes de qualité scientifique, de reproductibilité, et d'éthique.
- Présenter et valoriser des travaux de recherche appliquant l'IA à la détection des polluants dans l'eau, en mettant en lumière les outils, les algorithmes et les résultats obtenus par des doctorants et des chercheurs.
- Mettre en évidence les contributions de l'IA à la modélisation moléculaire, en particulier pour la prédiction de structures, la simulation d'interactions et l'accélération des découvertes scientifiques dans les disciplines de chimie et de biologie.
- Favoriser les échanges interdisciplinaires entre doctorants, encadrants, chercheurs, ingénieurs et professionnels, afin de stimuler les synergies entre les sciences de l'environnement, les sciences moléculaires, et les sciences informatiques.
- Identifier les défis techniques, éthiques et réglementaires liés à l'usage de l'IA dans la recherche, et proposer des pistes d'action pour assurer une utilisation responsable et durable de ces technologies.

Comité d'honneur



Mr. Blaid BOUGADIR

Président de l'université Cadi Ayyad
-Marrakech-



Mr. Abdellatif MOUKRIM

Président de l'université Hassan 1^{er}
-Settat-



Mr. Abdessamad CHARIF

Doyen de la faculté polydisciplinaire
-Safi-



Mr. Rachid ARRAICHI

Directeur de l'école supérieure de
l'éducation et de la formation
-Berrechid-

Comité scientifique

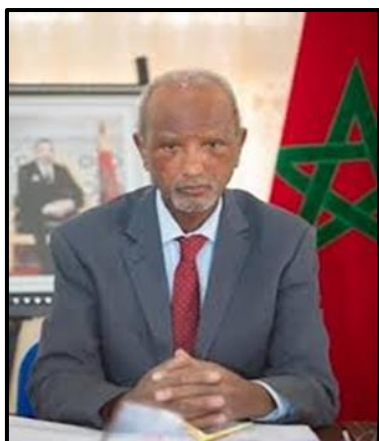
Pr. Mohamed CHAIBI
 Pr. Nouredine Azzahr
 Pr. Zouhair LAKBAIBI
 Pr. Adil JAAFAR
 Pr. Mohammadine EL HADDAD
 Pr. Lahoucine BAHSIS
 Pr. Driss SOUBANE
 Pr. Zakaria HACHKAR
 Pr. Elmokhtar EIOUARDI
 Pr. Mouna HILAL
 Pr. Saoussan El MOUHRI
 Pr. Mounir KRIRAA
 Pr. Mohamed Taib MOHTADI
 Pr. Abdelouahed LAGNAOUI
 Pr. Moulay Brahim SEDRA
 Pr. Samir CHTITA
 Pr. Mohammed BENZAKOUR
 Pr. Adil Touimi BENJELLOUN
 Pr. Hsaine ZGOU
 Pr. Mostafa CHHIBA
 Pr. Mohamed ESSAHLI
 Pr. Abdellah ACHAHAD
 Pr. Sabah BELAAOUJA
 Pr. Ilyas NAJI
 Pr. Ansar DAGHOURI
 Pr. Amal AARAB
 Pr. Rachid BENDAOU
 Pr. Achraf AZANZAL
 Pr. Soukaina GOURAGUINE
 Pr. Naima NOSSIR
 Pr. Soukaina ESSALIH
 Pr. Rafik SADDIK
 Pr. Abdeslam ANSARI
 Pr. Chahid EL HADI
 Pr. Khalid ABBICHE
 Pr. Mohammed EL IDRISI
 Pr. Adil BELHAJ
 Pr. Abdelkhalk ABOULOUD
 Pr. Achraf EL ALLALI
 Pr. Abdellah ZEROUAL
 Pr. Mohammed SALAH
 Pr. Abdelaziz Ait Sidi Mou
 Pr. Siham ECHIHI
 Pr. Abderrahmane ELMELOUKY
 Pr. Aziz EL HAIMOUTI
 Pr. Mohammed CHAFI
 Pr. Ahmed MOUFTI
 Pr. El Mostafa EL HALBA
 Pr. Said BACROUME
 Pr. Mohamed BAKHOUGH
 Pr. Yasser KARZAZI
 Pr. Samir DIDI
 Pr. Aarfane Abdellatif

Vice Doyen chargé de la Recherche Scientifique et la coopération, FP de Safi
 Directeur Adjoint chargé des affaires pédagogiques, ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à la FP de Safi
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à la FP de Safi
 Enseignant chercheur à la FP de Safi
 Enseignant chercheur à la FP de Safi
 Enseignant chercheur à la FP de Safi
 Enseignant chercheur à la FP de Safi
 Enseignant chercheur à l'EST de Safi
 Enseignant chercheur à l'ENSA de Safi
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Directeur à l'ENS de Meknès
 Enseignant chercheur à la FS Ben M'Sick de Casablanca
 Enseignant chercheur à de Faculté des Sciences de Fès
 Enseignant chercheur à de Faculté des Sciences de Fès
 Enseignant chercheur à la FP d'Ouarzazate
 Enseignant chercheur à la FST de Settat
 Enseignant chercheur à la FST de Settat
 Enseignant chercheur à la FST de Settat
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
 Enseignant chercheur à la FS Aïn Chock de Casablanca
 Enseignant chercheur au CRMEF de Marrakech
 Enseignant chercheur au CRMEF de Safi
 Enseignant chercheur à la FS de Rabat
 Enseignant chercheur à la FP de Beni Mellal
 Enseignant chercheur à la FS de Rabat
 Enseignant chercheur à l'ESEF de Beni Mellal
 Enseignant chercheur à l'UM6P de Benguerir
 Enseignant chercheur à la FS d'EL Jadida
 Enseignant chercheur à la FS d'EL Jadida
 Enseignant chercheur à la FST d'Errachidia
 Enseignant chercheur à la FST d'Errachidia
 Enseignant chercheur à la FS d'EL Jadida
 Enseignant chercheur à FP de Khouribga
 Enseignant chercheur à l'EST de Casablanca
 Enseignant chercheur à CRMEF de Casablanca
 Enseignant chercheur à l'ENSA de Berrechid
 Enseignant chercheur à l'EST de Nador
 Enseignant chercheur à la FS d'EL Jadida
 Enseignant chercheur à la FS d'Oujda
 Enseignant chercheur à FP de Nador
 Enseignant chercheur à l'ESEF d'EL Jadida

Comité d'organisation

Pr. Mohamed CHAIBI	Vice Doyen chargé de la Recherche Scientifique et la coopération, FP de Safi
Pr. Nouredine Azzahr	Directeur Adjoint chargé des affaires pédagogiques, ESEF de Berrechid
Pr. Zouhair LAKBAIBI	Enseignant chercheur à la FP de Safi
Pr. Adil JAAFAR	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Lahoucine BAHSIS	Enseignant chercheur à la FP de Safi
Pr. Driss SOUBANE	Enseignant chercheur à la FP de Safi
Pr. Zakaria HACHKAR	Enseignant chercheur à la FP de Safi
Pr. Elmokhtar ELOUARDI	Enseignant chercheur à la FP de Safi
Pr. Mouna HILAL	Enseignant chercheur à la FP de Safi
Pr. Mustapha KHIDDI	Enseignant chercheur à la FP de Safi
Pr. Saoussan El MOUHRI	Enseignant chercheur à l'EST de Safi
Pr. Mounir KRIRAA	Enseignant chercheur à l'ENSA de Safi
Pr. Chahid EL HADI	Enseignant chercheur au CRMEF de Safi
Pr. Abdelouahed LAGNAOUI	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Sabah BELAAOUJA	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Ilham KIRROU	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Fatima OUMELLAL	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Nouredine BENCHEIKH	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Abderrahim CHARKAOUI	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Mariam SAHRAOUI	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Abdessamad MATRAB	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Mourad RHAFOUL	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Jamal ACHMANI	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Adam ANEBRI	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Hanane NIYA	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Abdelilah KHANNIBA	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Khalid ABBICHE	Enseignant chercheur à la Faculté des Sciences de Rabat
Mr. Said AIT BRAHIM	Secrétaire général de la FP de Safi
Mr. Hicham MAJID	Secrétaire général de l'ESEF de Berrechid
Mr. Adil AHIRI	Docteur de la FP de Safi
Mr. Kamal BOUMHARA	Docteur de FS Rabat
Mme. Baylassane CHATIB	Docteure de l'EST de Safi
M. Yasmine LAFTANI	Docteure de l'EST de Safi
Mr. Ayoub ELMAAZOUZI	Docteur de FS de Fès
Mr. Brahim LIZOUL	Docteur de la FS d'El Jadida
Mme. Saida Tayoub	Docteure de l'ENSA de Berrechid
M. Ibtissam BOUSSAOUDI	Docteure de la FS de Tetouan
Mme. Imane LMACHRAA	Doctorante à l'EST de Safi
Mme. Lamia ELMAAZOUZI	Doctorante à l'EST de Safi
M. Ghizlan MAYMOUN	Doctorante à la FP d'Ouarzazate
Mme. Khadija EL IDRISSI	Doctorante à la FS d'El Jadida
Mr. Mehdi TAIB	Docteur de la FST de Settat
Mr. Abdelhak ADLI	Doctorant à la FST de Beni Mella
M. Ikram SMIMI	Doctorante à l'EST de Safi
Mme. Keltoum KHALLOUK	Docteure, Faculté des Sciences, Université Ibn Zohr, Agadir

Conférenciers



Professeur Moulay Brahim SEDRA

Conférence plénière 1 :

Réflexions sur l'IA et l'enjeu de la qualité de la thèse de doctorat pour les étudiants chercheurs



Professeur Mohamed Taib MOHTADI

Conférence plénière 2 :

Impact de l'IA sur l'Intégrité Académique : Défis et solutions pour garantir l'authenticité de la recherche doctorale à l'ère des générateurs de contenu automatisés



Professeur Samir CHTITA

Conférence plénière 3 :

L'IA au service de la modélisation moléculaire : nouvelles perspectives en Drug Design



Professeur Abdelhakim LAHJOUJ

Conférence plénière 4 :

Application de machine Learning dans l'évaluation de la vulnérabilité des eaux souterraines à la pollution

Programme

9h00 - 9h30	Accueil des participants
9h30 - 10h00	Ouverture officielle et allocutions
	❖ Mot de Mr. Blaid BOUGADIR le président de l'UCA-Marrakech ❖ Mot de Mr. Abdellatif MOUKRIM le président de l'UH1-Settat ❖ Mot de Mr. Abdessamad CHARIF le Doyen de la Faculté la FP-Safi ❖ Mot de Mr. Rachid ARRAICHI le Directeur d'ESEF-Berrechid ❖ Mot du comité d'organisation
Session des conférences plénière	
10h00 - 10h45	<u>Conférence plénière 1 :</u> Réflexions sur l'IA et l'enjeu de la qualité de la thèse de doctorat pour les étudiants chercheurs <u>Pr. Moulay Brahim SEDRA</u> Directeur à l'ENS de Meknès, Université Moulay Ismail (Maroc). Modérateurs et rapporteurs : Pr. Driss SOUBANE, FP de Safi Pr. Chahid EL HADI, CRMEF de Safi
10h45 - 11h30	<u>Conférence plénière 2 :</u> Impact de l'IA sur l'Intégrité Académique : Défis et solutions pour garantir l'authenticité de la recherche doctorale à l'ère des générateurs de contenu automatisés <u>Pr. Mohamed Taib MOHTADI</u> Professeur à l'ESEF de Berrechid, Université Hassan 1er, Settat (Maroc). Modérateurs et rapporteurs : Pr. Zakaria HACHKAR, FP de Safi Pr. Elmokhtar EIOUARDI, FP de Safi
11h30 - 12h00	Pause-café / Session Posters
12h00 - 12h45	<u>Conférence plénière 3 :</u> Application de machine Learning dans l'évaluation de la vulnérabilité des eaux souterraines à la pollution <u>Pr. Abdelhakim LAHJOUJ</u> Professeur à la Faculté des Sciences d'El Jadida, Université Chouaib Doukkali, El Jadida (Maroc). Modérateurs et rapporteurs : Pr. Saoussan El MOUHRI, EST de Safi Pr. Adil JAAFAR, ESEF de Berrechid
12h45-13h30	<u>Conférence plénière 4 :</u> L'IA au service de la modélisation moléculaire : nouvelles perspectives en Drug Design <u>Pr. Samir CHTITA</u> Professeur à la Faculté des Sciences Ben M'Sick, Université Hassan II, Casablanca (Maroc). Modérateurs et rapporteurs : Pr. Lahoucine BAHSIS, FP de Safi Pr. Zouhair LAKBAIBI, FP de Safi
13h30-15h00	Déjeuner

Sessions parallèles des communications orales (Com)

Session 1- Salle de conférences-

Modérateurs :

- ❖ Pr. Samir CHTITA, FSBM de Casablanca
- ❖ Pr. Mostafa CHHIBA, FST de Settât
- ❖ Pr. Mohamed ESSAHLI, FST de Settât
- ❖ Pr. Saoussan El MOUHRI, EST de Safi

15h00-15h15	Com 01: Artificial Intelligence-Driven Modeling of Magnetic Properties in AB₂X₄ -Type Compounds : From First-Principles to Predictive Design Ayoub ELMAAZOUZI Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Université Sidi Mohammed Ben Abdellah, Fès
15h15 - 15h30	Com 02: Lewis acid-catalyzed cycloaddition reactions : DFT, Docking, and ADMET Study with future perspective on AI including Machine Learning, and Deep Learning Khadija EL IDRISSE Molecular Modelling and Spectroscopy Research Team, Faculty of Science, Chouaib Doukkali University
15h30 - 15h45	Com 03: Machine Learning Applications for Enhancing the Efficiency of Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC) Imane LMACHRAA Laboratory of Process, Signals, Industrial Systems and Computer Science, Graduate School of Technology, Cadi Ayyad University
15h45 - 16h00	Com 04: Hydroxyapatite from Sardine Waste for Water Purification : A Critical Review of Extraction Techniques, Artificial Intelligence Applications, and Economic Feasibility Lamia ELMAAZOUZI Laboratory of Process, Signals, Industrial Systems and Computer Science, Graduate School of Technology, Cadi Ayyad University
16h00 - 16h15	Com 05: Artificial Intelligence-Driven Optimization of Advanced Oxidation of Ponceau S in Saline Water Yasmine LAFTANI Laboratory of Process, Signals, Industrial Systems and Computer Science, Graduate School of Technology, Cadi Ayyad University
16h15 – 16h30	Com 06: Artificial Intelligence Enhanced Heavy Metal Removal Using Calcium Phosphate in Wastewater Treatment Brahim LIZOUL Laboratory of Catalysis and Corrosion of Metals, Faculty of Sciences, Chouaib Doukkali University, El Jadida
16h30 - 16h45	Com 07: IA et triazoles antimicrobiens : défis et avancées en découverte de médicaments Ghizlan MAYMOUN Applied chemistry, geo-mines and modelisation, Polydisciplinary Faculty of Ouarzazate, Ibn Zohr University
16h45 - 17h00	Com 08: Artificial Intelligence in Wastewater Treatment: A Bibliometric Analysis of Emerging Trends Soukaina BAKKASS Hydraulic Systems Analysis Laboratory, Mohammedia School of Engineers, Mohammed-V University in Rabat
17h00 - 17h15	Com 09: AI for COD: resolving ambiguity between dissolved and undissolved matter in turbid matrices Meryem NINI Laboratory of physical Chemistry and biotechnology of Biomolecules and Materials, Faculty of Sciences and Techniques, Hassan II University of Casablanca
17h15-17h30	Com 10: Artificial Intelligence-Enhanced Prediction and Modeling of Magnetic Properties in Spinel Compounds Keltoum KHALLOUQ Laboratory of Solid Physics, Faculty of Sciences Dhar ElMahraz, Sidi Mohamed Ben Abdellah University, BP 1796, Fez, Morocco.

Session 2 - Salle A -

Modérateurs :

- ❖ Pr. Khalid ABBICHE, FS de Rabat
- ❖ Pr. Adil JAAFAR, ESEF de Berrechid
- ❖ Pr. Elmokhtar ELOUARDI, FP de Safi

15h00-15h15	Com 01 : Comment l'IA peut contribuer à une étude computationnelle du mécanisme et de la sélectivité des réactions de cycloaddition 1,3-dipolaire <u>Rachid BOUTIDAR</u> Analysis, Modeling, Engineering, Natural Substances and Environment Laboratory, Polydisciplinary Faculty of Taroudant, Ibn Zohr University
15h15-15h30	Com 02 : Etude des propriétés antioxydantes de l'urée, du thiourée et de certains de leurs dérivées : Analyse par machine learning <u>R. chabi DOCO</u> Laboratoire de Chimie Physique Théorique Matériaux et Modélisation Moléculaire (LCP3M), Université d'Abomey-Calavi
15h30-15h45	Com 03 : Déchiffrer les conformations protéiques à l'aide de l'apprentissage profond : Applications aux protéines kinases. <u>Adil AHIRI</u> Chemo-Bioinformatique de l'Université Chouaib Doukkali d'EL Jadida.
15h45-16h00	Com 04 : A First-Principles Study of Surface Passivation Effects on the Stability, Electronic, and Optical Properties of Silicon Quantum Dots: Toward AI-Assisted Materials Design. <u>F. DNAYA</u> EBCG-Lab, Department of Physics, PolyDisciplinary Faculty of Safi, Cadi Ayyad University.
16h00-16h15	Com 05 : Hybrid QSPR–DNN Framework for Photovoltaic Efficiency Prediction in Organic Semiconductors <u>Mohammed ELKABOUS</u> University Mohammed Premier, Faculty of Sciences of Oujda, chemistry department, Applied Chemistry and Environment Laboratory (LCAE).
16h15-16h30	Com 06 : Molecular Engineering of Organic Dyes for DSSCs: DFT/TD-DFT Insights and the Promising Role of Artificial Intelligence in Enhancing Photovoltaic Performance <u>Ahmed ARIF</u> Faculty of Sciences and Technologies, Sultan Moulay Slimane University, Beni-Mellal.
16h30-16h45	Com 07 : Tuning Sunlight: First-Principles and Machine Learning Perspectives on TiO₂ for High-Performance Dye-Sensitized Solar Cells <u>I. KHARBOUCHI</u> EBCG-Lab, Department of Physics, PolyDisciplinary Faculty of Safi, Cadi Ayyad University.
16h45-17h00	Com 08 : Theoretical study on the interactions of pyrazoline compounds with COVID-19 (Mpro) master RNA <u>Z. OUAHDI</u> Modeling and Spectroscopy Research Team.
17h00-17h15	Com 09 : Synthèse de nouvelles molécules hybrides dérivées de la quinazolin-4-one et évaluation de leurs propriétés antibactériennes, études in vitro et in silico <u>Ayoub MOUHIB</u> Equipe de Chimie Bioorganique, Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université Chouaïb Doukkali, El Jadida
17h15-17h30	Com 10: Exploring Of Novel Thymol-Based Amino-Thiazole Hybrids: Computational Evaluation Of Anticancer Activity <u>Amal BOURIBAB</u> Laboratory of Analytical and Molecular Chemistry, Faculty of Sciences Ben M'Sik, Hassan II University of Casablanca
17h30-17h45	Com 11: Artificial Intelligence Enhanced Study of Artemisia herba alba Oil as a Sustainable Inhibitor for Mild Steel: characterization, electrochemical and surface analysis <u>Kamal BOUMHARA</u> Laboratory of Materials, Nanotechnology and Environment, Faculty of Sciences, Mohammed V University, Av. Ibn Battuta, B.P 1014 Rabat, Morocco

Session 3 - Salle B -

Modérateurs :

- ❖ **Pr. Chahid EL HADI**, CRMEF de Safi
- ❖ **Pr. Mohammed EL IDRISSI**, FP de Beni Mellal
- ❖ **Pr. Abdelkhalk ABOULOUARD**, ESEF de Beni Mellal
- ❖ **Pr. Zouhair LAKBAIBI**, FP de Safi.

15h00-15h15	Com 01: Surveying Novel Pyrazine Acceptor Materials for Bulk Heterojunction Solar Cells: Artificial Intelligence-Assisted Computational Modeling Insights into Photovoltaic Performance <u>Ikram MENNASA</u> TCPAM, Polydisciplinary Faculty, Sultan Moulay Slimane University, Mghila, Beni-Mellal.
15h15-15h30	Com 02: Optical and electronic characterization of TiO₂ to dye interfaces using TD-DFT and artificial intelligence <u>Badreddine BOUKILI</u> Faculty of Sciences and Technologies, Sultan Moulay Slimane University, Beni Mellal.
15h30-15h45	Com 03: Study of Lithium-Ion Intercalation and Deintercalation into FePO₄ Using Electrochemical Techniques <u>Youssef MOUKHLESS</u> Faculty of Sciences, Applied Chemistry-Physics laboratory, Ibnou Zohr University, Agadir.
15h45 - 16h00	Com 04 : Modélisation numérique 3D du flambement de poteaux en acier corrodés : vers une prédiction assistée par intelligence artificielle <u>Meriyem MOULOUDI</u> Laboratoire de Chimie Appliquée et Environnement, Faculté des Sciences et Techniques, Université Hassan Premier.
16h00 - 16h15	Com 05: Entre assistance et autonomie : le doctorant face à l'IA <u>Mariam SAHRAOUI</u> Ecole Supérieure de l'Education et de la Formation de Berrechid, Université Hassan 1^{er}.
16h15 - 16h30	Com 06: Teaching chemistry in the era of generative AI <u>Meryem JANATI IDRISSI</u> Sidi Mohammed Ben Abdellah University, Faculty of Sciences, Solid-State Physics Laboratory, Fez.
16h30 - 16h45	Com 07: Comparative study of multiclass brain tumor classification using Efficient Net Architectures <u>Amal KAAB</u> Physics, Energy, Environment and Applications Laboratory (LP2EA), Cadi Ayyad University, Polydisciplinary Faculty, Safi
16h45 - 17h00	Com 08: In Silico Design Of Pyridones Derivatives As Alpha-Glucosidase Inhibitors: A Qsar Study, Molecular Docking, Admet, And Molecular Dynamics Approach <u>Oussama ABCHIR</u> Laboratory of Analytical and Molecular Chemistry, Hassan II University of Casablanca, Casablanca
17h00 - 17h15	Com 09: Phytochemical-based modulation of IL-4Rα for developing plant-derived therapeutics against eczema: Insights from in silico screening, ADMET profiling and molecular dynamics <u>Lamiae EL BOUAMRI</u> Laboratory of Analytical and Molecular Chemistry, Faculty of Sciences Ben M'Sick, Hassan II University of Casablanca
17h15 - 17h30	Com 10: Surveying Novel Pyrazine Acceptor Materials for Bulk Heterojunction Solar Cells: Computational Insights using AI and deep learning to study Photovoltaic Performance <u>Mohamed KADOUR ATOUAILAA</u> TCPAM, Polydisciplinary Faculty, Sultan Moulay Slimane University, Beni-Mellal.

Communications par affiche

Auteur	Titre
Imane LMACHRAA	Advancing Dye-Sensitized Solar Cells: The Role of Nanoarchitectures and Machine Learning in Photoanode Optimization
Anas OULED AITOUNA	Study of chemical reactivity and molecular docking of 2-diazo-3,3,3-trifluoro-1-nitropropane with phenyl methacrylate: A computational approach with AI-driven perspectives
Ghizlan MAYMOUN	QSAR-Based Study of Triazole Derivatives against Mycobacterium tuberculosis: Toward AI-Enhanced Molecular Modeling
Fatima ezzahra DNAYA	Quantum Confinement in Silicon Quantum Dots: DFT Insights into Electronic Structure and Emerging Data-Driven Approaches
Imane FILALI	Applications of Artificial Intelligence to water quality assessment and prediction: A Bibliometric Analysis
Chaymae SERGENT	Investigation of Structural and Optoelectronic Properties of π -Bridge-Modified Dyes for DSSCs Using Molecular Modeling and Machine Learning Approaches
Youssef ARIF	Integrating Artificial Intelligence into Molecular Docking for the Identification of Antidiabetic Agents from Asparagus officinalis
Houria RAJI	Valorization of Natural Atlantones via 1,3-Dipolar Cycloaddition: Mechanistic Study and Biological Properties
Rida NEJJARI	Hémisynthèse de nouvelles isoxazoles à partir de l'(E)- α -atlantone : études des activités antimicrobiennes, ADME-Tox, docking moléculaire et simulations de dynamique moléculaire
Bouchra ES-SOUNNI	Novel Copper and Nickel complexes-based sulfonamide Schiff base ligand: structural study and antioxidant activity
Khadija EL IDRISI	Theoretical analysis of TiCl_4 -catalyzed cycloaddition reactions: Catalytic influence and prospective application of Artificial Intelligence in MEDT research
Ilham AIT BRAIM	Experimental and Computational Study of β -Himachalene-Derived Cyclopropane Reactions: Reactivity and AI Perspectives in ADMET Analysis

La 1^{ère} édition du colloque national Eau,
Matériaux et Modélisation Moléculaire
E3M–2025

25 juin 2025
Faculté Polydisciplinaire de Safi