

# Programme

1<sup>ère</sup> édition du colloque national eau, matériaux et modélisation moléculaire (E3M-2025)

sous le thème:

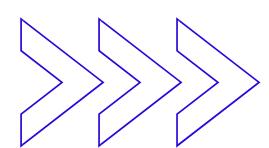
Intelligence artificielle : Enjeux pour une recherche doctorale de qualité, applications à la détection de la pollution de l'eau et à la modélisation moléculaire avancée

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<sup>er</sup>



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](mailto:z.lakbaibi@uca.ac.ma) / [adil.jaafar@uhp.ac.ma](mailto:adil.jaafar@uhp.ac.ma)



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



<https://forumsci.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<sup>er</sup>  
-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	Vice Doyen chargé de la Recherche Scientifique et la coopération, FP de Safi
Pr. Noureddine 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. Mohammadine EL HADDAD	Enseignant chercheur à la FP de Safi
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. Saoussan El MOUHRI	Enseignant chercheur à l'EST de Safi
Pr. Mounir KRIRAA	Enseignant chercheur à l'ENSA de Safi
Pr. Mohamed Taib MOHTADI	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Abdelouahed LAGNAOUI	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Moulay Brahim SEDRA	Directeur à l'ENS de Meknès
Pr. Samir CHTITA	Enseignant chercheur à la FS Ben M'Sick de Casablanca
Pr. Mohammed BENZAKOUR	Enseignant chercheur à de Faculté des Sciences de Fès
Pr. Adil Touimi BENJELLOUN	Enseignant chercheur à de Faculté des Sciences de Fès
Pr. Hsaine ZGOU	Enseignant chercheur à la FP d'Ouarzazate
Pr. Mostafa CHHIBA	Enseignant chercheur à la FST de Settat
Pr. Mohamed ESSAHLI	Enseignant chercheur à la FST de Settat
Pr. Abdellah ACHAHAD	Enseignant chercheur à la FST de Settat
Pr. Sabah BELAAOUJA	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Ilyas NAJI	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Ansar DAGHOURI	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Amal AARAB	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Rachid BENDAOUD	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Achraf AZANZAL	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Soukaina GOURAGUINE	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Naima NOSSIR	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Soukaina ESSALIH	Enseignant chercheur à l'ESEF de Berrechid
Pr. Rafik SADDIK	Enseignant chercheur à la FS Aïn Chock de Casablanca
Pr. Abdeslam ANSARI	Enseignant chercheur au CRMEF de Marrakech
Pr. Chahid EL HADI	Enseignant chercheur au CRMEF de Safi
Pr. Khalid ABBICHE	Enseignant chercheur à la FS de Rabat
Pr. Mohammed EL IDRISI	Enseignant chercheur à la FP de Beni Mellal
Pr. Adil BELHAJ	Enseignant chercheur à la FS de Rabat
Pr. Abdelkhalk ABOULOUARD	Enseignant chercheur à l'ESEF de de Beni Mellal
Pr. Achraf EL ALLALI	Enseignant chercheur à l'UM6P de Benguerir
Pr. Abdellah ZEROUAL	Enseignant chercheur à la FS d'EL Jadida
Pr. Mohammed SALAH	Enseignant chercheur à la FS d'EL Jadida
Pr. Abdelaziz Ait Sidi Mou	Enseignant chercheur à la FST d'Errachidia
Pr. Siham ECHIHI	Enseignant chercheur à la FST d'Errachidia
Pr. Abderrahmane ELMELOUKY	Enseignant chercheur à la FS d'EL Jadida
Pr. Aziz EL HAIMOUTI	Enseignant chercheur à FP de Khouribga
Pr. Mohammed CHAFI	Enseignant chercheur à l'EST de Casablanca
Pr. Ahmed MOUFTI	Enseignant chercheur à CRMEF de Casablanca
Pr. El Mostafa EL HALBA	Enseignant chercheur à l'ENSA de Berrechid
Pr. Said BACROUME	Enseignant chercheur à l'EST de Nador
Pr. Mohamed BAKHOUCH	Enseignant chercheur à la FS d'EL Jadida
Pr. Yasser KARZAZI	Enseignant chercheur à la FS d'Oujda
Pr. Samir DIDI	Enseignant chercheur à FP de Nador
Pr. Aarfane Abdellatif	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. Noureddine 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. Noureddine 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. Yassmine 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 IDRISI	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

<b>9h00 - 9h30</b>	<b>Accueil des participants</b>
<b>9h30 - 10h00</b>	<b>Ouverture officielle et allocutions</b>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>❖ Mot de <b>Mr. Blaid BOUGADIR</b> le président de l'UCA-Marrakech</li> <li>❖ Mot de <b>Mr. Abdellatif MOUKRIM</b> le président de l'UH1-Settat</li> <li>❖ Mot de <b>Mr. Abdessamad CHARIF</b> le Doyen de la Faculté la FP-Safi</li> <li>❖ Mot de <b>Mr. Rachid ARRAICHI</b> le Directeur d'ESEF-Berrechid</li> <li>❖ Mot du <b>comité d'organisation</b></li> </ul>
<b>Session des conférences plénière</b>	
<b>10h00 - 10h45</b>	<p><b><u>Conférence plénière 1 :</u></b>            Réflexions sur l'IA et l'enjeu de la qualité de la thèse de doctorat pour les étudiants chercheurs  <b>Pr. Moulay Brahim SEDRA</b>            Directeur à l'ENS de Meknès, Université Moulay Ismail (Maroc).  <b>Modérateurs et rapporteurs : Pr. Driss SOUBANE, FP de Safi</b>  <b>Pr. Chahid EL HADI, CRMEF de Safi</b></p>
<b>10h45 - 11h30</b>	<p><b><u>Conférence plénière 2 :</u></b>            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  <b>Pr. Mohamed Taib MOHTADI</b>            Professeur à l'ESEF de Berrechid, Université Hassan 1er, Settat (Maroc).  <b>Modérateurs et rapporteurs : Pr. Zakaria HACHKAR, FP de Safi</b>  <b>Pr. Elmokhtar EIOUARDI, FP de Safi</b></p>
<b>11h30 - 12h00</b>	<b>Pause-café / Session Posters</b>
<b>12h00 - 12h45</b>	<p><b><u>Conférence plénière 3 :</u></b>            Application de machine Learning dans l'évaluation de la vulnérabilité des eaux souterraines à la pollution  <b>Pr. Abdelhakim LAHJOUJ</b>            Professeur à la Faculté des Sciences d'El Jadida, Université Chouaib Doukkali, El Jadida (Maroc).  <b>Modérateurs et rapporteurs : Pr. Saoussan El MOUHRI, EST de Safi</b>  <b>Pr. Adil JAAFAR, ESEF de Berrechid</b></p>
<b>12h45-13h30</b>	<p><b><u>Conférence plénière 4 :</u></b>            L'IA au service de la modélisation moléculaire : nouvelles perspectives en Drug Design  <b>Pr. Samir CHTITA</b>            Professeur à la Faculté des Sciences Ben M'Sick, Université Hassan II, Casablanca (Maroc).  <b>Modérateurs et rapporteurs : Pr. Lahoucine BAHSIS, FP de Safi</b>  <b>Pr. Zouhair LAKBAIBI, FP de Safi</b></p>
<b>13h30-15h00</b>	<b>Déjeuner</b>

## Sessions parallèles des communications orales (Com)

## Session 1- Salle de conférences-

## Modérateurs :

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

<b>15h00-15h15</b>	<p><b>Com 01:</b> Artificial Intelligence-Driven Modeling of Magnetic Properties in AB<sub>2</sub>X<sub>4</sub> -Type Compounds : From First-Principles to Predictive Design  <b>Ayoub ELMAAZOUZI</b>            Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Université Sidi Mohammed Ben Abdellah, Fès</p>
<b>15h15 - 15h30</b>	<p><b>Com 02:</b> Lewis acid-catalyzed cycloaddition reactions : DFT, Docking, and ADMET Study with future perspective on AI including Machine Learning, and Deep Learning  <b>Khadija EL IDRISI</b>            Molecular Modelling and Spectroscopy Research Team, Faculty of Science, Chouaib Doukkali University</p>
<b>15h30 - 15h45</b>	<p><b>Com 03:</b> Machine Learning Applications for Enhancing the Efficiency of Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC)  <b>Imane LMACHRAA</b>            Laboratory of Process, Signals, Industrial Systems and Computer Science, Graduate School of Technology, Cadi Ayyad University</p>
<b>15h45 -16h00</b>	<p><b>Com 04:</b> Hydroxyapatite from Sardine Waste for Water Purification : A Critical Review of Extraction Techniques, Artificial Intelligence Applications, and Economic Feasibility  <b>Lamia ELMAAZOUZI</b>            Laboratory of Process, Signals, Industrial Systems and Computer Science, Graduate School of Technology, Cadi Ayyad University</p>
<b>16h00 -16h15</b>	<p><b>Com 05:</b> Artificial Intelligence-Driven Optimization of Advanced Oxidation of Ponceau S in Saline Water  <b>Yasmine LAFTANI</b>            Laboratory of Process, Signals, Industrial Systems and Computer Science, Graduate School of Technology, Cadi Ayyad University</p>
<b>16h15 -16h30</b>	<p><b>Com 06:</b> Artificial Intelligence Enhanced Heavy Metal Removal Using Calcium Phosphate in Wastewater Treatment  <b>Brahim LIZOUL</b>            Laboratory of Catalysis and Corrosion of Metals, Faculty of Sciences, Chouaib Doukkali University, El Jadida</p>
<b>16h30 -16h45</b>	<p><b>Com 07:</b> Computational Study of Triazole Derivatives Against <i>Pseudomonas aeruginosa</i>: Molecular Docking, DFT, and ADMET Analysis with Future Outlook on AI, Machin Learning, and Deep Learning Applications .  <b>Ghizlan MAYMOUN</b>            Applied chemistry, geo-mines and modelisation, Polydisicplinary Faculty of Ouarzazate, Ibn Zohr University</p>
<b>16h45 -17h00</b>	<p><b>Com 08:</b> Artificial Intelligence in Wastewater Treatment: A Bibliometric Analysis of Emerging Trends  <b>Soukaina BAKKASS</b>            Hydraulic Systems Analysis Laboratory, Mohammedia School of Engineers, Mohammed-V University in Rabat</p>
<b>17h00 -17h15</b>	<p><b>Com 09:</b> AI for COD: resolving ambiguity between dissolved and undissolved matter in turbid matrices  <b>Meryem NINI</b>            Laboratory of physical Chemistry and biotechnology of Biomolecules and Materials, Faculty of Sciences and Techniques, Hassan II University of Casablanca</p>
<b>17h15-17h30</b>	<p><b>Com 10:</b> Artificial Intelligence-Enhanced Prediction and Modeling of Magnetic Properties in Spinel Compounds  <b>Keltoum KHALLOUQ</b>            Laboratory of Solid Physics, Faculty of Sciences Dhar ElMahraz, Sidi Mohamed Ben Abdellah University, BP 1796, Fez, Morocco.</p>

## Session 2 - Salle A -

## Modérateurs :

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

15h00-15h15	<p><u>Com 01</u> : Computational and Artificial Intelligence-Assisted Study of [3+2] Cycloaddition-Derived Compounds as Potential Agents : A Combined DFT, ADMET, Molecular Docking and Molecular Dynamics Approach  <b>Rachid BOUTIDDAR</b>  Analysis, Modeling, Engineering, Natural Substances and Environment Laboratory, Polydisciplinary Faculty of Taroudant, Ibn Zohr University</p>
15h15-15h30	<p><u>Com 02</u> : Etude des propriétés antioxydantes de l'urée, du thiourée et de certains de leurs dérivées : Analyse par machine learning  <b>Rodrigue chabi DOCO</b>  Laboratoire de Chimie Physique Théorique Matériaux et Modélisation Moléculaire (LCP3M), Université d'Abomey-Calavi</p>
15h30-15h45	<p><u>Com 03</u> : Déchiffrer les conformations protéiques à l'aide de l'apprentissage profond : Applications aux protéines kinases.  <b>Adil AHIRI</b>  Faculté Polydisciplinaire de Safi, Université Cadi Ayyad</p>
15h45-16h00	<p><u>Com 04</u> : A First-Principles Study of Surface Passivation Effects on the Stability, Electronic, and Optical Properties of Silicon Quantum Dots: Toward AI-Assisted Materials Design.  <b>Fatima ezzahra DNAYA</b>  EBCG-Lab, Department of Physics, PolyDisciplinary Faculty of Safi, Cadi Ayyad University.</p>
16h00-16h15	<p><u>Com 05</u> : Hybrid QSPR-DNN Framework for Photovoltaic Efficiency Prediction in Organic Semiconductors  <b>Mohammed ELKABOUS</b>  University Mohammed Premier, Faculty of Sciences of Oujda, chemistry department, Applied Chemistry and Environment Laboratory (LCAE).</p>
16h15-16h30	<p><u>Com 06</u> : Molecular Engineering of Organic Dyes for DSSCs: DFT/TD-DFT Insights and the Promising Role of Artificial Intelligence in Enhancing Photovoltaic Performance  <b>Ahmed ARIF</b>  Faculty of Sciences and Technologies, Sultan Moulay Slimane University, Beni-Mellal.</p>
16h30-16h45	<p><u>Com 07</u> : Tuning Sunlight: First-Principles and Machine Learning Perspectives on TiO<sub>2</sub> for High-Performance Dye-Sensitized Solar Cells  <b>Imane KHARBOUCHI</b>  EBCG-Lab, Department of Physics, PolyDisciplinary Faculty of Safi, Cadi Ayyad University.</p>
16h45-17h00	<p><u>Com 08</u> : Theoretical study on the interactions of pyrazoline compounds with COVID-19 (Mpro) master RNA  <b>Zineb OUAHDI</b>  Modeling and Spectroscopy Research Team, Faculty of Science, Chouaib Doukkali University, ElJadida.</p>
17h00-17h15	<p><u>Com 09</u> : Synthèse de nouvelles molécules hybrides dérivées de la quinazolin-4-one et évaluation de leurs propriétés antibactériennes, études in vitro et in silico  <b>Ayoub MOUHIB</b>  Equipe de Chimie Bioorganique, Département de Chimie, Faculté des Sciences, Université Chouaib Doukkali, El Jadida</p>
17h15-17h30	<p><u>Com 10</u>: Exploring Of Novel Thymol-Based Amino-Thiazole Hybrids: Computational Evaluation Of Anticancer Activity  <b>Amal BOURIBAB</b>  Laboratory of Analytical and Molecular Chemistry, Faculty of Sciences Ben M'Sik, Hassan II University of Casablanca</p>
17h30-17h45	<p><u>Com 11</u>: Artificial Intelligence Enhanced Study of Artemisia herba alba Oil as a Sustainable Inhibitor for Mild Steel: characterization, electrochemical and surface analysis  <b>Kamal BOUMHARA</b>  Laboratory of Materials, Nanotechnology and Environment, Faculty of Sciences, Mohammed V University, Av. Ibn Battuta, B.P 1014 Rabat, Morocco</p>

## Session 3 - Salle B -

## Modérateurs :

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

15h00-15h15	<p><b>Com 01:</b> Enhancing Organic Photovoltaic Cells: Quinoxaline-Based Small Molecule Acceptors and the Role of AI and Deep Learning in Performance Optimization and Innovation.</p> <p><b>Ikram MENNASA</b> TCPAM, Polydisciplinary Faculty, Sultan Moulay Slimane University, Mghila, Beni-Mellal.</p>
15h15-15h30	<p><b>Com 02:</b> Optical and electronic characterization of TiO<sub>2</sub> to dye interfaces using TD-DFT and artificial intelligence.</p> <p><b>Badreddine BOUKILI</b> Faculty of Sciences and Technologies, Sultan Moulay Slimane University, Beni Mellal.</p>
15h30-15h45	<p><b>Com 03:</b> Study of Lithium-Ion Intercalation and Deintercalation into FePO<sub>4</sub> Using Electrochemical Techniques.</p> <p><b>Youssef MOUKHLESS</b> Faculty of Sciences, Applied Chemistry-Physics laboratory, Ibnou Zohr University, Agadir.</p>
15h45-16h00	<p><b>Com 04 :</b> Modélisation numérique 3D du flambement de poteaux en acier corrodés : vers une prédiction assistée par intelligence artificielle.</p> <p><b>Meriyem MOULoudi</b> Laboratoire de Chimie Appliquée et Environnement, Faculté des Sciences et Techniques, Université Hassan Premier.</p>
16h00-16h15	<p><b>Com 05:</b> Entre assistance et autonomie : le doctorant face à l'IA</p> <p><b>Mariam SAHRAOUI</b> Ecole Supérieure de l'Education et de la Formation de Berrechid, Université Hassan 1<sup>er</sup>.</p>
16h15-16h30	<p><b>Com 06:</b> Teaching chemistry in the era of generative AI.</p> <p><b>Meryem JANATI IDRISI</b> Sidi Mohammed Ben Abdellah University, Faculty of Sciences, Solid-State Physics Laboratory, Fez.</p>
16h30-16h45	<p><b>Com 07:</b> Comparative study of multiclass brain tumor classification using Efficient Net Architectures.</p> <p><b>Amal KAAB</b> Physics, Energy, Environment and Applications Laboratory (LP2EA), Cadi Ayyad University, Polydisciplinary Faculty, Safi</p>
16h45-17h00	<p><b>Com 08:</b> In Silico Design and Validation Of 3-Amino-2,4-Diarylbenzo[4,5]Imidazo[1,2A]Pyrimidine Derivatives as Alpha-Glucosidase Inhibitors: A QSAR, docking, ADMET, and Molecular Dynamics Approach.</p> <p><b>Oussama ABCHIR</b> Laboratory of Analytical and Molecular Chemistry, Hassan II University of Casablanca,</p>
17h00-17h15	<p><b>Com 09:</b> Phytochemical-based modulation of IL-4R<math>\alpha</math> for developing plant-derived therapeutics against eczema: Insights from in silico screening, ADMET profiling and molecular dynamics.</p> <p><b>Lamiae EL BOUAMRI</b> Laboratory of Analytical and Molecular Chemistry, Faculty of Sciences Ben M'Sick, Hassan II University of Casablanca</p>
17h15-17h30	<p><b>Com 10:</b> Surveying Novel Pyrazine Acceptor Materials for Bulk Heterojunction Solar Cells: Computational Insights using AI and deep learning to study Photovoltaic Performance.</p> <p><b>Mohamed KADOUR ATOUAILAA</b> TCPAM, Polydisciplinary Faculty, Sultan Moulay Slimane University, Beni-Mellal.</p>
17h30-17h45	<p><b>Com 11:</b> In Silico Design Of Pyridones Derivatives As Alpha-Glucosidase Inhibitors: A Qsar Study, Molecular Docking, Admet, And Molecular Dynamics Approach.</p> <p><b>Bouchra Rossafi</b> Laboratory of Analytical and Molecular Chemistry, Hassan II University of Casablanca.</p>

# Communications par affiche

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

La 1<sup>ère</sup> édition du colloque national Eau,  
Matériaux et Modélisation Moléculaire  
E3M-2025

25 juin 2025  
Faculté Polydisciplinaire de Safi