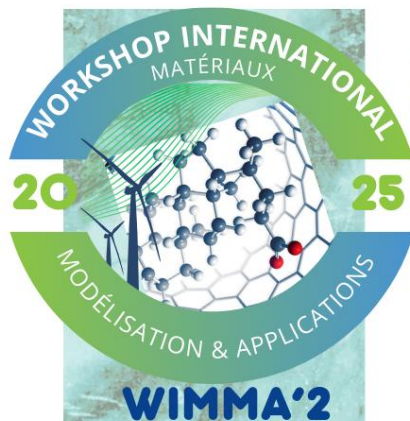




الكلية متعددة التخصصات تازة
 +.ΨΞΠ.Ι+ +.Χ+ΞΖΗΞ+ | +.Ζ.
 FACULTÉ POLYDISCIPLINAIRE DE TAZA



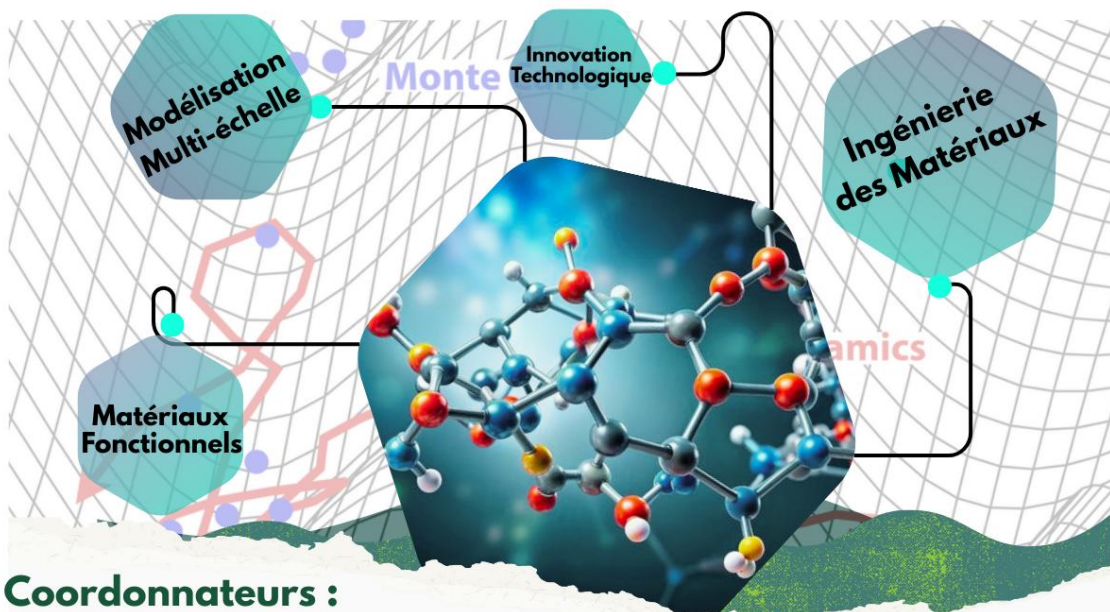
جامعة سيدي محمد بن عبد الله بفاس
 +.ΘΛΥΞ+ ΘΞΛΞ ΓΞΛΓΓ.Λ ΘΙ ΑΘΛΗ.Φ Ι Ξ.Θ
 UNIVERSITÉ SIDI MOHAMED BEN ABDELLAH DE FES

**EQUIPE MATÉRIAUX, SUBSTANCES NATURELLES,
 ENVIRONNEMENT & MODÉLISATION (MSNEM)
 LABORATOIRE MATÉRIAUX, PROCÉDÉS, CATALYSE,
 AGROALIMENTAIRE ET ENVIRONNEMENT (LMPCAE)
 EN COLLABORATION AVEC :
 ASSOCIATION MAROCAINE DES RESSOURCES NATURELLES,
 ENVIRONNEMENT ET DÉVELOPPEMENT DURABLE ((AMRNE2D)**

ORGANISENT :

La 2^{ème} Edition du Workshop
INTERNATIONAL

«MATÉRIAUX, MODÉLISATION & APPLICATIONS»



Coordonnateurs :

Prs. Fatima LAMCHOURI, Redouan EL-KHALFAOUI, Hamid TOUFIK
 Mail: redouan.elkhalfaoui@usmba.ac.ma



**Faculté Polydisciplinaire de Taza
 29 Novembre 2025**



**WORKSHOP
 29-11-2025**

S O M M A I R E

Remerciements

Comités

Synopsis

*Thèmes de la 2^{ème} Edition du Workshop International Matériaux, Modélisation
& Applications (WIMMA'2 - 2025)*

*Programme Scientifique de la 2^{ème} Edition du Workshop International
Matériaux, Modélisation & Applications (WIMMA'2 - 2025)*

Liste des communications orales (CO)

Liste des communications par affiche (CA)

Biographies des Conférenciers

Résumés des Conférences

Remerciements

Le Doyen de la Faculté Polydisciplinaire de Taza, les membres de l'Equipe « Matériaux, Substances Naturelles, Environnement et Modélisation (MSNEM) » du Laboratoire MPCAIE et les coordonnateurs de la **2^{ème} Edition du Workshop International Matériaux, Modélisation & Applications (WIMMA'2 - 2025)**, organisée à la Faculté Polydisciplinaire de Taza le **29 novembre 2025**, remercient vivement les partenaires de cette manifestation scientifique que nous citons ci-dessous :

- Université Sidi Mohamed Ben Abdellah de Fès, Maroc ;
- Faculté Polydisciplinaire de Taza, Maroc ;
- Laboratoire Matériaux, Procédés, Catalyse, Agroalimentaire et Environnement (LMPCAIE);
- Association Marocaine des Ressources Naturelles, Environnement et Développement Durable (AMRNE2D).

Comités

Comité d'Honneur :

Pr. IJJAALI Mustapha :

Président de l'Université Sidi Mohamed Ben Abdellah de Fès, Maroc.

Pr. EL HADRAMI El Mestafa :

Vice Président en charge de la Recherche Scientifique et de la Coopération, USMBA, Maroc.

Pr. TABYAOUI Hassan :

Doyen de la Faculté Polydisciplinaire de Taza, USMBA-Fès, Maroc.

Pr. KARIM Mohammed:

Directeur de l'Ecole Supérieure de Technologie de Fès, USMBA-Fès, Maroc.

Comité Scientifique :

Pr. ADDAOU Abdellah, EST de Fès - Maroc ;
Pr. AHJYAJE Fatima Zahra, FP de Taza - Maroc ;
Pr. AIT MALEK Halima, FP de Safi - Maroc ;
Pr. AKABLI Taoufik, ISPITS de Taza - Maroc ;
Pr. AKHAZZANE Mohamed, Cité d'Innovation, USMBA - Fès - Maroc ;
Pr. AMECHROUQ Ali , FS de Meknès - Maroc ;
Pr. BELAABED Raja, EST de Fès - Maroc ;
Pr. BELMIR Fouzi, EST de Fès - Maroc ;
Pr. BOUABID Khadija, ISPITS de Taza - Maroc ;
Pr. BOUDKHILI Meriem, EST de Fès - Maroc ;
Pr. BOULFIA Mohamed, ISPITS de Tétouan - Maroc ;
Pr. BOUSLAMTI Rabia, EST de Fès - Maroc ;
Pr. BOUZAKRAOUI Said, FS de Kenitra - Maroc ;
Pr. BOUZZINE Si Mohamed, CRMEF d'Errachidia - Maroc ;
Pr. BRAVETTI Pierre, Université de Lorraine - France ;
Pr. CHAOUNI BENABDALLAH Aziz, EST de Fès - Maroc ;
Pr. DEROUICH Aziz, EST de Fès - Maroc ;
Pr. ELABED Alae, ENSA de Khouribga - Maroc ;
Pr. EL HAISSOUFI Mohamed, FP de Taza - Maroc ;
Pr. EL HALLAOUI Menana, FSDM de Fès - Maroc ;
Pr. EL-KHALFAOUI Redouan, FP de Taza - Maroc ;
Pr. EL KHATTABI Souad, ENSA de Fès - Maroc ;
Pr. ELKNIDRI Hakima, EST de Fès - Maroc ;
Pr. ENNABILI Abdeslam, EST de Fès - Maroc ;
Dr. ENNEHARY Sliman, FP de Taza - Maroc ;
Pr. ELOTHMANI Driss, ESA d'Angers - France ;
Pr. HAMIDI Mohammed, FST d'Errachidia - Maroc ;
Pr. HARKI El Houssaine, FST de Fès - Maroc ;
Pr. IBN MAJDOUB HASSANI Laila, FP de Taza - Maroc ;
Pr. IGNACIO BELTRAN Juan, FCF-UCM, Madrid - Espagne)
Pr. KHALLOUK Khadija, ENSAM de Casablanca - Maroc ;
Pr. KHERBECHE Abdelhak, EST de Fès - Maroc ;
Pr. LAAJEB Ali, EST de Fès - Maroc ;
Pr. LACHKAR Nacima, ISPITS de Taza - Maroc ;
Pr. LAIRINI Sanae, EST de Fès - Maroc ;
Pr. LAMCHOURI Fatima, FP de Taza - Maroc ;
Dr. LAZRAK Malak, FP de Taza - Maroc ;
Dr. MAHTAL Asmae, FP de Taza - Maroc ;
Pr. MEJBAR Fatiha, EST de Fès - Maroc ;
Dr. MHERZI Nezha, FP de Taza - Maroc ;
Pr. MOUNIR Bahija, FS Ben M'Sik Casablanca - Maroc ;
Dr. SAIDI Omar, Laboratoire AGRILABO – Fès – Maroc ;
Pr. SENHAJI Souad, ISPITS de Taza - Maroc ;
Pr. TAYBI Hanan, FP de Taza - Maroc ;
Pr. TOUFIK Hamid, FP de Taza - Maroc ;
Dr. ZALAGHI Abdelouahab, MENPS-Direction de Taza & FPT-USMBA - Maroc.

Comité d'Organisation :

Pr. AKABLI Taoufik, ISPITS de Taza - Maroc ;
Pr. BOUABID Khadija, ISPITS de Taza - Maroc ;
Pr. BOULFIA Mohamed, ISPITS de Tétouan - Maroc ;
Pr. EL HAISSOUFI Mohamed, FP de Taza - Maroc ;
Pr. EL-KHALFAOUY Redouan, FP de Taza - Maroc ;
Dr. ENNEHARY Sliman, FP de Taza - Maroc ;
Pr. IBN MAJDOUB HASSANI Laila, FP de Taza - Maroc ;
Pr. LACHKAR Nacima, ISPITS de Taza - Maroc ;
Pr. LAIRINI Sanae, EST de Fès - Maroc ;
Pr. LAMCHOURI Fatima, FP de Taza - Maroc ;
Dr. LAZRAK Malak, FP de Taza - Maroc ;
Dr. MAHTAL Asmae, FP de Taza - Maroc ;
Dr. MHERZI Nezha, FP de Taza - Maroc ;
Pr. SENHAJI Souad, ISPITS de Taza - Maroc ;
Pr. TAYBI Hanan, FP de Taza - Maroc ;
Pr. TOUFIK Hamid, FP de Taza - Maroc ;
Dr. ZALAGHI Abdelouahab, MENPS-Direction de Taza & FPT-USMBA – Maroc.

Comité d'Organisation des Doctorants MSNEM- LMPCAE :

BOUALAM Omar, EST de Fès - Maroc ;
BOUHAZAMA Hafida, FP de Taza - Maroc ;
EL ALAMI Souad, EST de Fès - Maroc ;
EL BOURIMI Youssef, FP de Taza - Maroc ;
ERRABBANI Abdellatif, FP de Taza - Maroc ;
KADI Mokhtar, FP de Taza - Maroc ;
LAAMACH Fahd, FP de Taza - Maroc ;
LAHRACHE Ayoub, FP de Taza - Maroc ;
LAKHLOUFI Samir, FP de Taza - Maroc ;
LAMKADMI Hanae, FP de Taza - Maroc ;
LAMRAK Soukaina, FP de Taza - Maroc ;
LAMRANI Mustapha, FP de Taza - Maroc ;
MOUCHANE Mohamed, FP de Taza - Maroc.

Coordonnateurs:

Pr. Fatima LAMCHOURI - Pr. Redouan EL-KHALFAOUY - Pr. Hamid TOUFIK

Université Sidi Mohamed Ben Abdellah de Fès

Faculté Polydisciplinaire de Taza Route d'Oujda, B.P. 1223 Taza-Gare, Taza, Maroc

Equipe Matériaux, Substances Naturelles, Environnement et Modélisation (MSNEM) -

Laboratoire MPCAE

Tel: +212 5 35 21 19 76 / +212 5 35 21 19 77

Fax: +212 5 35 21 19 78

Email : redouan.elkhalfaouy@usmba.ac.ma

www.fpt.usmba.ac.ma

Synopsis :

La première édition du **Workshop Matériaux, Modélisation & Applications (WMMA'1 - 2015)** a été organisée le **09 décembre 2015**, sous l'égide de l'Université Sidi Mohamed Ben Abdellah (USMBA) de Fès – Faculté Polydisciplinaire de Taza (FPT). Cet événement scientifique a rapidement suscité un vif intérêt, générant un impact significatif à l'échelle régionale et nationale. Grâce à des échanges dynamiques entre académiques, industriels et experts, ce workshop a permis d'explorer des avancées technologiques et des innovations en science des matériaux et modélisation.

Dans un contexte où la durabilité, l'optimisation des matériaux et le transfert technologique occupent une place centrale, le Maroc s'affirme comme un acteur clé du développement scientifique et industriel. Grâce à la mobilisation de ses ressources académiques et économiques, il adopte des stratégies innovantes, alignées sur les exigences du développement durable et les impératifs de compétitivité internationale. Fidèle à cette dynamique et portée par le succès de sa première édition (WMMA'1 - 2015), la **2^{ème} Edition du Workshop International Matériaux, Modélisation & Applications (WIMMA'2 - 2025)** s'apprête désormais à franchir une nouvelle étape en étendant son rayonnement à l'échelle internationale.

Cette **deuxième édition** du (WIMMA'2 - 2025), est organisée par l'**Équipe Matériaux, Substances Naturelles, Environnement et Modélisation (MSNEM)**, domiciliée à la Faculté Polydisciplinaire de Taza (FPT), du Laboratoire Matériaux, Procédés, Catalyse, Agroalimentaire et Environnement (LMPCAE), soulignant ainsi une volonté commune d'encourager la recherche et de promouvoir des solutions scientifiques innovantes au service du développement durable.

Les objectifs du WIMMA'2 – 2025 sont :

- Promouvoir la recherche sur les matériaux et leurs applications dans divers domaines ;
- Valoriser le rôle de la modélisation dans l'étude et l'optimisation des matériaux ;
- Intégrer la Modélisation moléculaire, l'Intelligence artificielle (IA) dans le domaine du Drug design ;
- Encourager l'innovation et la conception de solutions durables adaptées aux enjeux industriels et environnementaux ;
- Favoriser le transfert technologique et la mise en place de partenariats entre les universitaires et les acteurs socio-économiques.

Programmé sur une journée, le WMMA'2 – 2025 est destiné à la présentation de travaux scientifiques et technologiques sur les matériaux et permettra de réunir la communauté scientifique de ce domaine à travers une série de conférences animées par des spécialistes et de communications orale et par affiche. Il vise également à offrir une large place aux doctorants et post-doctorants pour présenter leurs travaux de recherches.

Le comité d'organisation du WIMMA'2–2025 se réjouit de retrouver l'ensemble des participants et invités à Taza et à la Faculté Polydisciplinaire de Taza.

Pour le Comité d'Organisation

Prs Fatima Lamchouri, Redouan El-Khalifaouy & Hamid Toufik



*Thèmes de la 2^{ème} Edition du Workshop International
Matériaux, Modélisation & Applications (WIMMA'2 - 2025)*

<i>Thème 1 :</i>	<i>Matériaux avancés et leurs propriétés fonctionnelles</i>
<i>Thème 2 :</i>	<i>Modélisation et simulation appliquées aux matériaux</i>
<i>Thème 3 :</i>	<i>Applications industrielles et innovation en matériaux</i>
<i>Thème 4 :</i>	<i>Modélisation moléculaire, Intelligence artificielle (IA) & Drug design</i>

*Programme Scientifique de la 2^{ème} Edition du Workshop International
Matériaux, Modélisation & Applications (WIMMA'2 - 2025)*

Samedi 29 novembre 2025

08h00-09h00	Accueil & Inscription des Participants		
09h-09h30	<i>Salle de conférences de la Faculté Polydisciplinaire de Taza (FPT)</i> - Ouverture officielle du WIMMA'2 - 2025 & Allocutions <i>Modérateurs :</i> Prs. Fatima Lamchouri - Sanae Lairini - Khadija Bouabid Redouan El-Khalifaouy - Said Bouzakraoui - Hamid Toufik <i>Rapporteurs :</i> Drs. Asmae Mahtal & Malak Lazrak		
09h30-10h00	- Conférence 1 : Prof. Juan Ignacio Beltrán GFMC, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain. Ab-initio modelization of perovskite heterostructures: tuning properties by field and defect control		
10h00-10h30	- Conférence 2 : Pr. Taoufik Akabli, Pr Fatima Lamchouri, Pr Hamid Toufik Institut Supérieur des Professions Infirmières et Techniques de Santé (ISPIT) de Taza & Equipe MSNEM - Laboratoire MPCAE, FPT, USMBA. Drug discovery in the digital era: the strategic role of molecular modelling and artificial intelligence		
10h30-11h00	- Conférence 3 : Pr. Souad El Khattabi Laboratoire d'Ingénierie, Systèmes et Applications (LISA), ENSA, USMBA. Modélisation moléculaire pour une meilleure compréhension des matériaux		
11h00-11h30	Débat & discussion des conférences 1, 2 & 3		
11h30-12h00	<i>Pause-café & Session Posters (CA1 à CA20)</i> <i>Modérateurs & Rapporteurs:</i> Pr. Taoufik Akabli & Dr. Sliman Ennehary		
12h00-14h30	Sessions en parallèles		
	Session 1 : <i>Matériaux: Propriétés, Modélisation, Applications & Innovation</i> <i>Salle de réunion – Batiment des enseignants</i> <i>Modérateurs & Rapporteurs :</i> Prs. El-Khalifaouy Redouan - Raja Belaabed - Hakima Elknidri	Session 2 : <i>Drug design: Modélisation moléculaire & Intelligence artificielle (IA)</i> <i>Salle de conférences FPT</i> <i>Modérateurs & Rapporteurs :</i> Prs. Rabia Bouslamti Khadija Bouabid - Meryem Boudkhili – Taoufik Akabli	Session 3 : Session en ligne <i>Drug design: Modélisation moléculaire & Intelligence artificielle (IA) &</i> <i>Matériaux: Propriétés, Modélisation, Applications & Innovation</i> Salle Informatique (I-3) <i>Modérateurs & Rapporteurs :</i> Prs Hamid Toufik - Souad Senhaji - Nacima Lachkar & Dr Sliman Ennehary

	Communications Orales : CO1 – CO10 10 min / communication	Communications Orales : CO26 – CO35 10 min / communication	Communications orales en ligne (COL): COL45 – COL54 10 min / communication
	Débat & discussion des communications orales : CO1 – CO10	Débat & discussion des communications orales : CO26 – CO35	Débat & discussion des communications en ligne (COL) : COL45 – COL54 05 min / communication
14h30-15h15	Déjeuner		
15h15-15h55	<i>Salle de conférences de la Faculté Polydisciplinaire de Taza (FPT)</i> Modérateurs : Prs. Fatima Lamchouri - Hanan Taybi – Mohamed El Haissoufi Rapporteurs : Drs. Asmae Mahtal & Malak Lazrak		
15h15-15h45	- Conférence 4 : Dr Abdelouahab Zalaghi, Pr Fatima Lamchouri, Pr Hamid Toufik MENPS - Direction de Taza & Equipe MSNEM - Laboratoire MPCAE, FPT, USMBA. Valorisation des matériaux naturels et intelligence artificielle pour une gestion durable des ressources naturelles		
15h45-15h55	Débat & discussion de la conférence 4		
15h55-19h40	Sessions en parallèles		
	Session 1 : <i>Matériaux: Propriétés, Modélisation, Applications & Innovation</i> Salle de réunion – Batiment des enseignants Modérateurs & Rapporteurs : Prs. Hanan Taybi - Fatiha Mejbar - Souad El Khattabi - Redouan El-Khalfaouy	Session 2 : <i>Drug design: Modélisation moléculaire & Intelligence artificielle (IA)</i> Salle de conférences FPT Modérateurs & Rapporteurs : Prs. Mohamed El Haissoufi Souad Senhaji - Nacima Lachkar	Session 3 : Session en ligne <i>Drug design: Modélisation moléculaire & Intelligence artificielle (IA)</i> & <i>Matériaux: Propriétés, Modélisation, Applications & Innovation</i> Salle Informatique (I-3) Modérateurs & Rapporteurs : Pr Hamid Toufik & Drs Abdelouahab Zalaghi & Malak Lazrak
	Communications Orales : CO11 – CO25 10 min / communication	Communications Orales : CO36 – CO44 10 min / communication	Communications orales en ligne (COL): COL55 – COL57 10 min / communication
	Débat & discussion des communications orales CO11 – CO25	Débat & discussion des communications orales CO36 – CO44	Débat & discussion des communications en ligne (COL) : COL55 – COL57 05 min / communication
19h40-20h10	<i>Salle de conférences de la Faculté Polydisciplinaire de Taza (FPT)</i> Séance de clôture & Bilan du WIMMA'2 - 2025		

*Liste des Communications Orales de la 2^{ème} Edition du Workshop International
Matériaux, Modélisation & Applications (WIMMA'2 - 2025)*

<i>Session 1</i> <i>Salle de réunion – Batiment des enseignants</i>		
<i>Drug design: Modélisation moléculaire & Intelligence artificielle (IA)</i>		
Références	Auteurs	Titres
CO1	Dakhli Yosra, Berrabah Mohammed, Zelmimi Nouredine, Rachid Touzani, Jerdioui Souhail	Encapsulation of (3,5-dimethyl-1H-pyrazol-1-yl) methanol in Dicalcium Phosphate-Based Materials: Synthesis, Characterization and Applications
CO2	Malak Lazrak, Hamid Toufik, Sliman Ennehary, Si Mohamed Bouzzine, Fatima Lamchouri	From Structure to Efficiency: Acceptor Influence in D- π -A Organic Dyes through the DFT Approach
CO3	Kachbou Yousra, Azzaoui Khalil, Hammouti Belkheir	Advances in Phosphate-Based Materials for Next-Generation Batteries
CO4	Zineb Tchorbo, Marieme Kacem, J.M. Doña Rodriguez, Meryem Idrissi Yahyaoui, Abderrahim Essaddek, Mounsef Neffa, Abdeslam Asehraou, Mustapha Dib	Preparation and Characterization of Novel Phosphorylated MgAl-LDH Decorated with Ag Nanoparticles for Catalytic and Antimicrobial Applications
CO5	Fatima zahra Znaki, Khalid Said, Jihane Znaki, Oumayma Douichi, Mohamed Adadi, Abdelouahid Ezzarfi, Hassane Moustabchir, Souad Elkhatabi	Modeling and Interface Optimization of Lead-Free TiO ₂ /Cs ₂ TiI ₆ /CdTe Solar Cells for Sustainable Photovoltaic Applications
CO6	Malak Lazrak, Sliman Ennehary, Hamid Toufik, Fatima Lamchouri, Si Mohamed Bouzzine	Advancing Dye Architecture through Thiophene-Based π -Bridges: A Computational Study
CO7	Soumia Chliyah, Ayoub Lahmidi, Samir Chtita, Abdelkbir Errougui	Molecular dynamics investigation of the solvation, transport, and dielectric properties of the {NaPF ₆ -DMSO} electrolyte system used in sodium-ion battery technology at various temperatures
CO8	Nabil Fikri, Lahcen Benaabidate, Abderrahim Lahrach	Élimination par adsorption du méthylorange dans des systèmes aqueux à l'aide de biochar dérivé de déchets de Malus domestica
CO9	Sliman Ennehary, Hamid Toufik, Malak Lazrak, Si Mohamed Bouzzine and Fatima Lamchouri	Effect of the π -conjugated bridge on the optoelectronic properties of carbazole-based sensitizers for DSSC solar cells: A DFT study
CO10	Baalal Salah Eddine, Fatima-Zahra Oulakhir, Iatimad Akhrif, Mostapha El Jai	Additive Manufacturing of Concrete Using Hybrid Materials: A Literature Review and Experimental Investigation
CO11	I.El hajji idrissi , I. Tazi , H. Zaita	Fenton-like catalyst based on cotton fabric impregnated with CuO@Biochar for the degradation of methylene blue.
CO12	Jihane Znaki, Fatima Zahra Znaki, Khalid Said, Oumayma Douichi, Mohamed Adadi, Abdelouahid Ezzarfi, Hassane Moustabchir, Souad El khatabi	DFT-based analysis of the physical properties response of Rb ₂ YInI ₆ double perovskite to hydrostatic pressure for photovoltaic applications

CO13	Hicham Mahmoud, Ali Dafali, Yousra Bahjou, Smaail Radi	Study of the Corrosion-Inhibiting Properties of two Inhibitors on Mild Steel: Experimental and Theoretical Approaches
CO14	Sliman Ennehary, Hamid Toufik, Malak Lazrak, Si Mohamed Bouzzine and Fatima Lamchouri	A Computational Analysis of Donor-Functionalized Carbazole Dyes for Photovoltaic Applications.
CO15	Khalid Said, Jihane Znaki, Fatima Zahra Znaki, Oumayma douichi, Mohamed Adadi, Abdelouahid Ezzarfi, Hassane Moustabchir, Souad Elkhatabi	Investigation des caractéristiques optoélectroniques des composés halogénés à base d'étain et de méthylammonium pour une utilisation dans les cellules solaires
CO16	Mustapha Lamrani, Mohamed Mouchane, Hanan Taybi, Abdeslam Mouadili	Adsorption et études thermodynamiques et cinétiques de l'élimination du bleu de méthylène des solutions aqueuses à l'aide d'argiles naturelles de la région de Fès.
CO17	Abdelaziz Dra, Omar Boualam, Lamyae Mardi, Ababou Abdesalm, Fatin Tagnaouti Moumnani, Redouan El Khalfaouy, Abdelali El Gaidoumi	The performance of the electrocoagulation process with copper Electrodes for tannery wastewater treatment of oued sebou
CO18	Smail Ait Said Ali, Boujemaa Soubai, Belaid Selhami, Az-Iddin Chham, Mohamed Tahiri	Synthesis and Characterization of a Novel and Efficient Bio-Based Biocomposite for Anionic Dye Removal
CO19	Adel Maha, Bennis Mohamed, Tanane Omar	Towards a Greener Cement Industry : Assessing the Environmental and Mechanical Performance of Phosphogypsum-Substituted Cement
CO20	Youssef Adnan, Brahim El Ibrahimi, Abdelaziz Ait Addi	Études électrochimiques du composé organique hétérocyclique C4-PRZ-1 comme inhibiteur de corrosion de l'acier doux dans une solution d'HCl 1 M
CO21	Hajar Ait Oulahyane, Salma Ighidi, Lamia Bourja, Omar Ait Sidi Ahmed	Synthesis and Characterization of Zinc Oxide Nanoparticles for Photocatalytic Applications
CO22	Karima Dokkar, Boutaina Moumni, Maryam Achik, Hayat Benmoussa, Abdellah Oulmekki	Transformation des déchets de tannerie en ressource pour la fabrication de briques éco-durables
CO23	Abderrazzak Adachi, Belkheir Hammouti, Amal Lahkimi	High value-added valorization of biowaste: study of the catalytic performance and hydrogen peroxide activation characteristics of iron-doped hydrochar-based monometallic catalysts in the degradation of an organic pollutant.
CO24	El Bachir Ettahiri, Abdelaaziz Alioui, Mohamed Hamidi, Si Mohamed Bouzzine	DFT/TD-DFT Investigation of π -Bridge Elongation Effects on the Photovoltaic Performance of Triphenylamine-Based Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells
CO25	Abdelaaziz Alioui, Tahiri El Bachir, Mohamed Hamidi, Si Mohamed Bouzzine	Photovoltaic performance and power conversion efficiency prediction of solar cells: A photo current-voltage assessment

*Liste des Communications Orales de la 2^{ème} Edition du Workshop International
Matériaux, Modélisation & Applications (WIMMA'2 - 2025)*

<i>Session 2</i> <i>Salle de conférences FPT</i>		
<i>Drug design: Modélisation moléculaire & Intelligence artificielle (IA)</i>		
Références	Auteurs	Titres
CO26	Briach Youssef, Jamal Elkhachchi, Salima Hdiddou, Menana Elhallaoui	<i>In silico</i> design and optimization of dihydropteridine derivatives targeting PLK1 kinase
CO27	Hafida Bouhazama, Fatima Lamchouri, Soukaina Lamrak, Nacima Lachkar, Asmae Mahtal, Hamid Toufik	Phytochemical profiling and quantitative analysis of bioactive constituents in <i>Rhamnus alaternus</i> (L.)
CO28	Hafida Bouhazama, Fatima Lamchouri, Soukaina Lamrak, Asmae Mahtal, Nacima Lachkar, Hamid Toufik	Assessment of cytotoxic potential of <i>Rhamnus alaternus</i> extracts through Brine Shrimp bioassay and its correlation with chemical composition
CO29	Asmae Mahtal, Hamid Toufik, Taoufik Akabli, Hanae Lamkadmi, Ayoub Lahrache, Fatima Lamchouri	<i>In silico</i> analysis of the antibacterial activity of a series of molecules derived from hydroxamic acid
CO30	Salima Hdiddou, Youssef Briach, Jamal Elkhachchi, Mennana Elhallaoui	QSAR of Dizocilipine a non compétitif antagonist of the NMDA receptor
CO31	Hanae Lamkadmi, Hamid Toufik, Ayoub Lahrache, Asmae Mahtal, Taoufik Akabli and Fatima Lamchouri	Predictive Structure–Activity Relationship Modeling of Lignans as Promising Anticancer Agents
CO32	Badr Hamdache, Kamal Tabti, Mustapha Dib, Menana Elhallaoui, Hajiba Ouchetto	<i>In silico</i> study integrating Gaussian field analysis, pharmacophore modeling, molecular docking, and ADMET evaluation of substituted pyrazolyl-pyrimidinones as potential anti-HIV agents
CO33	Ayoub Lahrache, Hamid Toufik, Hanae Lamkadmi, Asmae Mahtal, Taoufik Akabli and Fatima Lamchouri	2D-QSAR Modeling of Coumarin–pyrimidinone Compounds for Anticancer Drug Discovery
CO34	Mokhtar kadi, Fatima Lamchouri, Soukaina Lamrak, Hafida Bouhazama, Youssef El Bourimi, Hamid Toufik	Yield and chemical composition of organic extracts from a Fabaceae plant
CO35	Youssef El Bourimi, Fatima Lamchouri , Hafida Bouhazama, Soukaina Lamrak, Mokhtar kadi, Hamid Toufik	Study of organic extraction performance and qualitative and quantitative phytochemical analysis of a Juncaceae plant
CO36	Larbi EL Mchichi, Mohammed Bouachrine	Conception <i>in silico</i> et développement synthétique de nouveaux dérivés de benzimidazoles à potentiel anti-RCC
CO37	Hanae Lamkadmi, Hamid Toufik, Ayoub Lahrache, Asmae Mahtal, Taoufik Akabli and Fatima Lamchouri	2D-QSAR Modeling and Molecular Insights into Lignan Derivatives with Potential Anticancer Activity
CO38	Ayoub Lahrache, Hamid Toufik, Hanae Lamkadmi, Asmae Mahtal, Taoufik Akabli and Fatima Lamchouri	Computational 2D-QSAR Analysis of Coumarin–Furo[2,3-d]pyrimidinone Derivatives as Potential Anticancer Agents
CO39	Youssef EL BOURIMI, Hamid Toufik, Hanae Lamkadmi, Taoufik Akabli and Fatima Lamchouri	2D-QSAR analysis of the GSK-3β inhibitory activity of 2-(4-aryl-2-methylpiperazin-1-yl)-pyrimidin-4-one derivatives

CO40	Fahd Laamach, Fatima Lamchouri, Youssef El Bourimi, Hafida Bouhazama, Soukaina Lamrak, Hamid Toufik	Phytochemical valorization of an asteraceae: Optimization of aqueous and organic extractions
CO41	Abdellatif Errabbani, Fatima Lamchouri, Mokhtar kadi, Hafida Bouhazama, Soukaina Lamrak, Hamid Toufik	Harnessing bioinformatics and artificial intelligence to investigate plant secondary metabolites and drug discovery
CO42	Mohammed El Fal, Walid Guerrab, Abderrazzak El Moutaouakil Ala Allah, Ahmed Talbaouid, El Mokhtar Essassi and Youssef Ramli	Synthesis and biological Activity of New Spiro[thiadiazole-allopurinol] Derivatives
CO43	Abdeslam Dakhama, Oussama Chedadi, Abdelilah Toughzaoui, Hajar El Ouarti, Kamal Laourdani, Abderrafie Derajou, Abdelkrim Ouammou, Kamal Moradi	Combined computational approaches to develop new anticancer drug candidates: 3D-QSAR, ADMET screening, molecular docking, and DFT investigation of pyrrole carboxamide-based derivatives
CO44	Er-rajy Mohammed, Menana El Hallaoui	Conception et évaluation de nouveaux dérivés triazoles comme inhibiteurs potentiels de la goutte

*Liste des Communications Orales en ligne (COL) de la 2^{ème} Edition du Workshop International
Matériaux, Modélisation & Applications (WIMMA'2 - 2025)*

<i>Session 3 en ligne</i> <i>Salle Informatique (I-3)</i>		
<i>Drug design: Modélisation moléculaire & Intelligence artificielle (IA)</i> <i>&</i> <i>Matériaux: Propriétés, Modélisation, Applications & Innovation</i>		
Références	Auteurs	Titres
COL45	Asmaa Bouabbadi, Mohamed Rbaa, Nora Elouhabi, Mohamed Harcharras	Experimental and theoretical studies on the protection of steel against corrosion by 0.5 M sulfuric acid H ₂ SO ₄ using new hydroxyquinoline-8 derivatives
COL46	Nora Elouhabi, Asmaa Bouabbadi, Chaymae Halioui, Nadia Timoudan, Hammadi El Harmouchi, Abdelkader Zarrouk, Mohamed Harcharras	Investigation of the Inhibitive Properties of SrCuP ₂ O ₇ Pyrophosphate for Carbon Steel Corrosion in Hydrochloric Acid Medium.
COL47	Ribag Khalil	Amélioration de la production d'hydrogène du carbure de silicium tétragonal (t-SiC) grâce à une contrainte de traction biaxiale et au pH
COL48	Soukaina Lamrak, Fatima Lamchouri, Hafida Bouhazama, Asmae Mahtal, Nacima Lachka, Hamid Toufik	Unveiling the Chemical Diversity of Retama sphaerocarpa : A Dual Hot–Cold and Aqueous–Organic Extraction Approach
COL49	Mohamed Aoulad Belayachi, Marouane El-Alouani, Issam Saber, Anouar El Magri, Marouane El-Alouani, Nordine Er-Rahmany, Khadija Dahmani, Fatima El Hajri, Galai Mouhsine, Shaim Abdelillah, Zakaria Benzekri, Said Boukhris, Rafa Almeer, Abdelkarim Chouikri	Étude de l'efficacité d'un inhibiteur à base de pyrazole pour la protection de l'acier doux en milieu acide HCl 1M : approche électrochimique et théorique
COL50	Walid Iken, Mouad Boutkbout Nait Moudou, Loubna Halil, Mouna Aamor, Soukaina Naciri, Mohamed Reda Chriyaa, Hayat EL Ouafy, Tarik EL Ouafy	Water–Gold (100) Interactions: Insights from LDA, PBE, and van der Waals Functionals.
COL51	H. Chafik, A. Hasnaoui	The structural and vibrational properties of Ag _x Ni _{100-x} (x = 60, 70, and 80) metallic glasses using molecular dynamics simulation
COL52	Douichi Oumayma, Znaki Jihane, Znaki Fatima Zahra, Khalid Said, Moustabchir Hassan, Ezzarfi Abdelouahid and ElKhattabi Souad	Évaluation Bibliographique et Simulation du Potentiel des Cellules Solaires Tandem Pérovskite–Silicium pour le Contexte Solaire Marocain
COL53	Sara Soussi, Oussama Gliti, Najwa Alaoui, Amar Habsaoui, My Abdelaziz El Alaoui	Virtual Screening and Machine Learning-Assisted Selection of Ligands Targeting a Protein Involved in Cervical Cancer
COL54	Soukaina Lamrak, Fatima Lamchouri, Hafida Bouhazama, Hanae Lamkadmi, Asmae Mahtal, Nacima Lachka, Hamid Toufik	Green Aqueous Extraction Reveals the Phytochemical Richness of Daucus carota

COL55	Magroud Merieme, Kacem Marieme, Essaddek Abderrahim, Dib Mustapha	Hydrothermal Synthesis of Copper Ferrite Encapsulated in Hydroxyapatite: Structural and Microstructural Study.
COL56	My slimane Slimani, Mustapha Aazza, Hamid Barkouch, Meryem Amar, Abdelaaziz Alioui, Ouafa Tahiri Alaoui, Si Mohamed Bouzzine , Mohamed Hamidi and Hammou Ahlafi	Bentonite and organobentonite nanocomposite for removing chromium species from aqueous solutions
COL57	Hamid Barkouch, My slimane Slimani, Meryem Amar, Sara Aghris, Bilal Chhaibi, Moulay Abderrahim El Mhammedi, Mohamed Hamidi, Ouafa Tahiri Alaoui	Electrochemical detection of flubendiamide insecticide using a bismuth doped TiO ₂ modified graphite electrode under UV irradiation



*Liste des Communications par Affiches de la 2^{ème} Edition du Workshop International
Matériaux, Modélisation & Applications (WIMMA'2 - 2025)*

<i>Session Posters</i>		
<i>Batiment des enseignants</i>		
<i>Drug design: Modélisation moléculaire & Intelligence artificielle (IA)</i> & <i>Matériaux: Propriétés, Modélisation, Applications & Innovation</i>		
Références	Auteurs	Titres
CA1	Oumaima Daouiar, Marieme Kacem, Essaddek Abderrahim, Mustapha Dib	Layered Double Hydroxides/ Biopolymers as multifunctional materials for Biomedical and Environmental Applications
CA2	Oumaima Sahab , Ayoub Lamtita , Bahija Mounir , Fathallaah Bazi	Étude de l'activité catalytique des phosphates en milieu aqueux pour la synthèse des composés hétérocycliques
CA3	Asmae Laksir, Marieme kacem, Mustapha Dib, Rachid Touzani, Aziz Boulouiz	Composites MOF/silice mésoporeuse pour la catalyse hétérogène
CA4	Asmae Laksir, Marieme kacem, Mustapha Dib, Rachid Touzani, Aziz Boulouiz	Élaboration et caractérisation de composites MOF/silice mésoporeuse pour la catalyse hétérogène du phénol en O-quinone
CA5	Fatin tagnaouti mounnani, Dina Moussaid, Karim Tanji, Mardi Lamyae, Mohammed Benjelloun, Abdellah Arrahli, Abdelali EL gaidoumi, Youssef Miyah, Abdelaziz Dra, Abdelhak Kherbeche, Aziz Chaouni Benabdallah	Persulfate activation by the Fe/TiO ₂ photocatalyst under visible-light irradiation for the removal of Crystal Violet dye
CA6	Mohamed Aoulad Belayachi, Marouane El-alouani, Khadija Dahmani, Anouar El Magri, Nordine Er-rahmany, Issam Saber, Fatima El hajri, Galai Mouhsine, Shaim Abdelillah, Zakaria Benzekri, Said Boukhris, Rafa Almeer, Abdelkarim Chaouiki	Étude intégrée, électrochimique, de surface et théorique, d'un dérivé de diazépine pour la protection anticorrosion de l'acier doux dans une solution d'HCl 1 M
CA7	Mohammed Benjelloun, Salma Ziane, Omar Boualam, Smail Manyani, Salma Ssouni, Souad El Alami, Fatin Tagnaouti Mounnani, Amal Taouda, Zineb Allame, Oumaima Ait Ali, Mohammed Mouchane, Ibtissam Bouabadi, Fatiha Mejbar, Rabia Bouslamti, Sanae Lairini, Youssef Miyah	Adsorption of ametryn, atrazine, 17 β -estradiol, bisphenol A, estrone, and hexazinone onto banana peel magnetic activated carbon
CA8	Fatima-Zahra Oulakhir, Salah Eddine Baalal, Nadir Rihanni, Iatimad Akhrif, Mostapha El Jai	Earthen Materials for 3D Concrete Printing: Characterization and Printability
CA9	Said Bajji, Mustapha Shail, Ahmed Saba, Youssef Naimi	Valorization of Artisanal Waste in the Production of Eco-Friendly Clay Bricks: Application of Wood Ash and Pottery Residues
CA10	Souad El alami , Hanane Ibaghlin, Omar Boualam, Mohammed Benjelloun, Raja Belaabed, Hakima El knidri, Youssef Miyah, Abdellah Addaou, Ali Laajeb	From Tanner Waste to Advanced Biochar: Process Optimization for Environmental Applications

CA11	Dina Moussaid, Fatin Tagnaouti Moumnani, Abdelhak Kherbeche	Efficient polyphenols compounds photodegradation from olive mill wastewater using solar-light-driven β -Cu ₂ V ₂ O ₇ and Cu ₃ V ₂ O ₈ nanoparticles
CA12	Kawtar Oubella , Fatna Eddaqaq , Fathallaah Bazi , Bahija Mounir	Valorisation de biomatériaux naturels (Moringa oleifera, Quercus robur, Opuntia ficus-indica) comme bio-coagulants verts pour le traitement des eaux industrielles
CA13	Khadija Bouabid, Fatima Lamchouri, Souad Senhaji, Nacima Lachkar, Mohamed Boulfia, Taoufik Akabli , Abdelouahab Zalaghi, Hamid Toufik	From chemical composition to biological activity of Moroccan medicinal plants: A SAR approach focused on secondary metabolite
CA14	Mohamed Amine El Maimouni, Soukaina El Amrani, Zineb Allame, Rabia Bouslamti, Sanae Lairini, Abdelhakim El Ouali Lalami	Aroma Profile and Antioxidant Activity of Essential Oil Mixtures of <i>Thymus serpyllum</i> and <i>Thymus zygis</i> Combined with Two Mentha Species (<i>Mentha piperita</i> and <i>Mentha pulegium</i>)
CA15	Nacima Lachkar, Fatima Lamchouri, Abdelouahab Zalaghi, Khadija Bouabid, Souad Senhaji, Mohamed Boulfia, Taoufik Akabli, Hamid Toufik	The traditional uses and socio-economic value of the palm heart of <i>Chamaerops humilis</i> in the Taza Region
CA16	Souad Senhaji, Fatima Lamchouri, Mohamed Boulfia, Khadija Bouabid, Nacima Lachkar, Taoufik Akabli, Abdelouahab Zalaghi, Hamid Toufik	Phytochemical composition of the seeds of <i>Peganum harmala</i> L.
CA17	Zineb Allame, Rachid Amaich, Abdelhakim El Ouali Lalami, Soukaina Amrani, Mohammed Amine El Maimouni, Mohammed Benjelloun, Sanae Lairini	Evaluation of bioactive molecules against <i>Staphylococcus aureus</i> and <i>Escherichia coli</i>
CA18	Mohamed Boulfia, Fatima Lamchouri, Souad Senhaji, Nacima Lachkar, Khadija Bouabid, Abdelouahab Zalaghi, Akabli Taoufik, Hamid Toufik	Mineral composition and in vitro antioxidant activities of aqueous and organic extracts of <i>Leopoldia comosa</i> bulbs
CA19	Hassan Ouhazza, Moulay Abdelaziz El Alaoui, Sara Soussi, Ahmed Elabid, Amar Habsaoui and Said Bouzakraoui	<i>In silico</i> design of benzimidazolone-based compounds as potential anti-HIV-1 agents targeting reverse transcriptase (RT)
CA20	Mohammed Elhoudi	Customized Recoverable Magnetic Hybrid Adsorbent for Enhanced Cr(VI) Elimination: Theoretical Framework



Biographies des Conférenciers



Biography Prof. Juan Ignacio Beltrán

GFMC, Universidad Complutense de Madrid, 28040

Madrid, Spain.

juanbelt@ucm.es

Juan Ignacio Beltrán, PhD, Associate Professor at the Complutense University of Madrid (UCM) is an atomistic theoretician with wide experience in material science in the use of first principles simulation to interpret the electronic and magnetic properties of inorganic materials, such as oxides. He obtained his BSc in (2000) and PhD (2007) in Physics at the Autonomous University of Madrid. Some highlights about his research experience are the study of heterostructures for novel application in electronics, non-conventional d0 magnetism, and organic structures for light emission. Currently, his main lines of research include the use of atomistic techniques as forward models to predict oxide heterostructures properties. He coauthored 40 publications with over 2000 citations (h-index = 21), 5 invited talks in congresses, meetings and seminars and 1 PhD student supervised. He has been PI of one project allotted from the Spanish Ministry of Science and Universities and nine projects allotted with computational resources in Spanish supercomputing facilities, including the Spanish performance reference Marenostrum. Actually, he is teaching Physics, and Solid State Physics subjects for Material Engineers in the UCM.



Pr. Taoufik Akabli

Institut Supérieur des Professions Infirmières et Techniques de Santé (ISPIT) - Taza, Ministère de la Santé et de la Protection Sociale.

&

Laboratoire MPCAE – Équipe « Matériaux, Substances Naturelles, Environnement et Modélisation » (MSNEM), FPT, USMBA.

taoufik.akabli@usmba.ac.ma

Pr. Taoufik Akabli, titulaire d'un doctorat en pharmacologie et pharmacochimie, est enseignant-chercheur à l'Institut Supérieur des Professions Infirmières et Techniques de Santé (ISPITS) de Taza – Maroc. Il a par ailleurs exercé en tant qu'infirmier diplômé d'état pendant 12 ans au ministère de la santé et de la protection sociale où il assurait des responsabilités d'infirmier chef, la gestion de la pharmacie, la participation aux programmes de santé publique et l'encadrement des étudiants. Son domaine de compétence est axé sur la découverte de médicaments assistée par ordinateur et la modélisation moléculaire.

Ses travaux de recherches portent sur la conception et l'optimisation de molécules bioactives, notamment les alcaloïdes β -carbolines et divers produits naturels à potentiel anticancéreux, en combinant des approches expérimentales et *in silico* telles que la modélisation QSAR, le docking moléculaire, les simulations de dynamique moléculaire et la prédiction ADME/Tox. Il s'oriente vers l'intégration de l'intelligence artificielle dans le développement pharmaceutique. Auteur et co-auteur de plusieurs publications scientifiques internationales dans des revues indexées et impactées et plusieurs communications orales et par affiches dans des manifestations scientifiques à caractères nationaux et internationaux.

Dans le volet académique et pédagogique, il enseigne la pharmacologie, la microbiologie au niveau de l'ISPITS et contribue activement à la promotion de la recherche scientifique et de l'innovation numérique en santé. Il assure en outre la coordination de l'option Infirmier en néonatalogie et pédiatrie, où il veille à la qualité de la formation et à l'encadrement pédagogique des étudiants, en favorisant une approche intégrée entre théorie et pratique.

Il occupe depuis juin 2024 la fonction de secrétaire du bureau local du Syndicat de l'Enseignement Supérieur à l'ISPITS de Taza.



Pr. Souad El Khattabi

Ecole Nationale des Sciences Appliquées (ENSA) de Fès
Université Sidi Mohamed Ben Abdellah (USMBA)

Souad.elkhatabi@usmba.ac

Pr. Souad El Khattabi, titulaire d'un doctorat en chimie computationnelle à l'Université Sidi Mohammad Ben Abdellah de Fès, est Enseignante-Chercheuse à l'Ecole Nationale des Sciences Appliquées de Fès.

Pr El Khattabi mène ses recherches au sein du Laboratoire Ingénierie des Systèmes et Applications (LISA - ENSA), sur des thématiques variées : chimie computationnelle, modélisation moléculaire, drug design, cellules solaires à pérovskite et à colorants.

Ses recherches scientifiques ont donné lieu à de nombreuses publications dans des revues internationales indexées, ainsi, qu'à plusieurs communications dans des conférences scientifiques nationales et internationales. Elle a également encadré, et encadre toujours, plusieurs mémoires de master et thèses de doctorat.



Dr Abdelouahab ZALAGHI

Ministère de l'Éducation Nationale, du Préscolaire & des Sports,
Direction Provinciale de l'Éducation Nationale à Taza (MENPS-DT)
&
Laboratoire MPCAE – Équipe « Matériaux, Substances Naturelles,
Environnement et Modélisation » (MSNEM), FPT, USMBA.

dr.a.zalaghi@gmail.com

Dr. Abdelouahab ZALAGHI, titulaire d'un Doctorat en Biologie : Microbiologie et Biotechnologie Environnementale, est un chercheur et expert en management QHSE (Qualité, Hygiène, Sécurité, Environnement), en valorisation des matériaux naturels et en biotechnologie environnementale appliquée. Il compte plus de dix-sept années d'expérience dans la recherche scientifique, la gestion environnementale et la coordination de programmes de durabilité, de sécurité et qualité. Il a contribué dans différentes régions du Maroc, notamment à Essaouira, Agadir et Taza, à la conception et à la mise en œuvre de projets environnementaux structurants axés sur la gestion intégrée des déchets, la réhabilitation de décharges contrôlées, et la réduction des impacts environnementaux à travers l'application de systèmes de management QHSE. Ses expériences de terrain ont consolidé sa vision pragmatique et durable de la transition écologique au service des territoires.

Ses travaux de recherche s'articulent autour de la dépollution, de la valorisation des ressources naturelles locales et de la modélisation environnementale assistée par intelligence artificielle. Il s'intéresse particulièrement à l'optimisation des procédés de traitement des lixiviats et à la préservation de la biodiversité à travers des approches éco-innovantes. Il est auteur et co-auteur de nombreuses publications scientifiques dans des revues indexées internationales, il a également participé à plusieurs conférences et congrès nationaux et internationaux sur les thématiques de la durabilité, de la sécurité environnementale et de la gestion responsable des ressources.

Reconnu pour son approche interdisciplinaire alliant sciences, ingénierie et management environnemental, le Dr ZALAGHI s'investit activement dans la formation, la recherche appliquée et la sensibilisation scientifique. Il œuvre à promouvoir une culture de l'innovation et de la durabilité au sein des institutions académiques et territoriales, contribuant ainsi à la consolidation d'un modèle de développement durable adapté aux réalités écologiques et socio-économiques du Maroc.

The logo for WIMMA'2 is a circular emblem. The top half of the circle is light blue and contains the text 'WORKSHOP INTERNATIONAL' in white. The bottom half is light green and contains the text 'MODÉLISATION & APPLICATIONS' in white. In the center of the circle, there is a molecular structure diagram with blue and red spheres. To the left of the center, there is a stylized wind turbine. The numbers '20' and '25' are placed on the left and right sides of the circle respectively. Below the circle, the text 'WIMMA'2' is written in a large, bold, blue font.

Résumés des Conférences

Ab-initio modelization of perovskite heterostructures: tuning properties by field and defect control

Prof. Juan Ignacio Beltrán

GFMC, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain.

juanbelt@ucm.es

Oxide heterostructures provide a versatile platform for engineering novel electronic and magnetic phases not found in their bulk constituents. This work highlights the pivotal role of advanced simulations in unveiling the fundamental mechanisms behind such emergent phenomena [1], focusing on two distinct systems. In the first study, we experimentally realize a multiferroic tunnel junction with $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{BaTiO}_3/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ heterostructure [2], where a confined head-to-head ferroelectric domain wall hosts a quasi-two-dimensional electron gas. Crucially, first-principles simulations provide the decisive insight, revealing that oxygen vacancies stabilize this conductive channel, which exhibits discrete quantum-well states. These simulations directly demonstrate that resonant tunneling through these confined states is the origin of the observed strong quantum oscillations in conductance, offering a design principle for active nanoelectronic elements based on engineered domain walls. In a second, complementary study, we employ ab-initio simulations to investigate the electric-field control of magnetism in ultrathin SrIrO_3 films on SrTiO_3 [3]. The calculations reveal an asymmetric electric-field effect, driving an abrupt transition from an antiferromagnetic insulator to a paramagnetic metal. The simulations directly link this transition to electric-field-induced structural modifications in the IrO_6 octahedra, which modulate the Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Collectively, these works underscore how computational modeling is indispensable for deciphering the complex interplay between lattice, charge, and spin in oxide heterostructures, guiding the interpretation of experiments and the design of future quantum devices.

[1] H. Watanabe, T. Shirakawa, and S. Yunoki, Phys. Rev. Lett. 105, 216410 (2010)

[2] G. Sanchez-Santolino, J. Tornos, D. Hernandez-Martin, J.I. Beltran et al. Nature Nanotechnology, 12 (7), 655 (2017)

[3] F. Gallego, J. Tornos, J.I. Beltran et al, Communications Materials, 4 (1), 36 (2023)

Drug discovery in the digital era: the strategic role of molecular modelling and artificial intelligence

Taoufik Akabli^{a,b}, Hamid Toufik^a et Fatima Lamchouri^a

^a MPCA Laboratory - Materials, Natural Substances, Environment and Modeling Team (MSNEM), Polydisciplinary Faculty of Taza (FPT), Sidi Mohamed Ben Abdellah University (USMBA) of Fez, B.P.: 1223 Taza-Gare. Taza, Morocco.

^b Higher Institute of Nursing Professions and Health Techniques, Ministry of Health and Social Protection, Ourida quarter, Taza bas, Taza, Morocco.

taoufik.akabli@usmba.ac.ma - hamid.toufik@usmba.ac.ma - fatima.lamchouri@usmba.ac.ma

Molecular modelling has transformed drug discovery by offering deeper insights into structure-activity relationships and the interactions between molecules and their biological targets. This has been further reinforced by the integration of artificial intelligence (AI), which enables large data sets to be exploited in order to accurately predict the physicochemical, pharmacokinetic, and toxicological properties of drug candidates. This combination of technologies is an essential tool for the rational design of new treatments, accelerating the development of innovative drugs while reducing costs and time to market.

In this lecture, we will present the main computer-aided drug design (CADD) methods, including structure-based drug design (SBDD) techniques such as protein structure prediction based on homology, molecular docking and molecular dynamics. We will also discuss ligand-based drug design (LBDD) approaches, including QSAR models, pharmacophores, and molecular similarity studies. Finally, we will explore how AI methods, including machine learning, deep learning, and generative AI, can contribute to big data analysis and the prediction of pharmacological properties, as well as the generation of new chemical structures.

Keywords: CADD, Big data, AI, Molecular modelling, Drug candidates

Modélisation moléculaire pour une meilleure compréhension des matériaux

Pr. Souad El Khattabi

Laboratoire d'Ingénierie, Systèmes et Applications (LISA)

Ecole Nationale des Sciences Appliquées (ENSA) de Fès

Université Sidi Mohamed Ben Abdellah (USMBA)

Souad.elkhatabi@usmba.ac

La modélisation moléculaire des matériaux est une approche numérique qui permet de comprendre et d'explorer le comportement des atomes et des molécules constituant des matériaux dans le but de prévoir leurs propriétés physico-chimiques : structure chimique, réactivité chimique, conductivité, dureté, etc. Elle complète les méthodes expérimentales souvent difficiles, coûteuses et longues. Son développement a été rendu possible, particulièrement, grâce à l'essor des outils numériques et aux avancées des méthodes de chimie computationnelle : Méthodes ab initio, Théorie de la Fonctionnelle de Densité, Dynamique moléculaire (DM), etc.

Par ailleurs, dans un contexte de respect des objectifs du développement durable, notamment l'optimisation de l'énergie, la réduction de la consommation de matières premières et la lutte contre la pollution atmosphérique, la modélisation moléculaire s'impose comme un outil essentiel pour concevoir des matériaux avec des procédés plus propres, plus efficaces et plus durables.

De nos jours, la modélisation moléculaire des matériaux s'impose comme un outil indispensable pour le développement de l'innovation dans divers domaines, allant des nanotechnologies au secteur médical, en passant par l'énergie et l'aéronautique/spatial.

Mots clés : Modélisation moléculaire, Chimie computationnelle, Propriétés des matériaux, Développement durable, Innovation technologique.

Valorisation des matériaux naturels et intelligence artificielle pour une gestion durable des ressources naturelles

Abdelouahab Zalaghi, Fatima Lamchouri & Hamid Toufik

Laboratoire MPCAE – Équipe « Matériaux, Substances Naturelles, Environnement et Modélisation »
(MSNEM), Faculté Polydisciplinaire de Taza (FPT), Université Sidi Mohamed Ben Abdellah
(USMBA) de Fès, B.P. 1223 Taza-Gare, Taza, Maroc.

dr.a.zalaghi@gmail.com - fatima.lamchouri@usmba.ac.ma - hamid.toufik@usmba.ac.ma

La valorisation des matériaux naturels constitue aujourd'hui une voie stratégique pour la protection et la gestion durable des ressources naturelles. Dans un contexte marqué par la raréfaction des ressources hydriques, la dégradation des sols et l'accumulation des déchets solides, le recours à des matériaux locaux, biosourcés ou issus de résidus industriels valorisables, représente une alternative éco-innovante conciliant performance technique et durabilité environnementale.

Dans cette conférence, nous allons aborder l'importance de l'adoption d'une approche intégrée QHSE (Qualité, Hygiène, Sécurité, Environnement), enrichie par les apports récents de l'intelligence artificielle (IA) pour la modélisation, l'optimisation et la prédiction des performances environnementales. En effet, l'utilisation d'outils d'apprentissage automatique (machine learning) permet de mieux comprendre les interactions complexes entre les paramètres physico-chimiques, biologiques et opérationnels, et d'anticiper les scénarios de dépollution les plus efficaces. Des exemples concrets de valorisation des matériaux naturels (argiles, roches poreuses, biomasses végétales, sous-produits industriels) dans le traitement des lixiviats et la réduction des impacts écologiques des décharges publiques au Maroc seront présentés et discutés. L'intégration de modèles prédictifs basés sur l'IA favorise l'optimisation des procédés, la réduction des coûts et l'amélioration continue des performances QHSE.

En conclusion, la synergie entre la valorisation des matériaux naturels et l'intelligence artificielle ouvre de nouvelles perspectives pour la gestion intelligente et durable des ressources naturelles, tout en consolidant la transition vers une économie circulaire et résiliente.

Mots-clés :

Matériaux naturels ; Valorisation ; QHSE ; Intelligence artificielle ; Modélisation prédictive ; Dépollution ; Développement durable ; Économie circulaire.

الكلية متعددة التخصصات تازة
+0530.11 +081531151 +0.7.
FACULTÉ POLYDISCIPLINAIRE DE TAZA



جامعة سيدي محمد بن عبد الله بفاس
+053011 0815 31151 01 7.
UNIVERSITÉ SIDI MOHAMED BEN ABDELLAH DE FES



2^{ème} Édition du Workshop International Matériaux, Modélisation et Application (WIMMA'2-2025)

Coordonnateurs :

Pr. Fatima LAMCHOURI - Pr. Redouan EL-KHALFAOUI - Pr. Hamid TOUFIK

Université Sidi Mohamed Ben Abdellah de Fès

Faculté Polydisciplinaire de Taza Route d'Oujda, B.P. 1223 Taza-Gare, Taza, Maroc.

Equipe Matériaux, Substances Naturelles, Environnement et Modélisation (MSNEM)

- Laboratoire MPCAE

Tel: +212 5 35 21 19 76 / +212 5 35 21 19 77

Fax: +212 5 35 21 19 78

Email : redouan.elkhalfaoui@usmba.ac.ma

www.fpt.usmba.ac.ma