



Proposition d'un sujet de stage de Master de Recherche en Physique*

Titre du Stage : Amarrage moléculaire, étude des propriétés structurales et spectroscopiques d'un composé hybride de classe I.

Encadrant(s) : Noureddine ISSAOUI **Email :** issaoui_noureddine@yahoo.fr **Etablissement :** ISIMM

Structure de Recherche : Laboratoire de Physique Quantique et Statistique LPQS

Le Stage sera suivi par une thèse : oui

Résumé du travail :

Dans ce travail, on se propose de :

- Faire une étude bibliographique approfondie sur les matériaux hybrides de classe I ainsi que sur les méthodes du calcul ab-initio, en particulier la DFT.
- Etudier expérimentaux et théoriques des propriétés structurales.
- Etudier les propriétés spectroscopiques des composés en question en se référant à des mesures expérimentales.
- Etudier l'effet des interactions non covalente sur la stabilité des édifices moléculaires, en se basant sur l'analyse AIM, RDG, ELF, LOL.....
- Simuler les activités biologiques des matériaux hybrides étudiés en effectuant un calcul dynamique moléculaire (docking moléculaire).
-

*NB :

- L'étudiant doit contacter l'encadrant pour plus d'information.
- L'étudiant ne peut commencer son stage qu'après accord de la commission du Master (signature de la fiche du stage par les différentes parties).