



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

Titre du Stage : Modélisation de l'interaction entre une nucléo-base et quelques ions métalliques

Encadrant(s) : Chedli GHANMI **Email :** ghanmigfsm@gmail.com **Etablissement :** Institut Supérieur d'Informatique de Mahdia

Structure de Recherche : Laboratoire des Interfaces et des Matériaux Avancés (LIMA)

Le Stage sera suivi par une thèse : oui

Résumé du travail :

Dans ce master on se propose de :

1. Faire une généralité sur les méthodes de calcul de la chimie quantique ; DFT, ab-initio, méthodes semi-empiriques ...
2. Décrire les interactions existant au sein d'un assemblage atomique et/ou moléculaire ; liaison de van Der Walls, liaison hydrogène, ...
3. Étudier les propriétés structurales, spectroscopiques et topologiques d'une nucléobase en interaction avec des ions métalliques.
4. Étudier la stabilité et la géométrie d'une nucléobase en interaction avec des ions métalliques,
5. Étudier les effets des interactions sur les propriétés structurales, électroniques et vibrationnelles de la nucléobase mis en jeux.

*NB :

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