



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

**Titre du Stage :** Modélisation au sein de la DFT des propriétés optoélectroniques des matériaux organiques originaux à faible gap électronique

**Encadrant(s) :** AYACHI Sahbi **Email :** ayachi\_sahbi@yahoo.fr **Etablissement :** Institut Supérieur de Biotechnologie de Monastir

**Structure de Recherche :** Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux (LR01ES19)

**Le Stage sera suivi par une thèse :** oui

### Résumé du travail :

Le projet de master propose la modélisation de nouveaux matériaux organiques à faible gap électronique présentant un intérêt à la fois fondamental et appliqué. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) sera utilisée pour calculer et analyser les propriétés électroniques et optiques des matériaux étudiés. Une description détaillée de la géométrie et de la structure électronique sera abordée afin de comprendre la corrélation structure-propriétés des matériaux étudiés. Dans cette optique, le travail proposé consistera en :

- 1- Une étude bibliographique sur les matériaux organiques et leurs applications.
- 2- La conception et la modélisation des matériaux organiques originaux pour l'électronique organique.

---

### \*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).