Université de Monastir
Faculté des Sciences
Département de Physique

stage de Master de Recherche en Physique
Parcours:
MNS, PQ

sujet: Calculs ab initio de structures électroniques pour un meilleur design de matériaux organiques pour capteurs chimiques

Proposé par: Rafik BEN CHAABANE
Contact(email): rafik.benchaabane@fsm.rnu.tn
Structure de recherche: LIMA

Directeur de la structure de recherche: MUSTAPHA MAJDOUB
Le sujet sera suivi par une thèse: Oui

Résumé:
Notre groupe a une activité importante autour des nanomatériaux organiques et inorganiques de type bases de Schiff et semiconducteurs II-VI. Il a développé des outils théoriques efficaces pour traiter ces nanostructures dont la taille varie de 1 à 15 nm. Les mêmes types d'approches sont utilisés pour étudier les et les nanostructures organiques, en particulier leurs propriétés de transport et de captation. Dans le domaine de l'électronique moléculaire, notre objectif principal est l'étude théorique et la simulation de transfert d'électron dans les molécules ou dans des monocouches moléculaires.
Durant ce Mastère l'étudiant aura à s'initier sur les domaines suivants :
- Les structures géométriques de ces molécules ne sont pas connues actuellement. Une recherche de conformation par une méthode de dynamique moléculaire couplée à une procédure d'optimisation de géométrie.
- Les géométries obtenues dans la première étape seront utilisées pour calculer les spectres IR et les spectres UV/Visible en utilisant la méthode de la "Time-Dependant Density functionnal Theory" (TDDFT). Le calcul de ces propriétés permettra de caractériser pleinement ces molécules.
- Les résultats obtenus seront utiles pour comprendre les phénomènes physico-chimiques qui entrent en jeux lors des processus de captations des capteurs chimiques.

Références: