Université de Monastir
Faculté des Sciences
Département de Physique

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

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

Proposé par: Noureddine ISSAOUI
Contact(email): issaoui_noureddine@yahoo.fr

Structure de recherche: Laboratoire de physique quantique et statistique

Directeur de la structure de recherche: Gazzah Mohamed Hichem

Le sujet sera suivi par une thèse: Oui

Résumé:

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).
- .....

Références: NA