



Université

Mohamed Khider - BISKRA  
FSESNV - Département des sciences  
de la matière

FICHE DE PROPOSITION DE SUJET DE MASTER

Nom :

Prénom :

Filière :

Courriel :

Titre :

**Description du sujet :**

Équipe de recherche : Modélisation multi-échelle des systèmes chimiques.

Les propriétés des complexes de métaux de transition tels que le platine, l'iridium et le ruthénium sont à l'origine de capacités d'émission remarquables faisant de ces composés des candidats prometteurs pour l'élaboration de matériaux électroluminescents. Ces derniers sont notamment utilisés dans plusieurs domaines à savoir la production de lumière au sein de diodes électroluminescentes. La lumière émise est modulée en fonction de la nature du ligand mis en jeu. Dans ce mémoire de Master, on fait appel à des calculs théoriques en utilisant les méthodes basées essentiellement sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT/TD-DFT) pour interpréter les propriétés électroniques et spectroscopiques d'une série de ces complexes en fonction de la nature des ligands.

Mots clés (cinq maxim.) :

**Note** Une fois cette fiche dûment remplie, veuillez l'envoyer par courriel à l'administrateur de site web du département à l'adresse : [samir.kenouche@univ-biskra.dz](mailto:samir.kenouche@univ-biskra.dz) .

Fait le :

ATTENTION! n'oubliez pas d'enregistrer le formulaire une fois rempli