<u>Titre du projet post-doc:</u> Conception de nanomatériaux à base de phosphore pour la production d'énergie propre et la santé par modélisation atomistique

<u>Laboratoire :</u> Laboratoire de la Matière Condensée et des Nanosciences

<u>Résumé:</u>

Le but général de ce projet est d'établir une méthodologie multi-échelle fiable et efficace pour calculer de façon précise les propriétés structurales, mécaniques, électroniques et optiques de nanomatériaux à base de phosphore. Nous visons à concevoir de nouveaux nanomatériaux à base de phosphore ayant des propriétés électroniques et optiques optimisées en vue d'applications comme le photovoltaïque, le stockage d'énergie, les capteurs ou le bio-médical[1,2].

Le développement récent de méthodes avancées de modélisation atomistique prenant en compte les forces de van der Waals permet aujourd'hui de : (i) déterminer les propriétés structurales, électroniques et optiques de matériaux connus avec précision ; (ii) prédire de nouvelles structures de matériaux possédant des caractéristiques intéressantes, en jouant notamment sur la dimensionnalité [3].

En combinant les meilleures fonctionnalités dans les codes Vienna ab initio Simulation Package (VASP) [4] et Quantum Espresso[5], dans ce projet, nous compterons :

- Concevoir et calculer de façon précise les propriétés structurales de formulations de matériaux innovantes.
- Calculer les propriétés mécaniques, électroniques et optiques des nouvelles formulations développées.

Concernant les propriétés électroniques, un large choix de méthodes pourra être utilisé pour déterminer les densités d'état (DOS) et les structures de bandes des matériaux étudiés: PBE, HSE, GW … Un compromis précision / temps de calcul sera recherché. Pour déterminer les propriétés optiques, nous utiliserons l'équation de Bethe-Salpether.

Références:

[1] D. Rocca, A. Abboud, G. Vaitheeswaran, S. Lebègue, Two-dimensional silicon and carbon monochalcogenides with the structure of phosphorene, Beilstein J.of Nanotechnology. 8 (2017) 1338.

[2] J. Srour, M. Badawi, F. El Haj Hassan, A. V. Postnikov, physica status solidi b 253 (2016) 1472.

[3] Tarek Ayadi, Lamjed Debbichi, Moncef Said and Sebastien Lebegue, An ab initio study of the electronic structure of indium and gallium chalcogenides bilayers, J. Chem. Phys, 147 (2017) 114701.

[4] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **48**, 13115 (1993).

[5] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. B. Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 465901 (2017).

<u>Titre du projet post-doc:</u> Nouvelle génération de cellules photovoltaïques par l'insertion de petites molécules dans des structures à base de pérovskites hybrides

<u>Laboratoire :</u> Laboratoire de la Matière Condensée et des Nanosciences

<u>Résumé:</u>

Les pérovskites suscitent à nouveau un engouement extraordinaire, cette fois dans le domaine du photovoltaïque avec des performances égalées a ceux du silicium. En effet, les matériaux de type pérovskites hybrides de structure ABX_3 battent des records de performance de l'ordre de 24.2%. Ceci est dû à la facilité de mise en œuvre, la faible épaisseur, la stabilité chimique et la nature des éléments qu'ils contiennent. Un des paramètres qui peut influencer le rendement de ces cellules est la nature de la couche de transport des électrons (ETL) et celle de transport des trous (HTL). Le projet a pour but d'insérer tout d'abord la molécule NO_2BMN dans les cellules solaires pérovskites de structure: ITO/PEDOT: PSS/$CH_3NH_3PbBr_3$/PCBM/Al et ITO/PEDOT: PSS/$CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$/PCBM /Al. L'insertion de la molécule sera entre la couche de pérovskite et la couche de transport des électrons. L'effet de l'épaisseur de la couche de BMN ainsi que celui du type de X-BMN (où X est un substitué qui peut être un Cl, CN, H..) seront mis en évidence. Le développement de cette couche va donner accès à des performances et une stabilité bien optimisées. Les structures à réaliser seront optimisées par des caractérisations morphologiques, optiques et structurales via AFM, MEB, UV-vis, Pl et XRD. Après l'optimisation de la couche pérovskite, la couche de la molécule superélectrophiles sera déposée au-dessus du film pérovskite par la méthode spin coating. L'effet de son épaisseur sera mis en évidence par des caractérisations optiques, morphologiques et structurales. Après optimisation de la couche X-BMN, une structure de type ITO/PEDOT:PSS/pérovskite/X-BMN/PCBM/Al sera réalisée. L'étude des propriétés électriques et diélectriques des cellules élaborées seront menées en utilisant un simulateur solaire et un analyseur d'impédances.

<u>Titre du projet post-doc:</u> Etude des propriétés biologiques et physiques de molécules extraites de plantes médicinales originaires de Tunisie

<u>Laboratoire:</u> Chimie hétérocyclique, produits naturels et réactivité

<u>Résumé:</u>

L'intérêt général de ce sujet est la contribution à la valorisation de notre biodiversité afin de découvrir des substances naturelles à haute valeur ajoutée dans les domaines médicinal et physique.

Dans cette optique, un de nos objectifs est de justifier de manière scientifique l'utilisation en médecine traditionnelle de certaines plantes médicinales en allant de la plante jusqu'à la molécule pure bioactive qu'on modifiera chimiquement et/ou biologiquement afin de comprendre son mode d'action et améliorer ses activités biologiques. D'autre part, plusieurs matières végétales naturelles étaient la source de pas mal de produits à haute valeur ajoutés pour des applications physiques tels que semi-conducteurs, nanoparticules et autres. Les plantes *Tipuana tipu* et *Cardopatium amethystinum* ont été sélectionnées pour être utilisées comme matières végétales de départ dans le cadre de ce projet.

Pour ce faire, des extractions par des solvants de polarité croissante seront envisagées, suivies d'un criblage biologique permettant de chercher quelques extraits bioactifs. Dans un deuxième temps, les extraits ayant montré une activité significative, seront soumis à une étude chromatographique en vue d'isoler des produits naturels purs susceptibles d'être biologiquement actifs. Les structures des différents produits isolés seront élucidées par les techniques spectroscopiques (RMN 1D et 2D, IR, UV et SMHR). L'étude de la relation structure -activité est visée *via* la synthèse de quelques analogues structuraux.

Nous visons, aussi, chercher des composés naturels à structures polyconjuguées tels que des flavonoïdes, susceptibles d'avoir des propriétés et des intérêts physiques importantes et des applications en micro et nanotechnologies : matériaux semi-conducteurs, nanocapteurs de gaz, nanoparticules et autres.

<u>Titre du projet post-doc</u>: Physico-chimie et Modélisation des Polyélectrolytes

<u>Laboratoire :</u> Laboratoire de Physique Quantique et Statistique : LR18ES18

<u>Résumé:</u>

Les polyélectrolytes jouent un rôle important dans la nature (toute cellule est constituée d'eau, d'ions et de polyélectrolytes), ainsi que dans différents domaines d'application : Résines ; Cosmétiques ; Gels ; Transformation de l'énergie chimique en énergie mécanique, Contrôle des pores des membranes ou Contraction des fibres musculaires ; etc. Ils sont aussi caractérisés par des propriétés de transport et des effets viscoélectriques spécifiques.

Cependant, contrairement aux électrolytes qui obéissent à des lois limites et étendues universelles, la physicochimie des polyélectrolytes connaît plutôt un début de théorisation sans pourtant aboutir à un paradigme général. La différence entre les deux matériaux réside dans la forte interdépendance entre plusieurs facteurs et processus spécifiques : La configuration des chaînes, la condensation des contres ions, l'écrantage ionique, le caractère hydrophobe de la chaine, le rôle du solvant, les effets spécifiques ioniques selon la série Hofmeister, ainsi que les processus de friction hydrodynamique, électrophorétique, ionique et diélectrique qui contrôlent la mobilité des polyions.

L'objectif du projet consiste donc à parfaire la modélisation de cette interdépendance, moyennant des techniques de calculs numériques et semi analytiques.

<u>Titre du projet post-doc:</u> La croissance de couches minces et de nanostructures par la technique d'Epitaxie par Jet Moléculaire

<u>Laboratoire :</u> Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques

<u>Résumé:</u>

Pour arriver à augmenter la production du banc d'épitaxie par jet moléculaire on vise l'optimisation de l'amélioration du rendement afin de répondre aux besoins incessants à l'échelle locale, nationale et internationale des chercheurs travaillant sur les structures électroniques à base de semiconducteurs. Il est impératif d'avoir un personnel qualifié disponible dans la salle pour contribuer au fonctionnement de la machine.

Un docteur ayant préparé sa thèse sur le bâti de croissance peut facilement acquérir des compétences avec une technicité accrue pour prendre en charge le fonctionnement intégral du bâti de croissance. La maîtrise des différentes étapes tel que l'introduction des échantillons, la préparation du bâti, le contrôle in situ de la démarche de croissance ainsi que la maitrise des différents modes de croissance pour être capable d'élaborer des couches minces ou des nanostructures auto organisées et reproductibles :

- Le mode Volmer-Weber correspond à une croissance en ˆılots. Dans ce cas, les atomes déposés sont plus fortement liés entre eux qu'avec le substrat.
- Dans une croissance de type Frank-van der Merwe, l'énergie des atomes déposés est minimisée lorsque le substrat est entièrement couvert. Dans ce cas, le dépôt a tendance à se faire couche par couche, à condition que les adatomes diffusent assez vite à la surface pour s'incorporer aux bords d'ilots.
- Le dernier mode de croissance dit de Stranski Krastanov (SK) est un mode intermédiaire qui apparait le plus souvent dans le cas d'une croissance hétéroépitaxiale. Un faible d´désaccord de paramètre de maille entre le matériau épitaxié et le substrat induit une contrainte dans la couche déposée épitaxiée. La croissance est d'abord bidimensionnelle et se fait monocouche par monocouche, entrainant une augmentation de cette contrainte.

<u>Titre du projet post-doc:</u> Valorisation des eaux usées traitées d'une industrie textile

<u>Laboratoire:</u> Unité de recherche Chimie Appliquée & Environnement (UR13ES63)

<u>Résumé:</u>

La Tunisie souffre actuellement d'un stress hydrique et la part annuelle d'eau par personne ne dépasse pas 470 m3. Les ressources en eau dans notre pays, très modestes et subissant largement les contraintes du climat, sont aussi sous le poids d'une forte pression anthropique.

L'industrie textile, grand consommateur d'eau et producteur d'effluents excessivement chargés en polluants (colorants, sels, tensioactifs…), se trouve devant l'obligation du traitement de ses rejets et leur valorisation face à la pénurie de l'eau et aux législations environnementales de plus en plus sévères.

Dans ce cadre se situe ce projet qui consiste à réutiliser les eaux usées traitées produites d'une industrie textile dans les procédés d'ennoblissement textile (teinture et lavage). Ce projet se déroulera dans une industrie textile spécialisée dans la teinture et le lavage et produisant plus de 1000 m3 d'eau usées quotidiennement. Les eaux usées issues de ces opérations sont collectées avant de subir un traitement conventionnel par voie biologique pour être déversées dans le réseau d'assainissement.

Cette étude s'étend sur deux grands volets; Le premier est consacré au traitement tertiaire des effluents produits par l'industrie textile a fin d'améliorer leur qualité en fonction des exigences des opérations visées par la réutilisation. Les procédés de traitement à appliquer sont basés essentiellement sur les procédés membranaires. Le second volet consiste à étudier les différentes possibilités d'intégration des eaux usées traitées dans les opérations d'ennoblissement textile (teinture, lavage, rinçage…).

L'objectif général du projet consiste à développer une technique de récupération de rejet qui permet la réintégration des effluents traités dans le cycle de production au sein de l'industrie.

<u>Titre du projet post-doc:</u> La sécurité globale dans l'internet des objets

<u>Laboratoire :</u> Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques

<u>Résumé:</u>

Vue les contraintes d'Internet d'objet comme le déploiement dans un environnement hostile et la communication sans fil qui facilite l'existence de plusieurs types d'attaques. En cas de violation, des informations sensibles pourraient fuiter à très grande échelle ou les appareils IoT pourraient être exposés à un risque de détournement par des pirates. Cependant, l'un des plus grands défis pour les personnes qui travaillent avec la technologie de l'IoT est la sécurité de communication et la sécurité de données.

Pour renforcer la sécurité, une proposition d'une nouvelle architecture de sécurité pour les réseaux de capteurs sans fil et l'IoT sera proposée. Cette proposition est basée sur la gestion de clé et l'algorithme de chiffrement en utilisant Shift-AES. Le but est d'étudier le problème de la sécurité de l'information sous des contraintes temps-réel et de consommation d'énergie et de concevoir de nouveaux systèmes cryptographiques qui répondent à ces défis. On s'intéresse à la fois à la sécurité des données (comme l'authentification de l'origine des données, intégrité, et confidentialité) ainsi qu'à la sécurité réseau liée à l'architecture proposée comme authentification de l'entité et sécurité sur les différentes couches réseau.

<u>Titre du projet post-doc:</u> Etude du processus de la gustation par modélisation avec le formalisme de la physique statistique

<u>Laboratoire:</u> Laboratoire de Physique Quantique et Statistique : LR18ES18

<u>Résumé:</u>

Il s'agit de modéliser et de simuler des courbes de réponses gustatives (taste dose-response curves) par le formalisme de la physique statistique à travers l'ensemble grand canonique.

Le travail consiste en une première partie bibliographique qui a un double rôle :

Tout d'abord de faire une revue concernant l'état de l'art sur la gustation : méthodes expérimentales et différentes théories utilisées pour l'étude de la gustation en mettant en relief la théorie des vibrations moléculaires utilisées dans le processus de la gustation.

Ensuite rassembler une base de données des courbes de réponses gustatives expérimentales disponibles dans la littérature pour servir comme plateforme pour la modélisation analytique et la simulation numérique pour l'étude du processus de la gustation. La réalisation expérimentale de courbes de réponse de quelques molécules gustatives particulières est aussi envisagée.

La deuxième partie consiste à utiliser tout le bagage acquis sur l'étude des processus d'adsorption et d'absorption par la modélisation analytique et la simulation numérique des courbes isothermes d'adsorption pour tirer le maximum d'informations quantitatives sur le processus gustatif moyennant tous les variations des valeurs des paramètres physico-chimiques ajustables des modèles utilisés dans les simulations des courbes expérimentales des réponses gustatives.

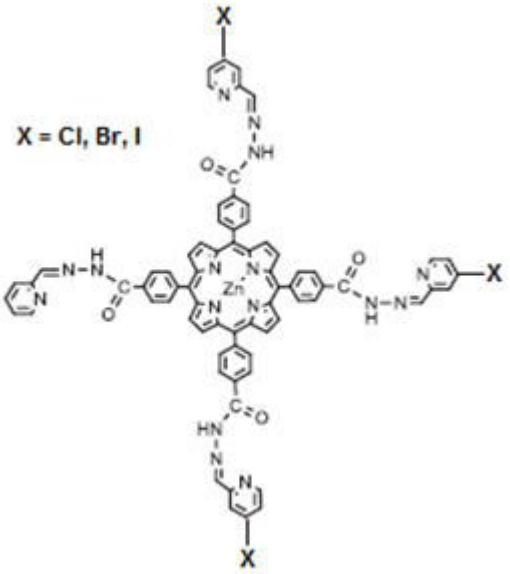
La description microscopique statistique au niveau moléculaire du mécanisme de la gustation et de la différentiation des saveurs va être quantifiée, premièrement, au point de vu énergétique, en termes des énergies d'adsorption, des énergies moléculaires de vibration échangées avec les sites récepteurs des nerfs gustatifs ainsi que les largeurs des bandes des densités des énergies d'adsorption (AED), et au point de vu stérique en termes des couches adsorbées, des nombres de molécules adsorbés par site récepteur, des densités surfaciques ou volumiques de ces sites récepteurs ainsi que les largeurs des densités des tailles des pores d'adsorption (PSD).

<u>Titre du projet post-doc:</u> Préparation et caractérisation structurale et spectrale de nouveaux complexes porphyriniques de zinc(II) et étude de leurs utilisations dans les cellules photovoltaïques

<u>Laboratoire:</u> Laboratoire physico-chimie des matériaux

<u>Résumé:</u>

Ce projet entre dans le cadre général de notre groupe de recherche qui est la synthèse et la caractérisation de nouveaux matériaux à base de porphyriniques. Ce travail nécessite la synthèse de complexes porphyriniques de zinc, leurs caractérisation spectrales et structurale par diffraction des RX et ensuite l'étude des propriétés photovoltaïques de ces complexes de zinc(II). La figure ci-jointe illustre la structure d'un des composés à étudier (X désigne un halogène)



<u>Titre du projet post-doc:</u> Optimisation de l'incorporation de quelques plantes halophytes dans la préparation des nouvelles pâtes alimentaires pauvres en gluten : Propriétés physico-chimiques, rhéologiques et organoleptiques

<u>Laboratoire :</u> Laboratoire des interfaces et des matériaux avancés

<u>Résumé:</u>

Le continent africain est l'un des continents dotés d'une biodiversité des plus riches dans le monde. Particulièrement, la Tunisie possède une richesse floristique considérable. En effet, des milliers d'espèces présentent divers intérêts et qui constituent un axe de recherche scientifique dans le domaine des substances naturelles. En Tunisie, les sols salins constituent une source inépuisable de plantes halophytes (plantes naturellement tolérantes aux sels) qui sont couramment utilisées par la population tunisienne comme remèdes traditionnels.

Face à ce constat, le présent projet postdoctoral s'oriente vers la valorisation des espèces halophytes tunisiennes dans le domaine de l'industrie agroalimentaire. Cette orientation est d'autant plus attrayante que l'enrichissement de la farine de blé par ces plantes semble présenter une plus grande innocuité et non-toxicité, pour les personnes souffrant de la maladie cœliaque, que leurs homologues d'origine commerciale. Parmi ces plantes halophytes tunisiennes, les feuilles d'épinards (SO ; *Spinacia oleracea* L.) et de blette (BV ; *Beta vulgaris var cicla*) peuvent être un excellent choix pour améliorer la valeur nutritionnelle des farines de blé, au regard de leur richesse en protéines et fibres alimentaires.

L'objectif général de ce projet vise à incorporer la farine de deux espèces halophytes répandue en Tunisie (SO et BV) dans la fabrication de nouvelles pâtes alimentaires pauvres en gluten. L'impact sur la qualité culinaire, les compositions biochimiques, les teneurs en phénol totaux solubles et flavonoïdes, l'activité antioxydante et enzymatique (α-amylase et α-glycosidase) des pâtes cuites sera déterminée. Cette incorporation, basée sur l'optimisation des plans d'expériences, doit se faire sans changement des propriétés rhéologiques et sensorielles du produit alimentaire.

<u>Titre du projet post-doc:</u> Synthèse, caractérisations des quantum dots (QDs) pour la fabrication des sondes luminescentes pour la détection du monoxyde de carbone dans les cellules cancérogènes

<u>Laboratoire :</u> Laboratoire des interfaces et des matériaux avancés

<u>Résumé:</u>

Il est actuellement bien établi que les nanoparticules semi-conducteurs possèdent des propriétés physico-chimiques complètement différentes de leurs homologues à l'état massif. En effet, la majorité des propriétés de ces nanocristaux sont contrôlées par leur taille à cause du confinement quantique des porteurs et par leur surface qui contient le plus souvent une densité importante de défauts. Les points quantiques, en tant que nouveau type de nanomatériaux semi-conducteurs constituent des matériaux prometteurs largement utilisées dans les domaines biologiques et biomédicales. Elles sont potentiellement utilisées pour la fabrication des nouvelles sondes fluorescentes sélectives pour la détection de différentes molécules cibles à température ambiante. Ces nanoparticules sont trop sollicitées dans la conception des sondes optiques par rapport aux colorants organiques traditionnels, car elles possèdent des propriétés uniques telles que leur haut rendement quantique de fluorescence, leur large spectre d'absorption qui dépend de la taille de ces QDs, des coefficients élevés d'extinction et l'émission étroite facilement accordable avec la taille ainsi que la stabilité photochimique. L'objectif de ce projet de recherche est la synthèse des nanomatériaux semi-conducteurs appelés les quantum dots (QDs) pour la fabrication des sondes luminescentes pour la détection du monoxyde d'azote (NO) dans les cellules tumorales.