

Candidature Post-Doc

Vous êtes Docteur et vous souhaitez déposer votre proposition de candidature dans le cadre du dispositif MOBIDOC Post-Doc, merci de remplir les champs suivants :

Nouvelle édition MOBIDOC : Vers l'Excellence



Informations sur le Docteur :

Nom : *

KOUKI

Prénom : *

Nouha

Adresse : *

16 rue hammadi aljeziri borj louzir

Ville : *

ariana

Code postal :

2073

Gouvernorat : *

Ariana



Tél. mobile : *

97990186

Email : *

kouki_nouha@hotmail.fr

Expérience professionnelle (s'il y en a) :

enseignante vacataire

Informations à propos du diplôme de doctorat et des travaux de recherche et innovation (R&I) envisagés

Etablissement universitaire d'obtention du doctorat : *

Faculté des Sciences de Tunis

Structure de recherche du doctorat : *

Chimie Théorique et Réactive - Institut Préparatoire des Etudes d'Ingénieurs El Manar

Discipline à laquelle appartient le diplôme de doctorat : *

Chimie - Physique

Année d'obtention : *

2019

Intitulé de la thèse : *

Etude mécanistique du fonctionnement des cellules solaires organiques DSSC (dye-sensitized solar cells)

Bref descriptif de la thèse : *

Ce travail de thèse vise à soutenir la conception et le développement de cellules solaires nanocristallines sensibilisées par des colorants et est organisée en cinq chapitres :

Le premier chapitre présente une étude de deux grands modèles théoriques (HF et DFT) ainsi que les principales méthodes qui vont nous permettre d'extraire les propriétés physicochimiques des systèmes étudiés. Quelques détails sur des notions de calcul théorique et sur les logiciels utilisés (à savoir GAUSSIAN et VASP) vont être aussi exposés dans ce chapitre.

Dans le deuxième chapitre, nous aborderons un état de l'art sur la constitution, le fonctionnement, ainsi que l'évolution de cette technologie. Plus particulièrement, nous allons décrire l'architecture générale d'une cellule DSSC, en détaillant les caractéristiques des différents composants. Finalement, nous allons mentionner quelques exemples d'applications développées par les industriels, montrant ainsi que cette technologie est d'ores et commercialement viable.

Dans le troisième chapitre, nous allons étudier les performances de cinq chromophores possédant le squelette $[Ru(NCS)_2L_2]$ afin de déterminer les meilleurs candidats pour applications en DSSC. Pour cette étude, nous avons procédé à l'optimisation de la géométrie puis effectué des calculs des probabilités atomiques d'ionisation, des orbitales moléculaires et des propriétés spectroscopiques et nous avons fini par calculer certaines propriétés du travail des colorants tels que la mobilité, la réorganisation de l'énergie et les calculs du potentiel redox.

Le quatrième chapitre concernera l'étude du mode d'adsorption du colorant K8 sur une nanoparticule de TiO_2 . Pour ce faire, dans un premier temps, nous avons procédé à l'optimisation de la géométrie du système $K8@TiO_2$. Puis, nous avons étudié la structure électronique du système combiné et nous avons fini par la proposition du mécanisme d'injection.

Enfin dans le cinquième et dernier chapitre nous exposerons une méthode de fabrication d'une nouvelle cellule DSSC ainsi que les différents résultats de sa caractérisation optique et photovoltaïque.

Thème(s) de R&I envisagés dans le cadre du projet MOBIDOC : *

Energies renouvelables

A quel(s) secteur(s) d'activité(s) pourrait éventuellement appartenir l'organisme bénéficiaire d'accueil visé ? *

Energies renouvelables

Informations complémentaires (s'il y a lieu) :

I have, recently, completed my Ph.D. degree at the University of Tunis El-Manar, Tunisia. My Ph.D thesis focused on both theoretical and experimental study of DSSC. During which, I developed skills on theoretical calculation concepts using the two softwares GAUSSIAN 09 and VASP.

I have a dual skill in theoretical and experimental DSSC cells chemistry. This wealth of knowledge has given me a good understanding of the internal processes that take place in a DSSC cell such as the processes of electronic transfers, charge separations...etc; and relevant trapping techniques of incident light in the active layer of the DSSC cell.

In addition, I did internships in several laboratories in France like the ITODYS group at the University of Paris Diderot under the direction of Professor François MAUREL and in Spain as the MOM group of the Institute of Materials Sciences of Sevilla CSIC under the direction of Professor Hernan MIGUEZ and another internship in the laboratory of physical chemistry at the University of Sevilla under the direction of the Professor Enrique SANCHEZ MARCOS, which allowed me to develop and enrich my knowledge on basic concepts on simulations of molecular dynamics, master periodic calculations using VASP software and master the fabrication and characterization techniques of a DSSC cell.

Therewith, i have an excellent academic background throughout my study career: after a License's degree in fine chemistry and a Master's degree in organic chemistry at the Faculty of Sciences of Tunis El-Manar, I can handle the different chromatographic (CPG, CPL, CCM, GC-MS) and spectroscopic (IR and UV-visible) techniques. I also taught inorganic chemistry practical courses for the 2nd year preparatory cycle students in the Preparatory Institute for Engineering Studies of El-Manar IPEIEM

To continue my researches with a post-doc in the photovoltaic field is a great opportunity for me to put into practice, my skills of experimental and theoretical mastery of DSSC. My dynamism and my interpersonal skills will allow me to integrate myself completely and in the best conditions within your research laboratory.

Google Forms