

# Un(e) assistant(e) à temps plein au Département de Chimie

**Faculté** : Faculté des sciences

**Département** : Département de Chimie

**Date d'entrée en fonction** : 1/10/2019

**Grade** : assistant 2

**Contrat** : durée déterminée renouvelable

**Catégorie** : personnel scientifique

**Poste** : Allocation (au cadre)

**Référence** : poste n°...

## Tâches

La personne engagée devra, dans le cadre des activités d'enseignement au Département de Chimie :

- s'investir dans les projets pédagogiques du Département de Chimie, notamment en assurant des travaux pratiques et des travaux dirigés de chimie en Baccalauréat et en Master et en particulier en chimie générale, chimie théorique et éventuellement en chimie analytique.
- superviser et encadrer des travaux personnels, stages, et mémoires de fin d'études,

et devra, dans le cadre des activités de recherche à l'Unité de Chimie Physique Théorique et Structurale (UCPTS) :

- réaliser des travaux de recherche dans le cadre d'une thèse de doctorat dans le domaine de l'électronique organique. En particulier, la thématique portera sur l'étude de nouveaux matériaux organiques  $\pi$ -conjugués émetteurs de lumière pour des diodes électroluminescentes organiques (OLEDs). Cette étude sera menée via les outils de calcul de la chimie computationnelle, en étroite collaboration avec des groupes d'expérimentateurs (voir projet de recherche ci-dessous),
- participer à la rédaction de publications, de posters et de présentations.

## Profil

Celles et ceux qui postuleront seront titulaires, au moment de la prise de fonction, d'un master (ou équivalent) en sciences chimiques ou ingénieur chimiste (admissible au doctorat).

Les compétences et les qualités requises sont les suivantes :

Compétences et qualités requises:

- manifester un intérêt marqué pour l'enseignement,
- être motivé par la conduite d'un projet de recherche collaboratif,
- posséder une bonne connaissance théorique et conceptuelle des techniques de dynamique moléculaire et de chimie quantique (méthodes Hartree-Fock et théorie de la fonctionnelle de la densité),

- avoir une connaissance pratique de logiciels de dynamique moléculaire ET/OU de chimie quantique,
- posséder une bonne capacité de communication et maîtriser la langue française et anglaise (lu, écrit, parlé),
- capacité et motivation à s'intégrer dans une équipe de recherche,
- autonomie et organisation,
- bonne maîtrise du système d'exploitation Linux,
- pratique des logiciels de bureautique

## Projet de recherche

### **Diodes électroluminescentes organiques: Composés moléculaires à émission retardée thermiquement activée (TADF)**

Le développement des diodes électroluminescentes organiques (OLEDs) a connu ces dernières années des avancées sans précédent qui ont conduit aux premières applications commerciales (écrans de téléphones portables et TVs OLED). Cependant, l'efficacité de ces dispositifs est limitée (à 25%) par la statistique de spins pour des émetteurs moléculaires organiques fluorescents. Récemment, une nouvelle génération d'émetteurs organiques caractérisés par une faible différence d'énergie  $\Delta E_{ST}$  entre les états excités singulet (émissif) et triplet (non-émissif) a été proposée. Cette faible  $\Delta E_{ST}$  a pour conséquence de favoriser une conversion thermique activée de l'état triplet vers l'état singulet via un mécanisme de croisement intersystème inverse (Reverse Intersystem Crossing) conduisant à une fluorescence retardée. Grâce à ce mécanisme TADF (Thermally Activated Delayed Fluorescence), l'efficacité théorique de dispositifs OLEDs peut atteindre 100%.

Durant cette thèse, nous nous intéresserons à la caractérisation des propriétés électroniques de la couche émettrice de lumière des dispositifs OLED composée d'émetteurs TADF présent en faible concentration dans un matériau hôte. Pour cela, nous combinerons des techniques de dynamique moléculaire pour simuler l'organisation des molécules hôte et émettrice TADF au sein de la couche émettrice et des techniques de chimie quantique pour la caractérisation des états excités singulet et triplet de ces molécules. Le but de cette thèse est d'identifier le rôle de l'interaction entre le matériau hôte et l'émetteur TADF sur la dynamique des états excités ainsi que l'efficacité des dispositifs OLED à base d'émetteurs TADF.

Cette thèse se déroulera en étroite collaboration avec le groupe du Prof. Zysman-Colman de St Andrews où la synthèse de nouveaux émetteurs TADF, leur caractérisation par techniques de spectroscopie ainsi que la préparation de nouveaux dispositifs seront réalisées.

## Renseignements complémentaires

Professeur Yoann Olivier (promoteur de la thèse) – Tel : +32(0)65/37.38.63

Email: [yoann.olivier@umons.ac.be](mailto:yoann.olivier@umons.ac.be)

Professeur Stéphane Vincent (directeur du Département de Chimie) – Tél: +32(0)81/72.45.21

Email: [stephane.vincent@unamur.be](mailto:stephane.vincent@unamur.be)

## Remarques

Les formulaires de candidature (téléchargeables à l'adresse suivante : <https://www.unamur.be/universite/jobs/formulaires/formulaire-de-candidature-pour-le-personnel-scientifique-francais-anglais/view>) doivent être renvoyés au Rectorat (rue de Bruxelles, 61 à 5000 NAMUR) avec une lettre de motivation pour le **21 JUILLET 2019** au plus tard.