

**UNIVERSITE SIDI MOHAMED BEN ABDELLAH  
FACULTE DES SCIENCES DHAR EL MAHRAZ  
FES**



**AVIS DE SOUTENANCE DE THESE**

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

M<sup>me</sup> (elle) : **AGDA Fatima**

Soutiendra : **le 07/04/2018 à 10 H** Lieu : **Salle de Réunion Géologie**

**Une thèse intitulée :**

*Matériaux moléculaires à base du carbazole et dérivés. Elaboration, propriétés, modélisation et applications*

**En vue d'obtenir le Doctorat**

**FD : Ressources Naturelles, Environnement et Développement Durable (RNE2D)**

**Spécialité : Chimie-Physique Appliquée**

	<b>NOM ET PRENOM</b>	<b>GRADE</b>	<b>ETABLISSEMENT</b>
<b>Président</b>	Pr. DAOUDI Abdelali	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
<b>Directeur de thèse</b>	Pr. TALEB Mustapha	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
<b>Co-Directeur de thèse</b>	Pr. BOUACHRINE Mohammed	PES	Ecole Supérieure des de Technologie - Meknès
<b>Rapporteurs</b>	Pr. AMINE Amina	PES	Faculté des Sciences - Meknès
	Pr. LAKHLIFI Tahar	PES	Faculté des Sciences - Meknès
	Pr. TOUIMI BENJALLOUN Adil	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
<b>Membres</b>	Pr. BENZAKOUR Mohammed	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. SFAIRA Mouhcine	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. ZORQANI Izeddine	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès

**Résumé :**

Les cellules les plus utilisées sont les cellules à base de silicium Si qui présentent 80% avec un rendement de conversion de l'ordre de 25%, mais leurs productions et leurs recyclages sont polluants et très coûteux. Pour résoudre ce problème, d'autres alternatives sont étudiées comme les cellules solaires organiques.

Les cellules solaires organiques de type BHJ ou sensibilisées par des colorants (DSSC) présentent une technologie très prometteuse grâce à leurs faibles coûts de fabrication, leurs flexibilités et leurs légèretés. Depuis de nombreuses études réalisées dans ce domaine, le rendement de conversion de la lumière solaire a atteint juste 13% en utilisant des cellules à multi-jonction.

Ce travail est réalisé dans le but d'étudier des propriétés des matériaux moléculaires  $\pi$ -conjugués à base de carbazole et/ ou thiophène en vue de les utiliser dans des cellules solaires organiques (de type BHJ) ou sensibilisées par des colorants (de type DSSC). On se sert des méthodes DFT et TD/ DFT pour déterminer les propriétés structurales et optoélectroniques de ses matériaux, d'une part pour faire des études afin de modéliser les propriétés optiques et électroniques de différents enchaînements conjugués, dans le dessein de sélectionner le ou les matériaux adéquats, avant toute étape de synthèse et d'autre part d'évaluer en spectroscopies électroniques les propriétés d'absorption UV ( $\lambda_{\max}$  ; O. S) et photovoltaïque ( $V_{oc}$ ).

**Mots clés :** *carbazole ; thiophène ; BHJ ; DSSC ; DFT ; TD-DFT ;*

## **Molecular materials based on carbazole and / or thiophene. Elaboration, properties, modeling and applications.**

**Abstract:**

The most used cells are Si-based cells, which have 80% with conversion efficiency of the order of 25%, but their production and recycling are polluting and very expensive. To solve this problem, other alternatives are studied like organic solar cells.

Organic solar cells type BHJ or dyes sensitized (DSSC) present a very promising technology thanks to their low manufacturing costs, flexibilities and lightness. Since many studies in this field, the conversion efficiency of sunlight has been reached just 13% using multi-junction cells.

In this work, the main goal is to study the  $\pi$ -conjugated molecules based on carbazole and/or thiophene for their applications as organic (type BHJ) or dye sensitized (DSSC type) solar cells. These works contain mainly theoretical calculations which aims firstly to engage in predictive studies to model the electronic and optical properties of different sequences to select, before any synthesis step, good fragments include for optimized properties and secondly to evaluate in electron spectroscopy absorption properties, photoelectric UV ( $\lambda_{\max}$ , O. S) and photovoltaic (VOC) of these materials.

**Key Words :** *carbazole ; thiophène ; BHJ; DSSC; DFT; TD-DFT*