

**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^{me(elle)} : **FITRI Asmae**

Soutiendra : **le 20/04/2019** à **10H** Lieu : **centre des conférences**

une thèse intitulée :

Nouveaux matériaux organiques π – conjugués à base de thiazolothiazole pour des applications en photovoltaïque

En vue d'obtenir le Doctorat

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

Spécialité : Chimie - Physique Appliquée

Devant le jury composé comme suit :

	NOM ET PRENOM	GRADE	ETABLISSEMENT
Président	Pr. MCHARFI Mohammed	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Directeur de thèse	Pr. BENZAKOUR Mohammed	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Co-directeur de thèse	Pr. BOUACHRINE Mohammed	PES	Faculté des Sciences - Meknès
Rapporteurs	Pr. RABAA Hassan	PES	Faculté des Sciences - kénitra
	Pr. AMINE Amina	PES	Faculté des Sciences - Meknès
	Pr. LAKHLIFI Tahar	PES	Faculté des Sciences - Meknès
Membre	Pr. ZORKANI Izeddine	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès

Résumé

Les cellules solaires sensibilisées par des colorants (DSSC) font actuellement un objet assez répandu dans le domaine photovoltaïque en vue de leur viabilité économique. Toutefois, en dépit des études réalisées dans ce domaine, les rendements de photoconversion obtenus avec ce type de cellules n'ont toujours pas dépassé 12%.

Les travaux réalisés au cours de cette thèse s'inscrivent dans une optique d'optimisation des cellules solaires à colorants.

Pour y parvenir, une approche théorique a été adoptée. Par des calculs basés sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) et de sa variante dépendante du temps TDDFT, une nouvelle famille de colorants, caractérisée par la présence d'un groupement Thiazolothiazole, a été étudiée afin d'en choisir les membres les plus aptes à générer un photocourant, tout en déterminant les différentes propriétés optiques, électroniques et photovoltaïques.

Les résultats obtenus montrent que tous les colorants étudiés peuvent être utilisés comme sensibilisateurs potentiels pour les cellules solaires nanocristallines de TiO₂ et que les méthodes adoptées donnent des approches raisonnables. Des déterminations expérimentales restent sujet de recherche ultérieur pour confirmer ces prédictions théoriques.

Mots clés :

DSSC ; dérivés de thiazolothiazole ; DFT ; TD-DFT ; photovoltaïque, Colorants sensibilisateurs.

Abstract

New π -conjugated organic materials based on Thiazolothiazole for photovoltaic applications.

Dye sensitized solar cells (DSSC) present actually a rather widespread object in photovoltaic field for their economic viability. Despite the many studies in this area, the photoconversion's efficiencies have not yet exceed 12% with this type of cells.

The work done during this thesis is part of an optimization approach to dye solar cells.

To achieve this goal, a theoretical approach was adopted. Based on the Density Functional Theory (DFT) and its time-dependent variant TDDFT, a new family of dyes, based on the Thiazolothiazole group, was studied in order to choose the most able members to generate a photocurrent by determining the different optical, electronic and photovoltaic properties.

The results obtained show that all the dyes studied can be used as potential sensitizers for nanocrystalline TiO₂ solar cells and that the adopted methods give reasonable approaches. Experimental determinations remain a subject of further research to confirm these theoretical predictions.

Keywords :

DSSC; thiazolothiazole derivatives; DFT; TD-DFT; photovoltaic, dye sensitized