



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

M^{me} : EL MOUHI Rahma

Soutiendra : le 26/11/2022 à 10H

Lieu : FSDM – Centre Visioconférence

Une thèse intitulée :

“ Propriétés physico-chimiques des molécules organiques π -conjuguées à base d'indole utilisées comme matériaux dans les cellules solaires organiques ”

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 prénom | Grade | Etablissement |
|---------------------------|---------------------------|-------|---|
| Président | Pr MCHARFI Mohammed | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| Directeur de thèse | Pr TOUIMI BENJELLOUN Adil | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| Co-encadrant | Pr EL KHATTABI Souad | PH | Ecole Nationale des Sciences Appliquées - Fès |
| Rapporteurs | Pr BENZAKOUR Mohammed | PES | Faculté des sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| | Pr MAGHAT Hamid | PES | Faculté des Sciences de Meknès- Meknès |
| | Pr BOUACHRINE Mohammed | PES | Ecole Supérieure de Technologie - Khénifra |
| Membres | Pr EL HALLAOUI Menana | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| | Pr SFAIRA Mouhcine | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| | Pr OUAMOU Karim | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |

Résumé :

La recherche de nouveaux matériaux à base de molécules π -conjuguées est devenue l'un des sujets les plus intéressants dans les domaines de la chimie, la physique et les sciences des matériaux, d'une façon générale. En raison de leurs propriétés, ces composés comptent parmi les matériaux les plus prometteurs pour la technologie des dispositifs optoélectroniques, comme LEDS, transistors (FETS) et les cellules solaires.

Les cellules solaires organiques (BHJ) et sensibilisées par des colorants (DSSC) sont considérées aujourd'hui comme des technologies photovoltaïques économiquement viables. Cependant, les nombreuses études réalisées dans ce domaine, montrent que leur rendement de photo-conversion demeure faible. Ainsi, durant ces dernières années, l'amélioration de ce rendement a connu une intense activité de recherche. C'est dans ce cadre que s'inscrivent les travaux de la présente thèse. En effet, son objectif est de contribuer à l'amélioration des propriétés optoélectroniques des molécules π -conjuguées, à base de Thiéno[2,3-b]indole, en vue de leurs applications comme des cellules solaires types BHJ et DSSC.

Dans ce travail, nous avons utilisé les méthodes DFT, TD-DFT et DFTB pour décrire les différentes propriétés structurales, électroniques, optiques et photovoltaïques des séries de molécules π -conjuguées, de différentes structures.

Aussi, le modèle 3D-QSPR a été appliqué à une de ces séries, pour prédire les propriétés tridimensionnelles les plus importantes, ce qui nous a permis de concevoir théoriquement de nouvelles molécules à haute performance.

Les résultats obtenus dans le cadre de cette thèse montrent que les modifications que nous avons apportées à la molécule de référence au niveau du bridge et de l'accepteur ont amélioré les propriétés optoélectroniques, photovoltaïques et optiques.

Mots clés :

Thiéno[2,3-b]indole; DFT; DFTB; 3D-QSPR; BHJ; DSSC; optoélectroniques.

Physico-chemical properties the organic molecules based on thieno [2, 3-b] indole used as materials in organic solar cells

Abstract:

The search for new materials based on π -conjugated molecules has become one of the most interesting topics in the fields of chemistry, physics and materials science in general. Due to their properties, these compounds are among the most promising materials for optoelectronic device technology, such as LEDs, transistors (FETS) and solar cells.

Organic (BHJ) and dye-sensitized (DSSC) solar cells are considered economically viable photovoltaic technologies today. However, the numerous studies carried out in this field show that their photo-conversion efficiency remains low. Thus, in recent years, the improvement of this yield has experienced intense research activity. It is in this context that the work of this thesis falls. Indeed, its objective is to contribute to the improvement of the optoelectronic properties of π -conjugated molecules, based on Thieno[2,3-b]indole, with a view to their applications as BHJ and DSSC type solar cells.

In this work, we used DFT, TD-DFT and DFTB methods to describe the different structural, electronic, optical and photovoltaic properties of a series of π -conjugated molecules with different structures.

Also, the 3D-QSPR model was applied to one of these series, to predict the most important three-dimensional properties, which allowed us to theoretically design new high-performance molecules.

The results obtained in this thesis show that the modifications we made to the reference molecule at the level of the bridge and the acceptor improved the optoelectronic, photovoltaic and optical properties.

Key Words:

Thieno[2,3-b]indole; DFT; DFTB; 3D-QSPR; BHJ; DSSC; optoelectronics.