



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mr **SOUILAH Mohammed**

Soutiendra : le Samedi 13/05/2023 à 10H00

Lieu : Centre des Etudes Doctorales - USMBA – Amphi 1

Une thèse intitulée :

Etude quantique des molécules π -conjuguées dérivées de la coumarine pour le photovoltaïque

En vue d'obtenir le Doctorat

FD : Ressources Naturelles, Environnement et Développement Durable

Spécialité : Chimie-Physique Appliquée

Devant le jury composé comme suit :

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
Pr MCHARFI Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Président
Pr MAGHAT Hamid	Faculté des Sciences, Meknès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr BOUACHRINE Mohammed	Faculté des Sciences, Meknès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr BENZAKOUR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr EL KHATTABI Souad	Ecole Nationale des Sciences Appliquées, Fès	PH	Examinatrice
Pr SFAIRA Mouhcine	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr ZGOU Hsaine	Faculté polydisciplinaire, Ouarzazate	PES	Co-directeur de thèse
Pr TOUIMI BENJELLOUN Adil	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



Résumé :

Les cellules solaires sensibilisées à colorant (DSSC) sont des dispositifs photovoltaïques prometteurs et respectueux de l'environnement pour la conversion de la lumière du soleil à l'électricité, elles se caractérisant par un faible coût des matériaux, un temps de récupération de l'énergie réduit, un processus de fabrication facile et un rendement à la hausse.

Les matériaux organiques, polymères et molécules π -conjuguées, sont des matériaux qui peuvent présenter des propriétés optiques et électroniques intéressantes pour des applications dans le domaine de l'énergie solaire. Ces matériaux présentent l'avantage de pouvoir être déposés sur des substrats flexibles et légers comme le fullerène (PCBM) et ses dérivés ou sur des surfaces monocristallines de TiO_2 .

C'est dans ce contexte, que notre travail est basé sur l'étude théorique, en faisant appel à des méthodes de calcul de chimie quantique (DFT et TD-DFT), des nouvelles molécules π -conjuguées à base de coumarine, qui se caractérisent par une forte absorption des photons de la lumière dans le domaine UV visible du spectre solaire. Les systèmes de type D- π -A, D-A- π -A et D- π -A- π -A sont conçus en modifiant l'espaceur pour la structure D- π -A et le groupement donneur et en introduisant un accepteur auxiliaire pour les structures D-A- π -A et D- π -A- π -A. les résultats obtenus telles que le gap énergétique, les spectres UV-Vis, efficacité de la récolte de la lumière (LHE), et la force motrice de l'injection d'électrons (ΔG^{inject}) et l'énergie totale de réorganisation (λ_{total}) montrent clairement laissent proposés ces systèmes étudiés pour d'applications du DSSC.

Mots clés : Dérivées de coumarine ; DFT ; TD-DFT ; DSSC ; photovoltaïque, Propriétés optoélectroniques.



QUANTUM STUDY OF π -CONJUGATED MOLECULES OF COUMARIN DERIVATIVE FOR PHOTOVOLTAICS

Abstract:

Dye-sensitized solar cells (DSSCs) are promising photovoltaic devices and environmentally friendly for the conversion of sunlight to electricity, low cost material, reduced energy recovery time, easy fabrication process and increasing efficiency.

Organic materials, polymers and conjugated molecules can present interesting optical and electronic properties for solar energy applications. These materials have advantage of being deposited on flexible and light substrates such as fullerene (PCBM) and its derivatives or on single crystal TiO_2 surfaces.

In this context, our work is based on the theoretical study using quantum chemical methods (DFT and TD-DFT), of new coumarin-based molecules, which are characterized by a strong absorption of sunlight in the visible UV range. The D- π -A, D-A- π -A and D- π -A- π -A systems are designed by modifying the spacer for the D- π -A structure and the donor moiety and introducing an auxiliary acceptor for the D-A- π -A and D- π -A- π -A structures. The obtained results such as energy gap, UV-Vis spectra, light harvesting efficiency (LHE), and electron injection driving force (ΔG^{inject}) and total reorganization energy (λ_{total}) clearly show let proposed these studied systems for DSSC applications

Key Words: Coumarin derivatives; DFT; TD-DFT; DSSC; photovoltaics, optoelectronic properties.