



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mme (elle) **ETABTI Hanane**

Soutiendra : le **Samedi 27/05/2023 à 10H00**

Lieu : **Centre des Etudes Doctorales - USMBA – Amphi 2**

Une thèse intitulée :

Etude théorique de nouveaux composés organiques π -conjugués à base de carbazole pour des applications en 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 TOUFIK Hamid	Faculté polydisciplinaire, Taza	PES	Rapporteur & Examineur
Pr AMECHROUQ Ali	Faculté des Sciences, Meknès	PH	Rapporteur & Examineur
Pr BOUACHRINE Mohammed	Ecole Supérieure de Technologie, Khenifra	PES	Rapporteur & Examineur
Pr BENZAKOUR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr SFAIRA Mouhcine	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr TOUIMI BENJELLOUN Adil	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



Résumé :

Les systèmes conjugués font l'objet d'un développement important en raison de leur caractère semi-conducteur qui, associé à la flexibilité des matériaux organiques, permet la réalisation de nouveaux dispositifs optoélectroniques tels que les LEDS, les transistors (FETS) et les cellules photovoltaïques (PV).

Le développement des cellules photovoltaïques (PV) depuis une vingtaine d'années a permis une hausse significative des rendements de photoconversion pour les porter à plus de 20%. Ces progrès résultent à la fois de l'optimisation de l'architecture des cellules solaires organiques (OSCs) ainsi que de la mise au point de matériaux donneurs (D) et accepteurs (A) d'électrons performants.

L'objectif de cette thèse est la conception et le développement de nouveaux semi-conducteurs organiques π -conjugués dérivés du carbazole pour leurs applications comme matériaux donneurs dans la couche active (type OSC-BHJ) ou sensibilisées par des colorants (type DSSC) ou comme matériaux de transport de trous (type PSC).

Nos calculs sont basés sur la théorie de la fonction de la densité (DFT) et sa variante dépendante du temps TD-DFT. Ces méthodes ont été utilisées pour décrire les différentes propriétés structurales, électroniques, optiques et photovoltaïques des séries de molécules, de structures différentes (D- π -A- π -D, di-D- π -A, D-Di- π -A, D- π -D), afin de sélectionner les membres les plus aptes à générer un photocourant.

Les résultats obtenus montrent que les modifications que nous avons apportées par substitution et/ou greffage au niveau des structures mis en évidence une nette amélioration des performances des molécules de base synthétisées expérimentalement et que les modèles adoptés donnent des approches raisonnables. Les déterminations expérimentales restent un sujet de recherche complémentaire pour confirmer ces prédictions théoriques.

Mots clés :

Dérivés de carbazole, BHJ, DSSC, PSC, DFT/TD-DFT, propriétés photovoltaïque



THEORETICAL STUDY OF NEW π -CONJUGATED ORGANIC COMPOUNDS BASED ON CARBAZOLE FOR PHOTOVOLTAIC APPLICATIONS

Abstract :

Conjugated systems are the object of an important development due to their semiconductor character which, associated with the flexibility of organic materials, allows the realization of new optoelectronic devices such as LEDs, transistors (FETS) and photovoltaic cells (PV).

The development of photovoltaic cells (PV) over the last twenty years has allowed a significant increase in photoconversion efficiencies to over 20%. This progress is the result of both the optimization of the architecture of organic solar cells (OSCs) and the development of efficient electron donor (D) and acceptor (A) materials.

The aim of this thesis is to design and development of novel carbazole-derived π -conjugated organic semiconductor for their applications as donor materials in the active layer (OSC-BHJ), as dye sensitizer (DSSC type) or as hole transfer materials (PSC).

Our calculations are based on density function theory (DFT) and its time dependent variant TD-DFT. These methods were used to describe the different structural, electronic, optical and photovoltaic properties of the series of molecules, with different structures (D- π -A- π -D, di-D- π -A, D-Di- π -A, D- π -D), in order to select the most suitable members to generate a photocurrent.

The results obtained show that the modifications we have made by substitution and/or grafting at the structure level showed a clear improvement of the performances of the experimentally synthesized basic molecules and that the adopted models give reasonable approaches. The experimental determinations remain a subject of complementary research to confirm these theoretical predictions.

Key Words :

Carbazole derivatives, BHJ, DSSC, PSC, DFT/TD-DFT, photovoltaic properties