



## AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mr **BOUZINEB Yassir**  
Soutiendra : le Samedi 18/05/2024 à 10H00  
Lieu : **FSDM – Centre Visioconférence**

Une thèse intitulée :

« Etude théorique des propriétés optoélectroniques de nouveaux matériaux  $\pi$ -conjugués à base de pyranilidène pour des applications en cellules solaires organiques »

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 AMMARI Mohammed	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Rapporteur
Pr BEN ALLAL Laila	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Rapporteur
Pr SFAIRA Mouhcine	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Rapporteur
Pr EL KHATTABI Souad	École Nationale des Sciences Appliquées, Fès	PES	Examineur
Pr BENZAKOUR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr EL HALLAOUI Mennana	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr TOUIMI BENJELLOUN Adil	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse
Pr BOUACHRINE Mohammed	Faculté des Sciences, Meknès	PES	Co-directeur de thèse



## Résumé :

Les cellules solaires photovoltaïques organiques présentent des propriétés très intéressantes notamment dans leur flexibilité et la possibilité d'être réalisées avec de grandes surfaces. Au cours des dernières années, les cellules solaires organiques à hétérojonction (BHJ) et les cellules solaires sensibilisées à colorants (DSSC) ont connu d'énormes progrès dans la compréhension et le développement fondamentaux. Cependant leur stabilité et leur rendement doivent être considérablement améliorés.

Ce travail de thèse de doctorat s'intéresse à l'étude théorique de nouveaux semi-conducteurs organiques  $\pi$ -conjugués dérivés de la Pyranilidène utilisables comme matériaux donneurs dans la couche active des cellules solaires organiques de type hétérojonction donneur/accepteur ou comme des sensibilisateurs potentiels pour les cellules solaires sensibilisées à des colorants (DSSC).

Les méthodes quantiques de type DFT et TD-DFT ont été utilisées pour étudier les différentes propriétés structurales, électroniques, optiques et photovoltaïques des séries de molécules objets de notre travail. Les structures optimisées pour tous les colorants montrent qu'ils ont des conformations coplanaires similaires, ceci devrait améliorer le transfert d'électrons du donneur vers l'accepteur.

Les gap énergétiques des différentes séries de molécules étudiées ont diminué d'une manière significative, présentent une meilleure absorption dans le domaine UV-visible avec un déplacement important vers le rouge montrant que ces classes de molécules à base de Pyranilidène sélectionnées pourraient être utilisées comme des candidats potentiels pour des cellules BHJ ou DSSC performantes.

**Mots clés :** DSSC; BHJ; Pyranilidène; DFT; TD-DFT ; propriétés optoélectroniques.



## THEORETICAL STUDY OF THE OPTOELECTRONIC PROPERTIES OF NEW PYRANYLIDENE-BASED $\pi$ -CONJUGATE MATERIALS FOR ORGANIC SOLAR CELL APPLICATIONS

### Abstract :

Organic photovoltaic solar cells have very interesting properties, particularly in terms of their flexibility and the possibility of being made with large surfaces. In recent years, organic heterojunction solar cells (BHJs) and dye-sensitised solar cells (DSSCs) have undergone enormous progress in fundamental understanding and development. However, their stability and efficiency need to be significantly improved.

This work focuses on the theoretical study of novel  $\pi$ -conjugated organic semiconductors derived from Pyranilidene for use as donor materials in the active layer of donor/acceptor heterojunction organic solar cells or as potential sensitizers for dye sensitised solar cells (DSSCs).

DFT and TD-DFT methods were used to describe the different structural, electronic, optical and photovoltaic properties of the series of molecules studied. The optimised structures for all the dyes show that they have similar coplanar conformations; this should improve electron transfer from donor to acceptor.

The energy gaps of the different series of molecules studied decreased significantly and show absorb a better absorption in the UV-visible range with a significant red shift showing that these selected classes of Pyranilidene-based molecules which could be used as potential candidates for BHJ or DSSC applications.

**Key Words :** DSSC; BHJ; Pyranilidene; DFT; TD-DFT; optoelectronic properties.