

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 des semi-conducteurs organiques π -conjugués dérivés de triphénylamine 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).

Nous avons utilisé la DFT et TD-DFT comme modèle pour décrire les différentes propriétés électroniques, optiques et photovoltaïques des séries de molécules étudiées.

Les structures optimisées pour tous les colorants montrent qu'ils ont des conformations coplanaires similaires. Ce qui devrait améliorer le transfert d'électrons du donneur vers l'accepteur.

Les énergies de gap des molécules étudiées diffèrent légèrement et absorbent aussi le mieux dans le domaine UV-visible montrant que ces classes de molécules à base de triphénylamine sélectionnés pourraient être utilisés comme des candidats potentiels pour les candidatures au BHJ ou DSSC.

Une autre étude a été consacrée sur l'adsorption des colorants D- π -A sur la surface du TiO_2 en modifiant le groupement d'ancrage. Les structures électroniques, la densité d'états (DOS), l'analyse de l'orbitale de liaison naturelle (NBO), les spectres UV-Vis, et certains paramètres clés comme l'efficacité de la récolte de la lumière (LHE), et la force motrice de l'injection d'électrons (ΔG^{inject}), ont été calculées pour prédire la plus des colorants appropriés pour l'application du DSSC.

Mots clés :

DSSC ; dérivés de triphenylamine ; DFT ; TD-DFT ; photovoltaïque, propriétés optoélectroniques.

THEORETICAL STUDY OF NEW TRIPHENYLAMINE-BASED MOLECULAR MATERIALS FOR PHOTOVOLTAIC APPLICATIONS

Abstract :

Organic photovoltaic solar cells present very interesting properties, especially in their flexibility and the possibility to be realized with large surfaces. In recent years, organic heterojunction solar cells (BHJ) and dye-sensitized solar cells (DSSC) have made tremendous progress in fundamental understanding and development. However, their stability and efficiency need to be significantly improved.

This dissertation work focuses on the theoretical study of triphenylamine-derived π -conjugated organic semiconductors that can be used as donor materials in the active layer of donor/acceptor heterojunction organic solar cells or as potential sensitizers for dye-sensitized solar cells (DSSCs).

We used DFT and TD-DFT as a model to describe the different electronic, optical and photovoltaic properties of the investigated series of molecules.

The optimized structures for all dyes show that they have similar coplanar conformations. This should improve the electron transfer from donor to acceptor.

The gap energies of the studied molecules differ slightly and also absorb best in the UV-visible range showing that these selected classes of triphenylamine based molecules could be used as potential candidates for BHJ or DSSC applications.

Another study was devoted to the adsorption of D- π -A dyes on the TiO₂ surface by modifying the anchoring group. Electronic structures, density of states (DOS), natural bonding orbital (NBO) analysis, UV-Vis spectra, and some key parameters such as light harvesting efficiency (LHE), and electron injection driving force (ΔG^{inject}), were calculated to predict the most suitable dyes for DSSC application.

Key Words :

DSSC; triphenylamine derivatives; DFT; TD-DFT; photovoltaics, optoelectronic properties.