



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mr : **HACHI Mohamed**

Soutiendra : le **04/12/2021** à **10 H**

Lieu : **Centre de Visioconférence**

Une thèse intitulée :

Nouveaux composés organiques π - conjugués à base de Thiéno [2,3-b]indole destinés aux dispositifs optoélectroniques et photovoltaïques.

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 PRENOM | 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- directeur de thèse | Pr EL KHATTABI Souad | PH | Ecole Nationale des Sciences Appliquées - Fès |
| Rapporteurs | Pr BENZAKOUR Mohammed | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| | Pr BOUACHRINE Mouhammed | PES | Ecole Supérieure de Technologie - Khénifra |
| | Pr MAGHAT Hamid | PES | Faculté des Sciences - Meknès |
| Membres | Pr SFAIRA Mohcine | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |
| | Pr EL HALLAOUI Menana | PES | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès |

Résumé :

Depuis les premiers travaux pionniers de Grätzel, en 1991, les cellules solaires sensibilisées par les colorants (DSSC) ont suscité de nombreuses recherches qui ont montré qu'elles présentent d'énormes perspectives et sont une technologie photovoltaïque économiquement viable. Élaborées au moyen des méthodes peu coûteuses, composées de matériaux hybrides organique-inorganique respectueux de l'environnement et jouissant d'une grande flexibilité, ces cellules affichent une efficacité de conversion très modeste atteignant 14,5%.

Cette thèse s'inscrit dans le contexte global d'améliorations des performances des cellules DSSC via la conception de nouveaux colorants à base de Thiéno[2,3-b]indole. L'approche adoptée est une approche théorique basée sur les méthodes de la chimie quantique DFT et sa variante dépendante du temps TD-DFT.

L'étude des propriétés géométrique, électroniques, optiques et photovoltaïques des différentes molécules conçues par substitution et/ou par greffage au niveau des structures, D- π -A/D-A1-A, des molécules de références à base de Thiéno[2,3-b]indole a mis en exergue une nette amélioration des performances des colorants de base synthétisés expérimentalement.

Au-delà de la détermination des propriétés optiques et électrochimiques des colorants isolés, nous avons modélisé le mécanisme d'adsorption sur la surface de semi-conducteur TiO₂. Les résultats ont montré que ces composés à base de Thiéno[2,3-b]indole peuvent être comme des sensibilisateurs prometteurs pour des applications dans les cellules photovoltaïques de type DSSC. Les évaluations expérimentales demeurent un objet de recherche complémentaire pour pouvoir valider ces prédictions théoriques.

Mots clés :

Dérivés de Thiénoindole ; DSSC ; DFT ; TD-DFT ; propriétés photovoltaïque ; Colorants organiques.

NEW π -CONJUGATED ORGANIC COMPOUNDS BASED ON THIENO[2,3-s]INDOLE FOR OPTOELECTRONIC AND PHOTOVOLTAIC DEVICES.

Abstract:

Since the first pioneering work by Grätzel in 1991, dye-sensitized solar cells (DSSCs) have been the subject of extensive research, which has shown that they have enormous potential as an economically viable photovoltaic technology. Developed using low-cost methods, composed of environmentally friendly organic-inorganic hybrid materials and with high flexibility, these cells show a very modest conversion efficiency of up to 14.5%.

This thesis is part of the global context of improving the performance of DSSCs through the design of new dyes based on thieno[2,3-b]indole. The approach adopted is a theoretical one based on DFT quantum chemical methods and its time dependent variant TD-DFT.

The study of the geometrical, electronic, optical and photovoltaic properties of the different molecules designed by substitution and/or grafting at the level of the structures, D- π -A/D-A1-A, of the reference molecules based on Thieno[2,3-b]indole highlighted a clear improvement of the performances of the experimentally synthesized basic dyes.

Beyond the determination of the optical and electrochemical properties of the isolated dyes, we modeled the adsorption mechanism on the TiO₂ semiconductor surface. The results showed that these thieno[2,3-b]indole based compounds can be used as promising sensitizers for applications in DSSCs. Experimental evaluations remain a subject of further research to validate these theoretical predictions.

Key Words:

Thienoindole derivatives ; DSSC ; DFT ; TD-DFT ; photovoltaic properties ; organic dyes.