



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mr **BRITEL Omar**

Soutiendra : le **Samedi 11/11/2023 à 10H00**

Lieu : **FSDM – Centre Visioconférence**

Une thèse intitulée :

Conception de nouvelles molécules organiques à base de carbazole pour des applications en optoélectronique

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 BOUACHRINE Mohammed	École Supérieure de Technologie, Khénifra	PES	Rapporteur & Examineur
Pr MAGHAT Hamid	Faculté des Sciences, Meknès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr TALEB Mustapha	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr EL HALLAOUI Menana	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examinatrice
Pr SFAIRA Mouhcine	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr BENZAKOUR Mohammed	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 π -conjugués utilisés dans les cellules solaires photovoltaïques à colorant (DSSC) et organiques (BHJ) font l'objet de nombreuses recherches pour mieux comprendre leurs propriétés photovoltaïques. Ce type de cellule peut atteindre des rendements de photoconversion allant jusqu'à 14 % pour les DSSC et 11,7 % pour les BHJ, ce qui en fait une excellente alternative aux cellules solaires à base de silicium.

Les travaux réalisés au cours de cette thèse s'inscrivent dans une perspective d'optimisation des cellules solaires à colorant (DSSC) ou organiques (BHJ). Pour y parvenir, la théorie de la fonctionnelle de la densité indépendante du temps, DFT, et la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps, TD-DFT, sont les outils de choix pour modéliser des systèmes de grands tailles et extraire de nombreuses informations sur leur structure, leurs orbitales moléculaires et leurs propriétés optiques et photovoltaïques afin de sélectionner des systèmes ayant des propriétés optoélectroniques intéressantes pour des applications dans le domaine photovoltaïque.

Les résultats des calculs théoriques obtenus dans cette thèse montrent que les nouveaux systèmes π -conjugués étudiés, basés sur le carbazole et ses dérivés, peuvent être utilisés dans le domaine des cellules solaires à colorant (DSSC) et à l'hétérojonction volumique (BHJ).

Mots clés :

Carbazole ; DSSC ; BHJ ; DFT ; TD-DFT ; propriétés optoélectronique.



Design of new carbazole-based organic molecules for optoelectronic applications

Abstract :

The π -conjugated systems used in dye-sensitized (DSSC) and organic (BHJ) photovoltaic solar cells are the subject of much research to better understand their photovoltaic properties. This type of cell can achieve photoconversion efficiencies of up to 14% for DSSCs and 11.7% for BHJs, making them an excellent alternative to silicon-based solar cells.

The work carried out in this thesis is in the context of the optimization of dye-sensitized (DSSC) or organic (BHJ) solar cells. For this purpose, the time independent density functional theory, DFT, and the time-dependent density functional theory, TD-DFT, are the tools of choice to model large systems and extract a lot of information about their structure, molecular orbitals, optical, and photovoltaic properties in order to select systems with interesting optoelectronic properties for applications in the photovoltaic field.

The results of theoretical calculations obtained in this thesis show that the new π -conjugated systems studied, based on carbazole and its derivatives, can be used in the field of dye-sensitized (DSSC) and bulk heterojunction (BHJ) solar cells.

Key Words :

Carbazole derivatives; DSSC; BHJ; DFT; TD-DFT; optoelectronic properties.