



## AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mr **SEKKAT Yassir**

Soutiendra : le **Vendredi 24/10/2025 à 10H00**

Lieu : **FSDM – Centre Visioconférence**

Une thèse intitulée :

« **Étude Théorique des propriétés optoélectroniques de nouveaux matériaux  $\pi$ -conjugués à base de phénothiazine 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
BENZAKOUR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Président
BEN ALLAL Laïla	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Rapporteur
BOUZAKRAOUI Said	Faculté des Sciences, Kénitra	PES	Rapporteur
SFAIRA Mouhcine	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Rapporteur
AMMARI Mohammed	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Examineur
EL KHATABI Souad	Ecole Nationale des Sciences Appliquées, Fès	PES	Examineur
TOUIMI BENJELLOUN Adil	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



## Résumé :

Les principaux avantages des cellules solaires sensibilisées à colorants sont leur flexibilité, leur faible coût, leur tolérance à la chaleur et la possibilité de les produire sur de grandes surfaces. Récemment, des avancées significatives dans le développement technologique et la compréhension fondamentale des cellules solaire sensibilisées aux colorants (DSSC) ont permis d'améliorer leur efficacité et leur stabilité. En fait, au cours des vingt dernières années, l'efficacité de la photoconversion des cellules photovoltaïques a atteint 14 %. Ces progrès sont dus non seulement à l'amélioration de la conception des cellules solaires, mais aussi à la création de meilleurs matériaux pour les donneurs d'électrons (D), les accepteurs (A) et les espaceurs ( $\pi$ ), ce qui permet de convertir plus efficacement l'énergie solaire en électricité.

Cette thèse de doctorat porte sur l'étude théorique de nouveaux semi-conducteurs organiques  $\pi$ -conjugués à base de phénouthiazine et de carbazole, qui sont souvent utilisés comme donneurs d'électrons dans les cellules solaires à colorant sensibilisé (DSSC). 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 grande taille et extraire de nombreuses informations sur leur structure, leurs orbitales moléculaires et leurs propriétés optiques et photovoltaïques afin de sélectionner des systèmes présentant 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  $\pi$ -conjugués étudiés, basés sur la phénouthiazine et le carbazole ainsi que sur leurs dérivés, présentent un équilibre favorable entre absorption, transmission de charge et stabilité. Ces systèmes pourraient donc être utilisés dans le domaine des cellules solaires à colorant (DSSC).

**Mots clés :** Phénouthiazine PTZ ; DSSC ; DFT ; TD-DFT ; Bande de conduction (BC)



## THEORETICAL STUDY OF THE OPTOELECTRONIC PROPERTIES OF NEW PHENOTHIAZINE AND CARBAZOLE-BASED $\pi$ -CONJUGATED MATERIALS FOR APPLICATIONS IN ORGANIC SOLAR COLORANT CELLS (DSSC).

### Abstract:

The main advantages of dye-sensitized solar cells are their flexibility, low cost, heat tolerance, and the possibility of producing them on large surfaces. Recently, important progress in technology and knowledge about dye-sensitized solar cells (DSSCs) has made them work better and last longer. In fact, over the last twenty years, the photoconversion efficiency of photovoltaic cells has reached 14%. This progress is due not only to improvements in solar cell design but also to the creation of better materials for electron donors (D), acceptors (A), and spacers ( $\pi$ ), enabling solar energy to be converted more efficiently into electricity.

This doctoral thesis looks at the theoretical study of new  $\pi$ -conjugated organic semiconductors made from phenothiazine and carbazole, which are often used as electron donors in dye-sensitized solar cells (DSSCs). Time-independent density functional theories (DFT) and time-dependent density functional theories and (TD-DFT) are used to model large systems and extract information about their structure, molecular orbitals, and optical and photovoltaic properties. This information is essential for selecting systems with attractive optoelectronic properties for photovoltaic applications.

The findings from the theoretical calculations in this thesis indicate that the new  $\pi$ -conjugated systems, which are based on phenothiazine and carbazole and their derivatives, have a good balance of absorption, charge transfer, and stability. These systems could therefore be used in the field of dye-sensitized solar cells (DSSCs).

**Key Words:** Phenothiazine PTZ; DSSCs; DFT; TD-DFT; Conduction Band (CB)