

AVIS DE SOUTENANCE

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

Mme : MALAK LAZRAK

Discipline : Chimie

Spécialité : Chimie physique et modélisation

Sujet de la thèse : Etude computationnelle des pigments photosensibles à base du triphénylamine pour des applications en cellules solaires

Formation Doctorale : Sciences et Génie de la matière, de la Terre et de la Vie.

Thèse présentée et soutenue le vendredi 19 mai 2023 à 10h à la Faculté Polydisciplinaire de Taza devant le jury composé de :

Nom Prénom	Titre	Etablissement	
Fatima LAMCHOURI	PES	Faculté Polydisciplinaire de Taza	Président
Mohamed HAMIDI	PES	Faculté des Sciences et Techniques d'Errachidia	Rapporteur
Amine MOUBARIK	PH	Faculté Polydisciplinaire de Beni Mellal	Rapporteur
Hanan TAYBI	PH	Faculté Polydisciplinaire de Taza	Rapporteur
Mounir EL HEZZAT	PH	Faculté des Sciences de Kenitra	Examineur
Si Mohamed BOUZZINE	PES	Centre Régional des Métiers de l'Education et de la Formation Errachidia	Co-Directeur de thèse
Hamid TOUFIK	PES	Faculté Polydisciplinaire de Taza	Directeur de thèse

Redouan EL-KHALFAOUY	Faculté Polydisciplinaire de Taza	Invité
----------------------	-----------------------------------	--------

Laboratoire d'accueil : Laboratoire Substances Naturelles, Pharmacologie, Environnement, Modélisation, Santé et Qualité de vie.

Etablissement : Faculté Polydisciplinaire de Taza

Résumé de la thèse

Les problèmes environnementaux sont parmi les principaux facteurs qui ont favorisé l'émergence des énergies renouvelables comme alternatives aux sources classiques. L'énergie solaire est l'une des technologies renouvelables les plus prometteuses en termes d'abondance. Cependant, plusieurs défis limitent son application à grande échelle. Les cellules solaires sensibilisées aux colorants (DSSCs) fournissent un concept alternatif technique et économique pour les dispositifs photovoltaïques actuels. A cet effet, nous avons mené une étude computationnelle des propriétés géométriques, électroniques et optiques des matériaux organiques dans l'objectif d'identifier de nouveaux sensibilisateurs qui seraient utilisés dans les DSSCs. Nous nous sommes intéressés à des colorants de type D- π -A, avec le triphénylamine comme donneur d'électrons (D). Les propriétés géométriques et optoélectroniques ont été obtenues en utilisant la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) et la DFT Dépendante du Temps (TD-DFT). L'importance de cette approche réside dans sa capacité à fournir une prédiction précise des propriétés des matériaux organiques. Cependant, la qualité des résultats de ces calculs dépend de manière significative des approximations à adopter pour définir la fonctionnelle de densité d'échange-corrélation inconnue. Dans ce sens, quatre approximations fonctionnelles ont été étudiées (B3LYP, BHandHLYP, CAM-B3LYP et LC ω PBE). Les résultats obtenus ont révélé que la fonctionnelle hybride B3LYP prédit avec grande précision les paramètres géométriques et électroniques. Ainsi, la fonctionnelle BHandHLYP est la meilleure parmi les fonctionnelles adoptées, qui reproduisent les propriétés optiques.

Ces fonctionnelles ont été adoptées afin d'étudier l'effet des groupes accepteurs sur les propriétés géométriques, optoélectroniques et de transfert de charges. Les résultats obtenus ont révélé que l'introduction du groupe acide cyanoacrylique a amélioré les performances du transfert de charges, la longueur d'onde d'absorption maximale ($\lambda_{\max} = 432,25$ nm), la tension en circuit ouvert (VOC = 6,456 eV) et l'efficacité de collecte de lumière (LHE = 0,973). Après l'adoption du groupe acide cyanoacrylique comme groupement accepteur, nous avons étudié les caractéristiques optoélectroniques de trois séries de colorants organiques à base du triphénylamine, avec une variation des π -espaceurs. A l'issue des résultats obtenus pour la première série de colorants D- π -A, il s'est avéré que l'introduction du groupe pyrrole a amélioré les propriétés du transfert de charges et a efficacement optimisé la force motrice d'injection des électrons ($\Delta G_{\text{inject}} = -2,238$ eV), la force motrice de régénération ($\Delta G_{\text{reg}} = -0,034$ eV), l'efficacité de collecte de la lumière (LHE = 0,928) et la tension en circuit ouvert (VOC = 1,869 eV). Afin d'améliorer d'avantage les propriétés des colorants à base du triphénylamine, nous avons conçu une nouvelle série de sensibilisateurs de type D- π - π' -A, en adoptant différents espaceurs π et π' .

Les résultats obtenus révèlent que l'ajout d'un fragment π -espaceur auxiliaire a un effet favorable sur l'amélioration des propriétés optoélectroniques et photovoltaïques des colorants sensibilisateurs. En outre, le colorant D2 à base de deux groupements pyrrole a présenté un équilibre parfait entre les propriétés clés des sensibilisateurs, notamment ΔG_{inject} (-2,269 eV), ΔG_{reg} (-0,207 eV) et VOC (1,854 eV). La dernière partie est consacrée à l'étude d'une nouvelle série de sensibilisateurs avec la variation des groupements π -espaceur à l'état adsorbé sur TiO₂ et en interaction avec l'électrolyte I-/I³⁻ dans le but de reproduire convenablement le rendement de la cellule. Les résultats globaux révèlent que les molécules conçues peuvent être considérées comme des matériaux prometteurs pour des applications en DSSCs. En particulier, le colorant M3 qui a démontré un équilibre optimal dans divers aspects. Par ailleurs une synthèse expérimentale reste un sujet de recherche ultérieur pour valider ces prédictions théoriques. Mots clés : DSSCs, Triphénylamine, Echange-corrélation, Colorant sensibilisateur, Accepteur, π -espaceur, Transfert de charges, DFT, TD-DFT.