



AVIS DE SOUTENANCE D'UNE THESE DE DOCTORAT

Le Doyen de la Faculté des Sciences a le plaisir d'informer le public qu'une soutenance de
thèse de Doctorat en

«Chimie Fondamentale et Appliquée»

aura lieu le 27/05/2024 à la Faculté des Sciences, Kénitra

La Thèse sera présentée par Mr IDRISSI ABDENNACER

Sous le thème :

**Design of thiophene-based molecules for hole transport in perovskite solar cells and
as donors in organic solar cells**

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement
TAKY MOHAMED	Président	Faculté des Sciences, Casablanca
CORNIL JERÔME	Rapporteur	Université de Mons, Belgique
HAMIDI MOHAMED	Rapporteur	FST, Errachidia
GHAILANE RACHIDA	Rapporteur	Faculté des Sciences, Kénitra
BOUACHRINE MOHAMMED	Examineur	Faculté des Sciences, Meknès
HABSAOUI AMAR	Examineur	Faculté des Sciences, Kenitra
BOUZZINE SI MOHAMED	Examineur	CRMEF, Errachidia
BOUZAKRAOUI SAID	Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Kénitra





Nom et Prénom : IDRISSI ABDENNACER
Date de soutenance : 27/05/2024
Directeur de Thèse : BOUZAKRAOUI SAID

Sujet de thèse :

Design of thiophene-based molecules for hole transport in perovskite solar cells and as donors in organic solar cells

Résumé:

Cette thèse se concentrant particulièrement sur les cellules solaires à pérovskite (PSCs) comme génération émergente dans le domaine des cellules photovoltaïques. L'étude théorique des matériaux transporteurs de trous (HTMs) à base de thiophène vise à faciliter la compréhension des paramètres principaux des PSCs sensibles à cette couche HTM. Les systèmes à base de thiophène sont étudiés comme alternatives potentielles au Spiro-OMeTAD en utilisant des méthodes DFT et TDDFT. L'objectif est de concevoir des molécules alliant efficacité, solubilité et stabilité, pour améliorer la performance des PSCs.

L'analyse initiale de neuf systèmes (T_{1-9}) a permis d'avoir des résultats sur la géométrie, l'efficacité, la stabilité et la solubilité. Grâce à leurs niveaux énergétiques HOMO-LUMO convenables, leurs planétés, la bonne distribution de charge sur le squelette de la molécule, ils peuvent tous être intégrés comme HTM dans les PSCs. L'ajout d'un second thiophène et l'intégration stratégique de quatre branches (T_{10-15}) ont révélé une bonne répartition de charge et une stabilité des niveaux d'énergie et d'absorption. Le remplacement symétrique de deux branches par des groupes méthoxy dans les molécules T_{16-18} a permis de résoudre le problème de répartition de charge présenté dans T_{14} , tout en conservant les paramètres majeurs nécessaires pour une intégration facile. En raison de leur absorption de lumière visible, de leur faible écart énergétique et de leur bonne solubilité, les systèmes contenant des groupements azométhine ont été envisagés comme donneurs dans les couches actives des cellules solaires organiques (CSO), qu'elles intègrent les accepteurs PCBM ou les non-fullerène Y6.

Mots-clés : Cellules solaires à pérovskite, Thiophène, HTM, cellules solaires organiques, DFT, TD-DFT.