

Avis de Soutenance
THESE DE DOCTORAT

Présentée par

Monsieur BRAHIM HACHLAF

Discipline : Chimie

Spécialité : Chimie physique et modélisation

Sujet de la thèse

Segment-by-Segment Engineering of Phenothiazine-Based D- π_1 -IA- π_2 -EA Sensitizers for Dye-Sensitized Solar Cells: A DFT/TD-DFT Investigation of External-Acceptor, π -Spacer, and Internal-Acceptor Modifications

Formation Doctorale " Sciences et Génie de la matière, de la Terre et de la Vie "

Thèse présentée et soutenue **le samedi 19 décembre 2026 à 09h30** au Centre des Conférences à la Faculté des Sciences et Techniques de Fès, devant le jury composé de :

NOM ET PRÉNOM	TITRE	ÉTABLISSEMENT	
El Mestafa EL HADRAMI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Président
RACHID MAMOUNI	PES	Faculté des Sciences d'Agadir	Rapporteur
BOUCHAIB IHSSANE	PES	Ecole Normale Supérieure de Rabat	Rapporteur
FATHELLAH LAGHRIB	MCH	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Rapporteur
FOUAD KHALIL	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Examineur
HICHAM ZAITAN	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Examineur
MOUHCINE FADIL	MCH	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Examineur
Taoufiq SAFFAJ	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Directeur de thèse

Laboratoire de recherche : Laboratoire de Chimie Organique Appliquée

Etablissement : Faculté des Sciences et Techniques de Fès



Résumé de la thèse

Les cellules solaires à colorant sensibilisateur (DSSCs in English) présentent un intérêt majeur grâce à leur faible coût et leurs bonnes performances sous éclairage diffus. Cependant, l'écart entre l'efficacité théorique et expérimentale des sensibilisateurs à base de phénothiazine reste insuffisamment adressé. Le colorant de référence PTZ-15, d'architecture D- π -A, ne délivre qu'un PCE de 3.49 %, loin de la limite de Shockley-Queisser et du record certifié de 30.0 %. Trois déficiences structurales en sont responsables : un gap HOMO-LUMO trop large ($E_{\text{gap}} = 2.297$ eV, $\lambda_{\text{max}} = 473.94$ nm), un transfert de charge intramoléculaire insuffisant ($f = 0.654$), et une recombinaison de charges mal supprimée à l'interface colorant/ TiO_2 . Cette thèse adopte le cadre D- π_1 -IAi- π_2 -EA et applique une stratégie d'ingénierie séquentielle, accepteur externe, π , puis accepteur interne, au niveau B3P86/6-31G(d,p) (état fondamental) et BMK/6-31G(d,p) (état excité), implémentés dans Gaussian 16 et analysés avec Multiwfn 3.8(dev). Dans la première étude, dix dérivés (A1-A10) par substitution de l'accepteur externe ont été caractérisés. L'ancre acide barbiturique (A10) a réduit E_{gap} à 1.826 eV et atteint un PCE prédit de 8.19 % ($J_{\text{sc}} = 13.46$ mA cm⁻², $V_{\text{oc}} = 0.717$ V, FF = 84.9 %), soit un quasi doublement de PTZ-15. Dans la deuxième étude, l'optimisation du π via l'unité cyclopenta[1,2-b:5,4 b']dithiophène (PTZ15AD6) a élargi la conjugaison, réduit E_{gap} à 1.660 eV, décalé λ_{max} à 632.67 nm et porté le PCE prédit à 15.01 %. Dans la troisième étude, l'ingénierie de l'accepteur interne s'est révélée l'étape la plus déterminante : IA5 affiche $E_{\text{gap}} = 1.48$ eV, $\lambda_{\text{max}} = 835.20$ nm (sur TiO_2), $f = 2.05$ et un moment dipolaire de 26.40 D, culminant à un PCE prédit de 26.89 % ($J_{\text{sc}} = 26.92$ mA cm⁻², $V_{\text{oc}} = 0.774$ V, FF = 85.8 %). La progression 4.35 % $\rightarrow$ 8.19 % $\rightarrow$ 15.01 % $\rightarrow$ 26.89 % démontre la puissance de la stratégie modulaire D- π_1 -IAi- π_2 -EA, directement transférable à d'autres architectures optoélectroniques organiques.

Mots clés : DSSCs ; Dérivés du phénothiazine ; propriétés optoélectroniques ; DFT ; TDDFT



Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques et Sciences Médicales