



Nom et Prénom : EL FAKIR ZOUHAIR
Date de soutenance : 25/10/2024
Directeur de Thèse : BOUZAKRAOUI SAID

Sujet de thèse :

Design of Carbazole-based Molecules for Hole Transport in Perovskite Solar Cells

Résumé:

Cette thèse explore les cellules solaires à pérovskite (PSCs) et l'usage des HTMs à base de carbazole pour améliorer leurs performances. Par l'application des méthodes DFT et TD-DFT, des alternatives au Spiro-OMeTAD sont étudiées pour développer des molécules alliant efficacité, solubilité et stabilité, renforçant ainsi la durabilité des PSCs

Dans la première partie des résultats de cette étude, huit molécules avec des squelettes étendus ont été examinées. Elles ont démontré des énergies de réorganisation des trous plus faibles, une réactivité chimique réduite, des durées de vie radiatives plus longues, une meilleure efficacité de collecte de lumière, et des moments dipolaires plus élevés, en faisant de fortes candidates pour les HTMs. Parmi elles, le composé avec deux cycles de pyridine (MP₂P₂M) s'est distingué, notamment en raison de son écart énergétique réduit à 2,74 eV. L'inclusion de groupes accepteurs dans les structures à double cycles a considérablement amélioré la conjugaison, le transport de charge et la solubilité, améliorant ainsi l'efficacité du transfert de charge.

Dans la deuxième partie de la thèse six molécules supplémentaires à base de carbazole substitué en positions 3,6 et 2,7 ont été étudié. Les résultats suggèrent que la plupart des systèmes étudiés possèdent de bonnes capacités de transport de trous. Cependant, les HTMs en position 2,7 pourraient être considérés comme les meilleurs systèmes en comparaison avec les variantes en position 3,6, bien que M₂ ait particulièrement démontré des propriétés très favorables de transfert de trous.

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

Abstract:

This thesis investigates the application of carbazole-based HTMs to enhance the performance of perovskite solar cells (PSCs). DFT and TD-DFT techniques are used to investigate substitutes for Spiro-OMeTAD to create compounds with stability, solubility, and efficiency that will increase PSC sustainability. The first section of the study's findings looked at eight compounds having long backbones. Strong candidates for HTMs, they showed lower hole reorganization energies, less chemical reactivity, longer radiative lifetimes, improved light harvesting efficiency, and greater dipole moments. The molecule with two pyridine rings (MP₂P₂M) was unique among them all because of its decreased energy gap to 2.74 eV. Charge transfer efficiency was greatly increased by the addition of acceptor groups to the double-ring structures, which also enhanced conjugation, charge transport, and solubility. Six further compounds based on carbazole substitutions at positions 3.6 and 2.7 were examined in the thesis' second section.