

Etude théorique des nouveaux systèmes organiques conjugués pour l'application en photovoltaïque

K. Sail¹, M. H. Gafour² & G. Bassou¹

¹ *Laboratoire de Microscopie, Microanalyse de la Matière et Spectroscopie Moléculaire (L2MSM), Université de Sidi Bel Abbés, Algérie*

² *Institut des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie, Département de chimie, Centre universitaire de Rélizane, Algérie*

Les cellules «tout organique» ont suscité un engouement considérable, qui s'est traduit par l'important effort de recherche principalement orienté vers l'amélioration de l'efficacité de conversion.

Dans la présente étude, le calcul par la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) a été effectué pour les polymères conjugués à base de thiophène. Dans un premier temps, nous avons effectué des calculs utilisant la base B3LYP/6-31G (d,p) dans le but d'obtenir les conformations optimisées les plus stables. Les calculs ont été réalisés en utilisant le programme GAUSSIAN-09. La visualisation des molécules après optimisation de la géométrie a été effectuée par le programme GaussView 05.

Pour les conditions aux limites périodiques (PBC) du système unidimensionnel (1D) et bidimensionnel (2D), la fonctionnelle d'échange-corrélation Perdew-Burke-Eenzerhof (PBE) [2] de l'approximation du gradient généralisé (GGA) a été utilisée. Les énergies HOCO, LUCO et l'énergie de Gap des molécules étudiées sont calculées et reportées.

Pour la détermination des propriétés optiques, l'énergie d'excitation et de spectres d'absorption UV-Vis des transitions singulier-singulier des molécules étudiées ont été simulées par la méthode TD-DFT.

Nos résultats prouvent que ce procédé de calculs théoriques peut être utilisé pour prévoir les propriétés optoélectroniques d'autres composés organiques, et concevoir plus loin des futurs matériaux pour l'application aux cellules solaires à base de polymères conjugués. En outre, le calcul dans les conditions aux limites périodiques (PBC) démontre une approche puissante et peut être employé comme système modèle pour comprendre la relation entre les propriétés opto-électroniques et la structure moléculaire.

1. Perdew, J P, Burke, K, Ernzerhof, M, Generalized gradient approximation made simple, Phys. Rev. Lett., 77, 3865-3868, 1996.