

Abstract:

This research employs density functional theory (DFT) to design and investigate small organic molecules for applications in photovoltaics, molecular electronics, and photodynamic therapy (PDT). The first part examines dithienosilole-based non-fullerene acceptors, where end-capped group modification improves optoelectronic properties, with D9 and D10 showing the best performance for organic solar cells. The second part studies the ESIPT process of 3-hydroxyflavone in acetonitrile/benzene mixtures, highlighting the influence of solvent polarity on hydrogen bonding and tautomerization. The final part evaluates aurone derivatives as potential photosensitizers for PDT, demonstrating promising singlet oxygen generation ability. Overall, the work highlights DFT as a powerful tool for rational molecular design in energy, optoelectronic, and biomedical application.

Résumé:

Ce travail utilise la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour concevoir et étudier des petites molécules organiques destinées au photovoltaïque, à l'électronique moléculaire et à la thérapie photodynamique (PDT). La première partie analyse des accepteurs non fulleréniques à base de dithiénylosilole, où la modification des groupes terminaux améliore l'absorption, le transfert de charge et l'alignement des orbitales frontières, les dérivés D9 et D10 présentant les meilleures performances pour les cellules solaires organiques. La deuxième partie étudie le processus ESIPT de la 3-hydroxyflavone dans des mélanges acétonitrile/benzène, montrant l'influence de la polarité du solvant sur les liaisons hydrogène et la tautomérisation. Enfin, la dernière partie évalue des dérivés d'aurone comme photosensibilisateurs pour la PDT, révélant une forte capacité de génération d'oxygène singulet. Globalement, cette étude met en évidence la puissance prédictive de la DFT pour la conception rationnelle de molécules dans les domaines de l'énergie, de l'optoélectronique et de la biomédecine.