



Pôle des Etudes Doctorales
Centre des Etudes Doctorales
Sciences et Techniques et Sciences Médicales

AVIS DE SOUTENANCE DE THESE DE DOCTORAT

Monsieur RGHIOUI Hamza

**Présentera ses travaux de recherche en vue de l'obtention du
Doctorat**

**Formation Doctorale : Sciences et Techniques de l'Ingénieur
Discipline : Physique
Spécialité : Matériaux et Energies Renouvelables**

**Le 27/09/2025 à 10H30 à la Salle des Conférences, Bâtiment F
Faculté des Sciences et Techniques de Tanger
Sous le thème**



**Étude des matériaux bidimensionnels de type Triphosphides pour le
stockage et la conversion de l'énergie : Simulation à l'échelle atomique**

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Etablissement	Qualité
Pr. DIANI Mustapha	FST de Tanger, UAE	Président
Pr. EL FARH Larbi	Faculté des Sciences d'Oujda, UMP	Rapporteur
Pr. EL KHAMKHAMI Jamal	Faculté des Sciences de Tétouan, UAE	Rapporteur
Pr. JBILOU Mohammed	FST de Tanger, UAE	Rapporteur
Pr. ACHAHBAR Abdelfattah	Faculté des Sciences de Tétouan, UAE	Examineur
Pr. SETTI Larbi	Faculté Polydisciplinaire de Larache, UAE	Examineur
Pr. ZANOUNI Mohamed	FST de Tanger, UAE	Directeur

Structure de recherche : Materials, Systems and Energy Engineering Laboratory (MaSEEL).

Résumé



Les préoccupations environnementales croissantes et la demande mondiale en énergie imposent de trouver des solutions dans le domaine des énergies renouvelables et du stockage efficace. Le développement de matériaux innovants, notamment de structures 2D, offre des perspectives prometteuses pour les électrodes haute performance dans les batteries et les composants fonctionnels des cellules solaires. Dans cette thèse, une approche computationnelle a été utilisée pour évaluer le potentiel de deux Triphosphides bidimensionnels (SbP_3 et GaP_3), comme matériaux d'anode dans les batteries à ions de métaux alcalins et comme couches de transport de charge dans les cellules solaires à pérovskite. En mettant l'accent sur la stabilité, les propriétés électroniques et les performances électrochimiques, l'étude évalue l'adéquation ces deux monocouches en tant que matériaux d'anode dans les batteries Li-ion, Na-ion et K-ion, en utilisant la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) via Quantum ESPRESSO. La capacité de stockage de la monocouche GaP_3 s'est avérée supérieure à celle de la monocouche SbP_3 , ce qui indique un potentiel supérieur de GaP_3 pour le stockage des ions alcalins. En revanche, la monocouche SbP_3 présente des barrières énergétiques plus faibles pour les trois ions que GaP_3 , ce qui implique une mobilité ionique plus élevée et donc de meilleures performances de la batterie. Cette étude suggère que ces deux monocouches présentent un potentiel important en tant que candidat prometteur pour le matériau d'anode dans les batteries à ions de métaux alcalins. De plus, l'utilisation de la monocouche SbP_3 comme couche de transport d'électrons (ETL) dans les cellules solaires à pérovskite a été étudiée. A l'aide de simulations SCAPS-1D, les performances de la cellule solaire proposée ont été évaluées en termes de tension en circuit ouvert (V_{oc}), de densité de courant de court-circuit (J_{sc}), de facteur de forme (FF) et de rendement de conversion de puissance (η). Les résultats obtenus montrent que la monocouche SbP_3 pourrait constituer un candidat prometteur pour une intégration en tant que couche ETL dans les cellules solaires à pérovskite.

Mots clés: DFT, Matériaux 2D, Triphosphides, SbP_3 , GaP_3 , Anode, Batteries à Ions de Métaux Alcalins, Cellule Solaire à Pérovskite.