

# Streszczenie rozprawy doktorskiej

*Miłosz Martynow*

Tytuł rozprawy w języku polskim: Analiza struktur, właściwości elektronowych i widma absorpcji hybrydowych materiałów perowskitowych i molekularnych fotoczułaczy za pomocą teorii funkcjonału gęstości i metod superkomputerowych

Tytuł rozprawy w języku angielskim: Density Functional Theory investigation of the structures, electronic properties and absorption spectrum of organic-inorganic hybrid perovskites and molecular photosensitizers using High Performance Computing

Celem niniejszej rozprawy doktorskiej w formie autoreferatu, jest opisanie właściwości strukturalnych, elektronowych i optycznych dwóch rodzajów materiałów z wysokim potencjałem wykorzystania jako fotoczuła część urządzeń produkujących zieloną energię. Pierwszy to organiczno-nieorganiczny hybrydowy materiał perowskitowy  $\text{MAPbI}_3$  wraz z jego domieszkowaną bromem wersją  $\text{MAPb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ . Drugi typ materiału to molekularny fotokatalizator w czterech wersjach:  $\text{RuPdCl}_2$ ,  $\text{RuPtI}_2$ ,  $\text{RuPtCl}_2$ ,  $\text{OsPtI}_2$ , wraz z ich dwoma prekursorami  $[(\text{tbbpy})_2\text{Ru}(\text{tpphz})]^{2+}$  i  $[(\text{tbbpy})_2\text{Os}(\text{tpphz})]^{2+}$ . W obydwu przypadkach teoria funkcjonału gęstości wraz z jej zależną od czasu wersją zostały wykorzystane do analizy wyżej wymienionych właściwości na poziomie kwantowym. Opisane właściwości optyczne dobrze pokrywają się z wynikami eksperymentalnymi, zaś wszystkie obliczenia dostarczyły opisu relacji pomiędzy strukturami a wymienionymi właściwościami. W skrócie, dla materiałów perowskitowych, w dwóch publikacjach naukowych został opisany wpływ i czułość zmian geometrii na ich optyczne właściwości. Stosunkowo mała zmiana w geometrii nieorganicznej części perowskitu i/lub orientacji jej organicznej  $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$  części, może doprowadzić do bardzo silnych zmian w widmie absorpcji. Dodatkowo, została opisana korelacja pomiędzy domieszką bromu a właściwościami materiału jak na przykład przerwa energetyczna. Następne dwie publikacje naukowe, tyczą się analizy widma absorpcji, energii emisji fotonu oraz korelacji pomiędzy zmianami strukturalnymi a właściwościami singletowych oraz trypletowych stanów wzbudzonych molekularnych fotokatalizatorów. Poprzez analizę korelacji estymowano trendy efektywności transportu elektronowego każdej wyżej wymienionej molekule fotokatalitycznej. W związku z tym, że otrzymanie zaprezentowanych wyników jest bardzo kosztowne obliczeniowo, wykorzystanie technik superkomputerowych było koniecznym wymogiem. Tak też niniejsza dysertacja jak i opisanie w niej publikacje przedstawiają protokoły obliczeniowe, w których zawarte są zestawy optymalnych parametrów obliczeniowych (bazy funkcyjne, gęstości k-points, poziomy energii odcięć itp.) oraz metodologie obliczeniowe (oprogramowanie, metoda symulacji domieszkowania, sposób analizy stanów wzbudzonych itp.), które mogą być wykorzystane w podobnych systemach.