

## DESCRIPTION OF DOCTORAL DISSERTATION

**The Author of the doctoral dissertation:** Aoussaj Sbai

**Title of doctoral dissertation:** Theoretical Investigation of Light-Driven Electron Transfer in Molecular Photosensitizers

**Title of doctoral dissertation in Polish:** Teoretyczne Badanie Napędzanego Światłem Transferu Elektronów w Molekularnych Fotosensybilizatorach

**Language of doctoral dissertation:** English

**Supervisor:** Prof. dr hab. Julien Guthmuller

**Date of doctoral defense:**

**Keywords of doctoral dissertation in Polish:** TD-DFT, DLPNO-STEOM-CCSD, fotouczulacze, dwuskładnikowa, napędzana światłem ewolucja wodoru, warstwy konwersji w dół, szybkości fotofizyczne, barwniki BODIPY

**Keywords of doctoral dissertation in English:** TD-DFT, DLPNO-STEOM-CCSD, photosensitizers, two-component light-driven hydrogen evolution, down conversion layers, photophysical rates, BODIPY dyes

**Summary of doctoral dissertation in Polish:**

Niniejsza rozprawa doktorska bada właściwości fotofizyczne układów do pozyskiwania energii odnawialnej z wykorzystaniem symulacji chemii kwantowej. Głównym celem jest wyjaśnienie, w jaki sposób dominujące ścieżki transferu elektronów wpływają na wydajność konwersji energii, zgodnie z obserwacjami przedstawionymi w uprzednio opublikowanych badaniach eksperymentalnych.

Struktura rozprawy jest następująca. Rozdział 2 stanowi przegląd literatury dotyczącej barwników typu BODIPY. Rozdział 3 przedstawia podstawy teoretyczne, w tym równania rządzące oraz założenia leżące u podstaw metod ab initio i teorii funkcjonału gęstości, a także opis populacji stanów elektronowych i związanych z nimi stałych szybkości. Rozdziały 4 i 5 prezentują wyniki obliczeń dotyczących fotoindukowanego transferu elektronów w neutralnych i zredukowanych barwnikach BODIPY istotnych dla produkcji wodoru. Rozdział 6 ocenia przydatność modeli adiabatycznych i wibronicznych w przewidywaniu zachowania fotofizycznego tych układów. Rozdział 7 analizuje charakterystyki absorpcyjne i emisyjne wybranych warstw konwersji w dół przeznaczonych do zastosowań fotowoltaicznych. Ostatni rozdział podsumowuje główne wyniki oraz omawia rolę ścieżek transferu ładunku i efektów skrętnych cząsteczki w badanych układach energii odnawialnej.

## **Summary of doctoral dissertation in English:**

This thesis investigates the photophysical properties of renewable energy harvesting systems using quantum chemistry simulations. The primary objective is to elucidate how dominant electron-transfer pathways affect energy conversion efficiency, as observed in previously reported experimental studies.

The thesis is organized as follows. Chapter 2 reviews the literature on BODIPY dyes. Chapter 3 presents the theoretical framework, including the governing equations and assumptions underlying *ab initio* and density functional theory methods, as well as the population of electronic state and associated rate constants. Chapters 4 and 5 report computational results on photoinduced electron transfer in neutral and reduced BODIPY dyes relevant to hydrogen production. Chapter 6 evaluates the validity of adiabatic and vibronic models for predicting the photophysical behavior of these systems. Chapter 7 examines the absorption and emission characteristics of selected down-conversion layers for photovoltaic applications. The final chapter summarizes the main findings and discusses the roles of charge-transfer pathways and molecular torsional effects in the renewable energy systems under study.