

# **БОР ДОТИРАНЕ И ТОПОЛОГИЯ – НОВИ СТРАТЕГИИ ЗА ДИЗАЙН НА ОРГАНИЧНИ ФОТОВОЛТАИЧНИ МАТЕРИАЛИ**

**ръководител: гл. ас. д-р Юлия Романова**

**Факултет по химия и фармация**

Проектът е посветен на молекулното моделиране на материали за органичните соларни клетки, работещи на принципа на синглетно разцепване и търсенето на нови концептуални подходи при дизайна им. Изследването обхваща неохарактеризирани в този аспект бор-дотирани антрацени и фенантрени в комбинация с висок клас квантово-химични методи за описание на молекулите. Получените резултати разкриват, че бор-дотирането на полициклични ароматни въгледороди и вариация в молекулната структура (топология) са успешни стратегии за дизайн на нови хромофори за синглетно разцепване. Разкрита е взаимовръзката между молекулната структура, степента на отвореност на електронната обвивка (дирадикаловия характер) и способността за синглетно разцепване.

Наблюдаваните зависимости са обяснени посредством концепцията на Hückel за ароматни въгледороди, теорията на Clar и Kekulé. Въз основа на теоретично предсказаните фотофизични характеристики е избран набор от 5 бор-дотирани съединения, които представляват потенциални материали за приложение в органичните соларни клетки. Някой от най-добрите кандидати обаче са едни от най-нестабилните в разгледаната серия. Ето защо е предложена стратегическа химична функционализация, която цели допълнителна фина настройка на капацитета за синглетно разцепване и стабилизацията им чрез добавяне на подходящи заместители при борните центрове или при въглеродни центрове със значителна спинова плътност. Подходящите параметри на структури, в които борът замества третичен въглерод загатват, че бор-дотирани графени и въглеродни нанотръби също могат да се разглеждат като потенциални SF материали. Установена е надеждна квантово-химична методология за молекулен дизайн на SF хромофори, която включва много конфигурационни RASSCF/RASPT2 методи.

Резултатите от проекта са представени на четири международни и една национална научни конференции. Изследването е публикувано в списание от ниво Q1 и още една статия е в процес на подготовка. За реализацията на проекта дейно участие и принос имат студенти от магистърско и бакалавърско ниво.