**Влияние структуры антенного лиганда на оптические свойства и электронное строение красителей на основе циклометаллированных комплексов Ru (II) с сопряженными 2-арилимидазолами**

***Мишуринский С.А.1, Верзун С.А.1, Феоктистова А.В.1, Елин А.Д.1, Сиротин М.А.1,2, Лаврова М.А.1***

*Студент, 6 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*2Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия*

*E-mail:*[*sergei.mishurinskii@chemistry.msu.ru*](mailto:sergei.mishurinskii@chemistry.msu.ru)

Комплексы рутения (II) используются в качестве сенсибилизаторов в солнечной ячейке Гретцеля и на данный момент демонстрируют рекордные значения эффективности работы ячейки. В состав красителя входят два типа лигандов: якорные, обеспечивающие связь с поверхностью полупроводника, и донорные, являющиеся донорами электронной плотности. В красителях-«чемпионах» в качестве якорных лигандов используется 4,4`-дикарбокси-2,2`-бипиридин, а в качестве донорных - монодентатные -NCS группы, комплексы с которыми лабильны, что приводит к быстрому падению эффективности ячейки. Замена изотиоцианата на бидентатный циклометаллированный лиганд позволяет повысить инертность комплексов, но в то же время приводит к ухудшению оптических и электрохимичесих свойств красителя, поэтому дизайн лигандов остается актуальной задачей. В качестве донорных лигандов в данной работе выбраны 2-арилимидазолы, которые легко можно модифицировать различными заместителями. Целью работы является синтез и исследование новых циклометаллированных комплексов рутения (II) с 4,4`-дикарбокси-2,2`-бипиридином и различными сопряжёнными 2-арилимидазолами.

На первом этапе работы синтезирована и исследована серия из пяти комплексов состава Ru(dmdcbp)2(L-X)PF6, где Х - различные заместители в арильном фрагменте 1-фенил-2-арилбензимидазола (-H, -Cl, -NMe2, -NO2, -OMe). Строение и состав полученных комплексов установлены методами ЯМР, MALDI, РСА, а оптические и электрохимические свойства изучены с помощью ЦВА, ЭСП и люминесцентной спектроскопии. При увеличении донорности заместителя происходит батохромный сдвиг максимумов поглощения и испускания и уменьшение окислительно-восстановительного потенциала. Изучение кинетики испускания показало, что оно происходит из триплетного состояния, а время жизни возбуждённого состояния уменьшается при увеличении донорности заместителя. Фотоаноды, сенсибилизированные данными соединениями, протестированы в ячейке Гретцеля. Наибольшую эффективность продемонстрировал комплекс с двумя метокси-группами. Результаты исследований опубликованы [1].

Далее в качестве объектов исследования были выбраны соединения с заместителями, оказывающими иной эффект на электронную структуру красителя (σ-донор -CH3, σ-акцептор –CF3, σ-акцептор и π-донор –F, и линейный σ- и π-акцептор -CN). При исследовании данной серии были выявлены аналогичные первой закономерности.

Еще одним подходом к улучшению светопоглощающих характеристик является увеличение сопряженной системы донорного лиганда. Для изучения влияния сопряженной системы лиганда на оптические и электрохимические свойства комплексов синтезированы и исследованы комплексы с различными 1-фенил-2-арилфенантроидазолами в качестве донорных лигандов. Оказалось, что увеличение сопряженной системы приводит к незначительному увеличению коэффициентов экстинкции наряду с небольшим гипсохромным сдвигом максимумов поглощения.

**Литература**

1. Lavrova M. A. et al. Cyclometalated Ru (ii) complexes with tunable redox and optical properties for dye-sensitized solar cells //Dalton Transactions. – 2020. – Т. 49. – №. 46. – С. 16935-16945.