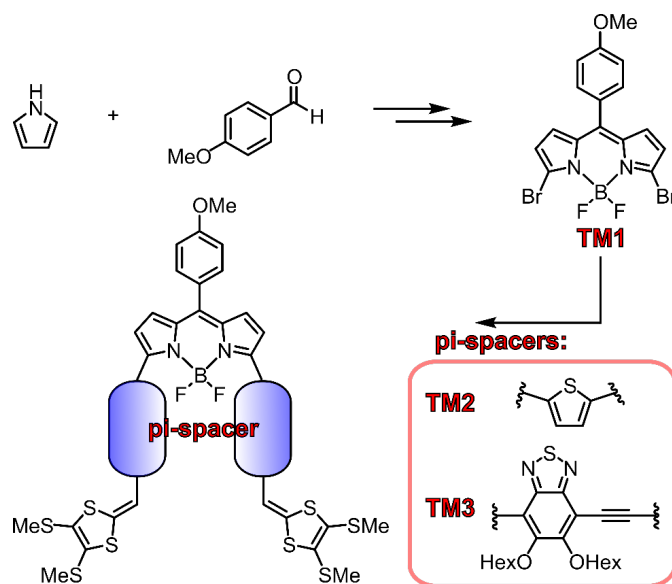


Eksempler på tidligere projekter i Steffen Bährings gruppe

Bachelor project: *Design and Synthesis of Tetrathiafulvalene-extended BODIPY for Organic Solar Cells*
(Design og syntese af tetrathiafulvalene-forlænget BODIPY til organiske solceller)

Udføres af: xxx

Vejleder: Steffen Bähring



By combining the strongly absorbing BODIPY dye (TM1) with the electron-donating tetrathiafulvalene (TTF), new donor molecules for Organic Solar Cells will be developed. In this manner, previous bachelor projects set the foundation for this project. Herein, the underlying hypothesis is to design and synthesize the optimal pi-spacer between the extended TTF-BODIPY molecule. Two spacers are to be synthesized and used for the final ex-TTF BODIPYs TM2 and TM3. This system will be explored as Donor molecule for Bulk-Heterojunction Solar Cells.

The synthesis route covers >7 steps where the final 2-3 steps are novel compounds. Most of the synthesis route can be derived from previous bachelor projects. Attached references covers the main parts of the synthesis route. Each compound should be isolated as a pure compound and analyzed using NMR, MS, and IR. All Target Molecules (TMs) should be analyzed using absorption spectroscopy and cyclic voltammetry and their optical band gap and HOMO-LUMO energies be determined.

In collaboration with Professor Morten Madsen at the Mads Clausen Institute in Sønderborg, both TM2 and TM3 will be tested in a Solar Cell device.

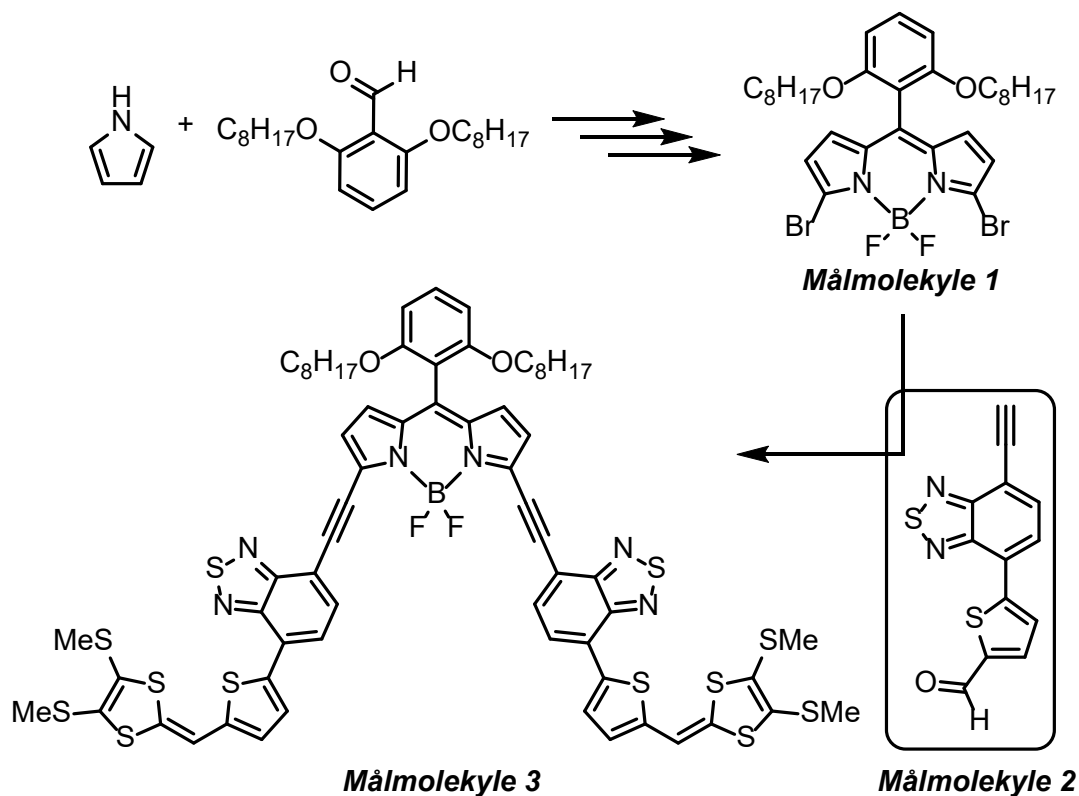
[1] E. V. Vinogradova, Y. Y. Enakieva, Y. G. Gorbunova and A. Y. Tsivadze, *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces* 2009, 45, 529-534. [2] N. L. Bill, J. M. Lim, C. M. Davis, S. Bähring, J. O. Jeppesen, D. Kim and J. L. Sessler, *Chemical Communications* 2014, 50, 6758-6761. [3] D. F. O'SHEA, R. D. Sommer, M. Taniguchi and J. S. Lindsey, *X-ray Structure Analysis Online* 2020, 36, 21-22. [4] S. Madhu, M. R. Rao, M. S. Shaikh and M. Ravikanth, *Inorganic Chemistry* 2011, 50, 4392-4400. [5] D. Cheng, W. Zhao, H. Yang, Z. Huang, X. Liu and A. Han, *Tetrahedron Letters* 2016, 57, 2655-2659.

Bachelorprojekt: Syntese og undersøgelse af forlænget tetrathiafulvalene-BODIPY til solceller

Synthesis and Investigation of ex-TTF-BODIPY for Solar Cells

Udføres af: xxx

Vejleder: Steffen Bähring

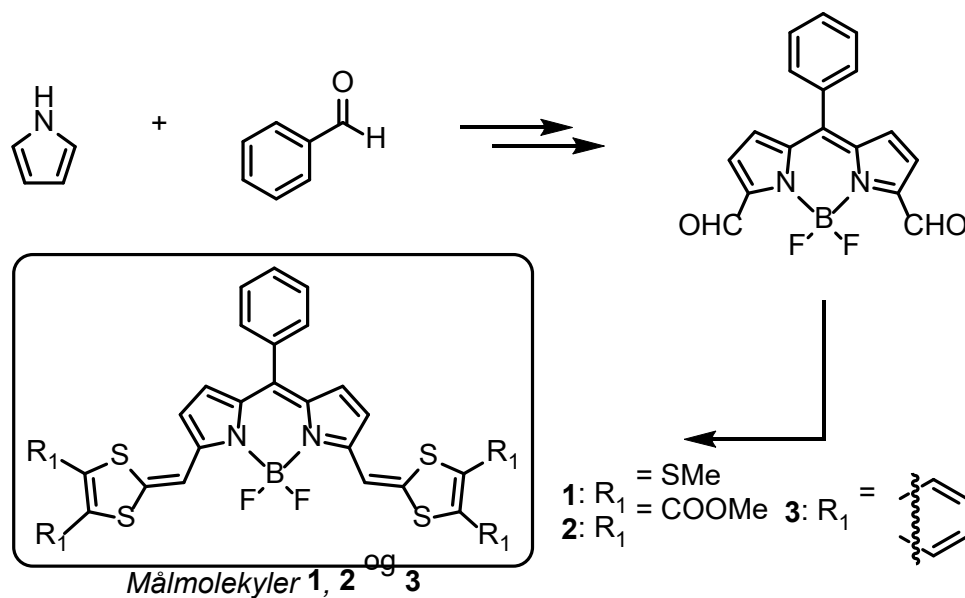


- 1) Syntese (fremstille målmolekylerne ved hjælp af Fahrenholz og Løgstrup Bachelor projekt 2021.
- 2) Karakterisering: NMR, MS, IR, UV/vis absorptions- og emissions-spektrofotometri.
- 3) Bestemmelse af oxidationspotentialer og HOMO/LUMO energier vha. cyklisk voltammetri og bestemmelse af det optiske båndgab.

Bachelorprojekt: Optimering af syntesen af exTTF BODIPY samt modifikation af donor-acceptor egenskaber

Udføres af: xxx

Vejleder: Steffen Bähring



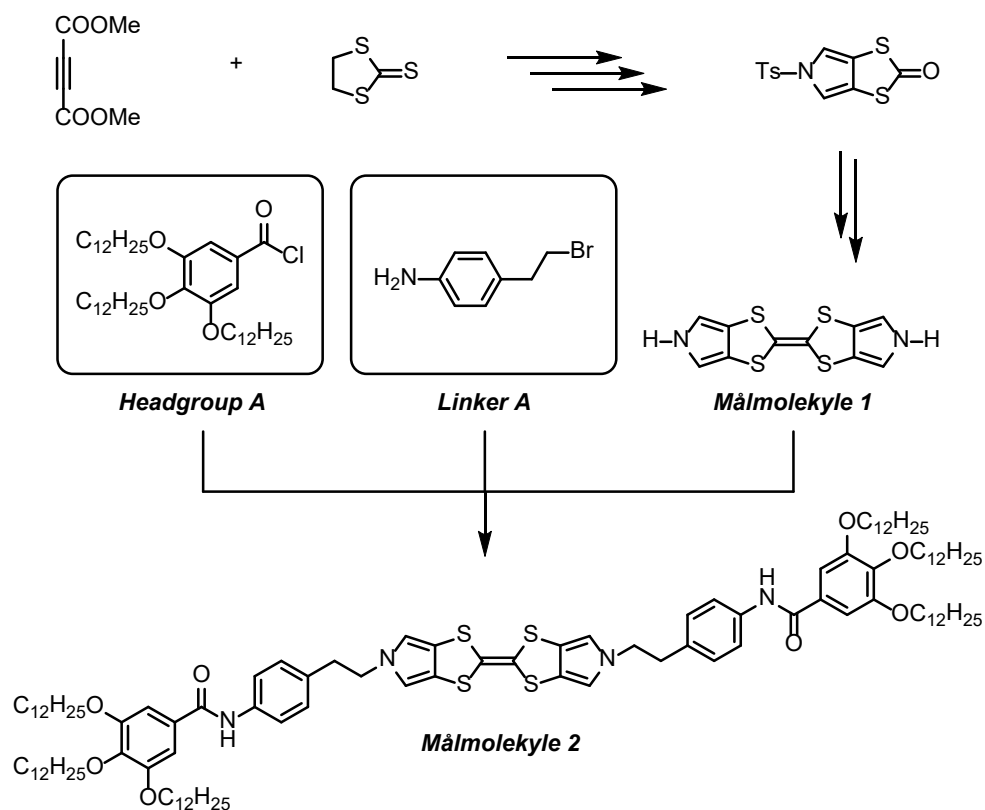
- 1) Syntese og optimering af målmolekyle 1 samt syntese af nye målmolekyler 2 og 3 ved hjælp af Bill *et al. Chem. Commun.*, **2014**, 50, 6758–6761.
- 2) Karakterisering: NMR, MS, IR, UV/vis absorptions- og emissions-spektrofotometri.
- 3) Bestemmelse af oxidationspotentialer og HOMO/LUMO-energier vha. cyklisk voltammetri og bestemmelse af det optiske båndgab.
- 4) Spektrofotometriske undersøgelser af kemiske oxidationsforsøg.

Bachelorprojekt: Syntese og undersøgelse af Redox-aktiv supramolekylær polymer

Synthesis and Investigation of Redox-Active Supramolecular Polymer

Udføres af: xxx

Vejleder: Steffen Bähring



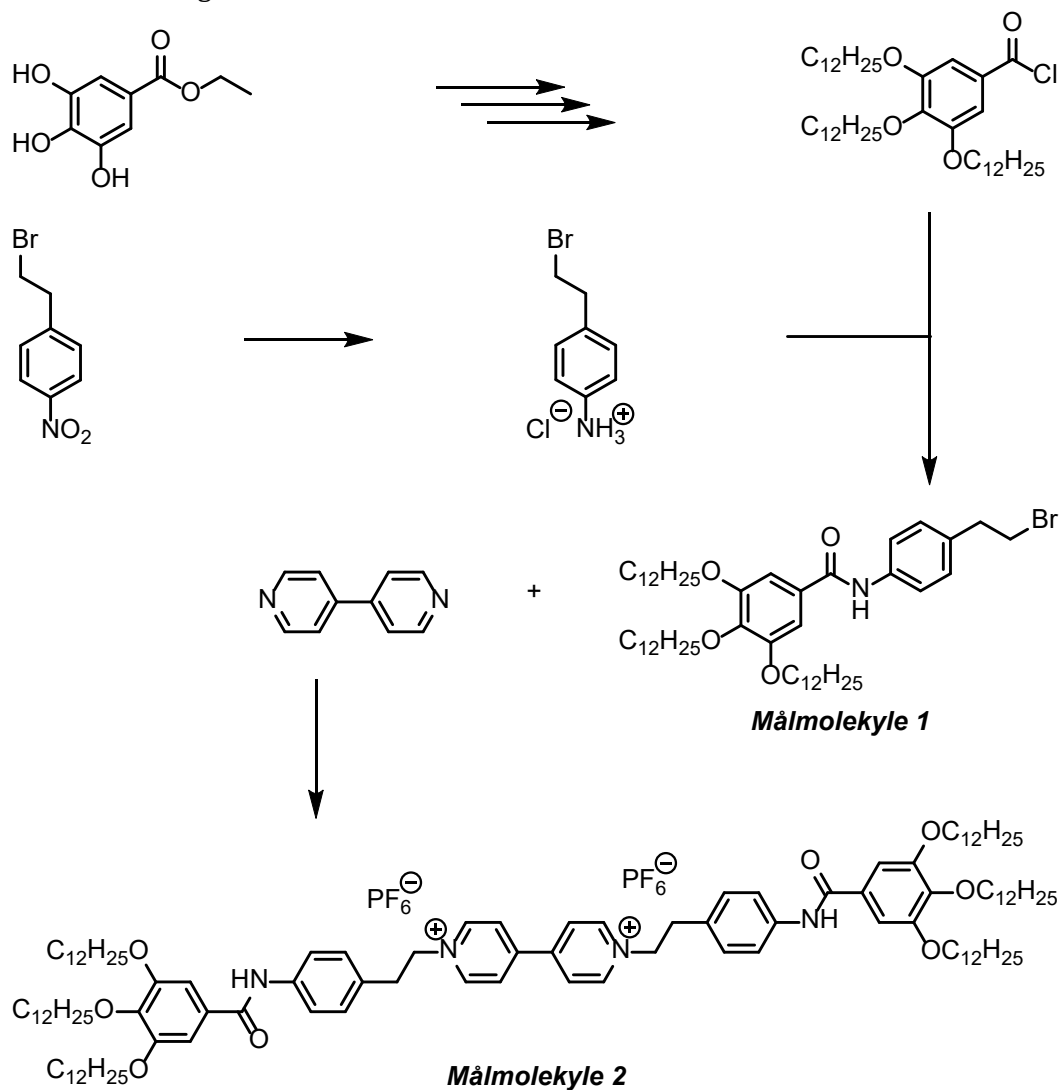
- 1) Syntese (fremstille målmolekyleterne ved hjælp af Jeppesen *et al.* *J. Org. Chem.* **2000**, 65, 18, 5794–5805 og Achalkumar *et al.* *J. Org. Chem.* **2013**, 78, 2, 527–544
- 2) Karakterisering: NMR, MS, IR, UV/Vis, mikroanalyse.
- 3) Bestemme oxidations potentialer vha. cyklisk voltammetri samt kemisk oxidation.
- 4) Undersøge aggregering vha. variabel temperatur- og variabel koncentrations-studier ved UV-Vis-nIR absorption og NMR.

Bachelorprojekt: Syntese og undersøgelse af Redox-aktiv supramolekylær polymer

Engelsk titel: Synthesis and Investigation of Redox-Active Supramolecular Polymer

Udføres af: xxx

Vejleder: Steffen Bähring



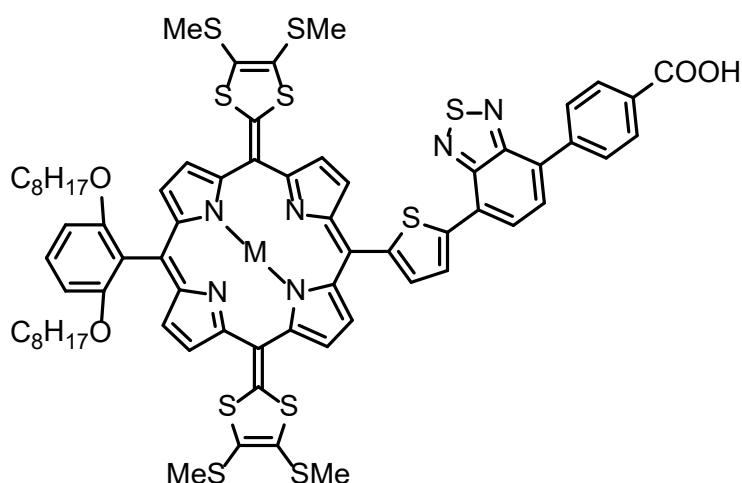
- 1) Syntese (fremstille målmolekylerne ved hjælp af Achalkumar *et al.* *J. Org. Chem.* **2013**, 78, 2, 527–544
- 2) Karakterisering: NMR, MS, IR, UV/Vis, mikroanalyse.
- 3) Bestemme reduktions potentialer vha. cyklisk voltammetri samt kemisk reduktion.
- 4) Undersøge aggregering vha. variabel temperatur- og variabel koncentrations-studier ved UV-Vis-nIR absorption og NMR.

Individuel Studieaktivitet (10 ECTS): Design og syntese af et forlænget tetrathiafulvalene-porphyrin system til *dye-sensitized* solceller

Design and Synthesis of an Extended-Tetrathiafulvalene-porphyrin system for Dye-Sensitized Solar Cells

Udføres af: xxx

Vejleder: Steffen Bähring



- 1) Ud fra ovenstående design foreslås mulige alternativer, hvor disse designs undersøges ved hjælp af computer-modellering med henblik på bestemmelse af HOMO-LUMO værdier, dipol moment og absorption.
- 2) Syntese af optimalt design på baggrund af pkt. 1 (vha. Bill *et al. J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135 (29), 10852–10862, Anderson *Tet. Lett.* **1992**, 33 (8), 1101–1104 og Smith *et al. Org. Biomol. Chem.* **2018**, 16, 3648–3654.
- 3) Karakterisering: NMR, MS, IR, UV/Vis, smeltepunkt.
- 4) Bestemme oxidations potentialer vha. cyklisk voltammetri.

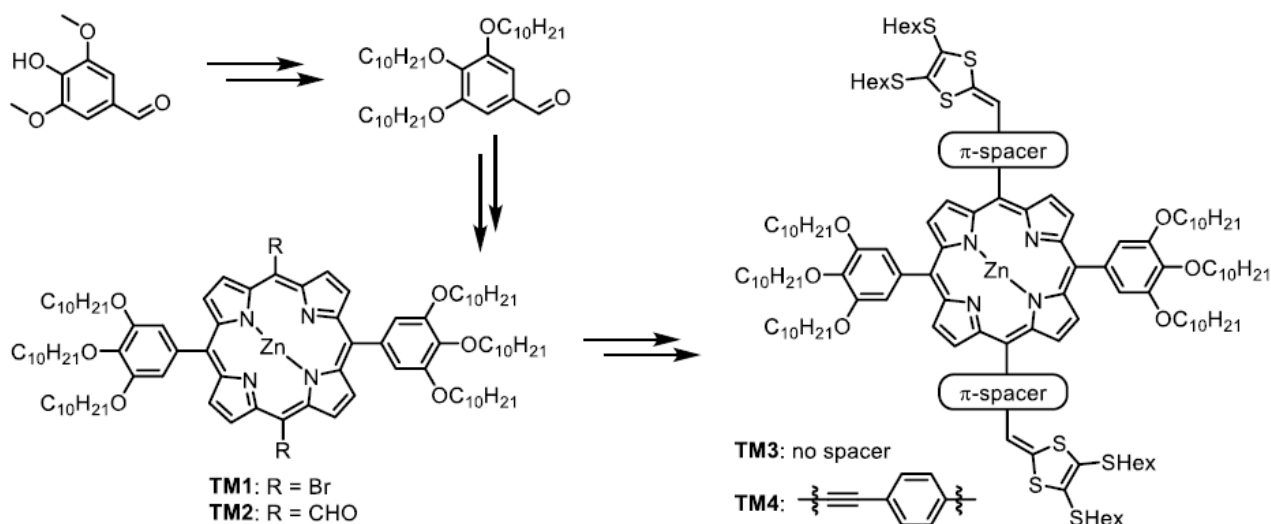
Individuel Studieaktivitet (10 ECTS): Modifikation af *meso*-position af porphyrin til porphyrin-forlænget tetrathiafulvalen som donormateriale til organiske solceller

Modification of meso-position of porphyrin for extended tetrathiafulvalene as donor material for organic solar cells

Udføres af: xxx

Vejleder: Steffen Bähring

By extending the electron-donating tetrathiafulvalene (TTF) with a porphyrin chromophore it is expected to produce strongly absorbing electron-donating molecules that are applicable for organic photovoltaics.



Each step should be characterized by MS, NMR and, when relevant, absorption-emission and cyclic voltammetry.

Target molecules (TM 3 and 4) will be initially screened as donor molecules in organic solar cells in collaboration with the group of Professor Morten Madsen at MCI, Sønderborg.