



GÖTEBORGS UNIVERSITET

# A Tale of Chaos and Colour

Influencing the photophysical properties and glass forming abilities of BODIPY dyes *via* structural modification

**Clara Schäfer**

Institutionen för kemi och molekylärbiologi  
Naturvetenskapliga fakulteten

Akademisk avhandling för filosofie doktorsexamen i kemi, som med tillstånd från Naturvetenskapliga fakulteten kommer att offentligt försvaras fredag den 5 Mai 2023 kl. 9.15 i KC, Institutionen för kemi och molekylärbiologi, Kemigården 4, Göteborg.

ISBN 978-91-8069-237-3 (PRINT)

ISBN 978-91-8069-238-0 (PDF)



## GÖTEBORGS UNIVERSITET

### Svensk summering

Organiska färgämnen har en central roll inom kemi, fysik och biologi. BODIPY är en klass färgämnen som användes som modell i denna avhandling. De är välkända för sin mångsidighet, som huvudsakligen beror på möjligheten att skraddarsy deras fotofysiska egenskaper genom förändringar i deras molekylära struktur. Denna avhandling strävar efter att fördjupa kunskapen om förhållandet mellan struktur och fotofysiska egenskaper hos dessa fluoroforer. Dessutom visas hur färgämnets egenskaper kan påverkas genom att modifiera den molekylära strukturen.

Strukturella homologer av BODIPY- och aza-BODIPY-klassen syntetiserades. Homologerna skiljer sig åt endast i den överbryggande atomen, och de är båda dekorerade med elektrondragande och donerande grupper. Effekterna av dessa grupper analyserades för varje klass individuellt och jämfördes dessutom inom de två klasserna. Detta resulterade i upptäckten av olika beteenden hos de två färgämnesklasserna som tidigare var utforskade.

För att strategiskt minska singlett-triplettenergigapet oligomeriserades en BODIPY-antracendiyad, som *via* ett laddningsseparerat tillstånd kan genomgå laddningsrekombination till triplettillståndet. Oligomerisering på ett okonjugerat sätt efterliknar ett fixerat J-aggregat underlättar således stark exciton-excitonkoppling. Detta sänker singlettillståndet för oligomererna, utan att ha någon stor effekt på triplettenergigen. Därför kan energigapet, som kan beskrivas som systemets energiförlust, minskas.

Vidare tillverkades ett nytt färgmaterial, ett rumstempererat färgglas. BODIPY-derivat utrustade med olika alkylkedjor syntetiserades och blandades. Vid blandning ökar systemets entropi, vilket leder till en minskning av materialens förmåga att kristallisera och aggregera. Materialet bildar då ett amorft fast tillstånd, ett glas, som har de monomera optiska egenskaperna hos färgämneskomponenterna.

Resultaten som presenteras i denna avhandling visar att genom att modifiera molekylstrukturen hos en färgämnesmolekyl kan dess inneboende egenskaper styras enligt behov. Detta är av stor betydelse för *in vivo* design av färgämnen samt tillverkning av nya material.

**Keywords:** BODIPYs, relation mellan struktur och optiska egenskaper, entropi, amorfa material, excitonkoppling