

# Komplex Präparat - Synthese und Phosphoreszenz von [Re(CO)<sub>3</sub>Cl(N<sub>2</sub>Tz)]

Protokoll zum Versuch des AC2 Praktikums von  
**Vincent Kümmerle & Elvis Gnaglo**

Universität Stuttgart

Verfasser: Vincent Kümmerle, 3712667  
st187541@stud.uni-stuttgart.de

Elvis Gnaglo, 3710504  
st189318@stud.uni-stuttgart.de

Gruppennummer: A05

Versuchszeitraum: 29.10.2025 - 19.11.2025

Betreuer: Manuel Pech

Abgabenummer: 1. Abgabe

Stuttgart, den 19. November 2025

# **Inhaltsverzeichnis**

<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Syntheseweg . . . . .	1
1.2 Charakterisierungsmethoden . . . . .	3
<b>2 Ergebnisse</b>	<b>3</b>
<b>3 Diskussion</b>	<b>3</b>
<b>4 Experimenteller Teil</b>	<b>4</b>
<b>5 Zusammenfassung</b>	<b>4</b>
<b>6 Literatur</b>	<b>4</b>

## 1 Einleitung

Tetrazine als Klasse heterocyclischer Liganden sind bereits seit der Synthese von A. Pinner 1893 bekannt<sup>[1]</sup> und sind aufgrund ihrer starken  $\pi$ -Akzeptorfunktion von Bedeutung für die Koordination an Übergangsmetallkomplexe und Klick-Reaktionen. Durch die vier elektronegativen Stickstoffatome weisen Tetrazine ein sehr elektronenarmes aromatisches System mit energetisch sehr tief liegenden  $\pi^*$ -Molekülorbitalen auf, die energiearme  $n \rightarrow \pi^*$  Übergänge mit charakteristischer Absorption ermöglichen.<sup>[2]</sup> Deshalb sind Tetrazine sehr leicht reduzierbar und erscheinen sehr oft pink. Tetrazine können durch die Interaktion der tief liegenden  $\pi^*$ -Molekülorbitale (LUMOs) mit den HOMOs (Lowest/Highest Occupied Molecular Orbitals) eines Diens Diels-Alder-Reaktionen mit inversem Elektronenbedarf eingehen, die auch als Klick-Reaktionen bezeichnet werden. Zudem sind die  $\pi^*$ -MOs Zielorbitale für Metal-Ligand-Charge-Transfers (MLCT). Durch die Koordination von Tetrazin-Derivaten an Übergangsmetalle wie Rhenium bilden sich Komplexe mit höherer Komplexstabilität, da die Derivate als mehrzähnige Liganden Chelat-Komplexe ausbilden. Häufig wird hierfür Pentacarbonylrhenium(I)chlorid verwendet, in dem die Carbonyl-Liganden als  $\pi$ -Akzeptoren und der Chlorid-Ligand als  $\sigma$ -Donor oktaedrisch um das  $d_6$ -System des Rheniums koordiniert sind. Die hierbei entstehenden Komplexe der Art  $[\text{Re}(\text{CO})_3\text{Cl}(\text{L}_x)]$  finden Anwendung als Photosensibilisatoren, Katalysatoren für die elektrochemische Reduktion von  $\text{CO}_2$  zu  $\text{CO}$  und in der Biodiagnostik, da sie bioorthogonal sind und damit *in vivo* genutzt werden können.

Somit ist das Ziel des Versuchs im ersten Teil 3-Methyl-6-(pyrimidin-2-yl)-1,2,4,5-tetrazin ( $\text{N}_2\text{-Tz}$ ) und ausgehend davon  $[\text{Re}(\text{CO})_3\text{Cl}(\text{N}_2\text{Tz})]$  zu synthetisieren. Im zweiten Teil wird eine Klick-Reaktion mit  $[\text{Re}(\text{CO})_3\text{Cl}(\text{N}_2\text{Tz})]$  durchgeführt und die Phosphoreszenz des *fac*- $\text{Re}(\text{CO})_3\text{Cl}$  Komplexes untersucht.

### 1.1 Syntheseweg

Die erste Stufe der Synthese von  $[\text{Re}(\text{CO})_3\text{Cl}(\text{N}_2\text{Tz})]$  wurde nach der modifizierten Pinner Synthese durchgeführt.<sup>[1]</sup>



Abb. 1: .<sup>[3]</sup>

In der dritten Stufe wurde .. nach dem Syntheseweg, der in Abbildung 2 abgebildet ist, synthetisiert.

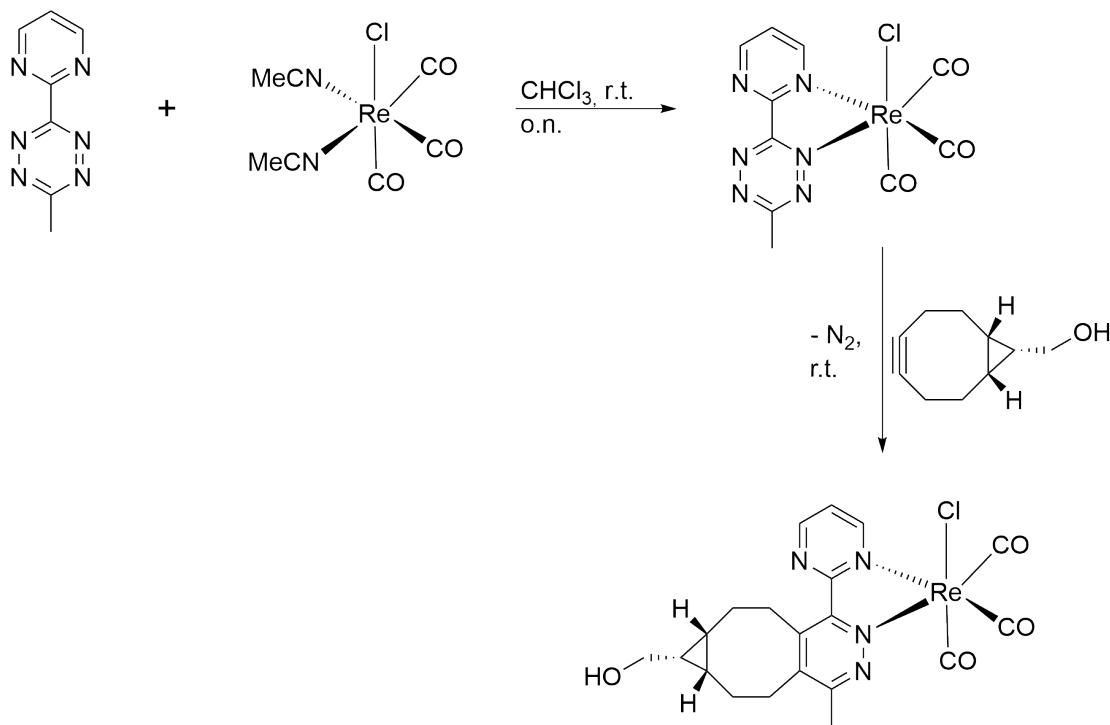


Abb. 2: .

In der vierten Stufe wurde aus dem Rhenium Komplex und Bicyclononin (BCN) über eine Klick-Reaktion [Re(CO)<sub>3</sub>Cl(4,5-BCN-3-(2-pyrimidyl)-6-methylpyridazin)] synthetisiert.

*Vincent Kümmerle & Elvis Gnaglo*

## **1.2 Charakterisierungsmethoden**

## **2 Ergebnisse**

0.0 ppm: Polysiloxan Schliffbett 2.1 ppm: Acetonitril

## **3 Diskussion**

*Vincent Kümmerle & Elvis Gnaglo*

## **4 Experimenteller Teil**

Die Synthese von wurde nach dem Syntheseweg von Schnierle et al. durchgeführt. [3]. In einem 1l Dreihalskolben wurde

## **5 Zusammenfassung**

## **6 Literatur**

- [1] S. Górecki, A. Kudelko, *Applied Sciences* **2025**, *15*, 7–8.
- [2] I. Löw, Diss., Universität Stuttgart, **2015**, S. 18–20, 33–34, 148.
- [3] M. Schnierle, S. Blickle, V. Filippou, M. R. Ringenberg, *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 12033–12036.