

# Komplex Präparat - Synthese und Phosphoreszenz von $[\text{Re}(\text{CO})_3\text{Cl}(\text{N}_2\text{Tz})]$

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 17. November 2025

# Inhaltsverzeichnis

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

## 1.2 Charakterisierungsmethoden

# 2 Ergebnisse

0.0 ppm: Polysiloxan Schliff Fett 2.1 ppm: Acetonitril

### **3 Diskussion**

## 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.