

COMPLEJOS LUMINISCENTES CICLOMETALADOS DE Pt(II) E Ir(III) CON EL CROMÓFORO 2-FENILBENZOTIAZOL Y LIGANDOS QUELATO DE TIPO P^ΛO

D. Gómez de Segura, R. Lara, M. Martínez-Iunquera, E. Lalinde, M. T. Moreno

Departamento de Química-Centro de Síntesis Química de La Rioja, (CISQ), Universidad de La Rioja, 26006, Logroño, España

momartj@unirioja.es

Las propiedades fotoquímicas y fotofísicas de los complejos ciclometalados de compuestos d⁸ Pt(II) y d⁶ Ir(III) han sido investigadas de forma exhaustiva durante las últimas décadas. Estos derivados presentan un fuerte acoplamiento espín-órbita (SOC), que junto con el pequeño gap de energía singlete-triplete dan lugar a un rápido cruce intersistémico (ISC). En consecuencia, exhiben emisiones fosforescentes con altos rendimientos cuánticos atribuidas a ³LC (³ππ), ³MLCT o ³LLCT, dependiendo de los ligandos ciclometalados y los auxiliares. Dentro de la gran variedad de sistemas descritos, se han diseñado complejos ciclometalados heterolépticos de Pt(II) o Ir(III) del tipo [Pt(C^ΛN)(L^ΛX)] ó [Ir(C^ΛN)₂(L^ΛX)], donde L^ΛX es un quelato (L neutro, X aniónico), como emisores fosforescentes muy eficientes. Sin embargo, son escasos los estudios comparativos de las propiedades ópticas de sistemas de Pt(II) e Ir(III).¹ Entre los ligandos auxiliares L^ΛX, los ligandos quelato aniónicos del tipo P^ΛO han sido poco empleados tanto en Pt²⁺ como en Ir³⁺.

En este contexto y con el objetivo de comparar compuestos ciclometalados de Pt(II) e Ir(III), en este trabajo se presenta la síntesis y caracterización de dos series de compuestos del tipo [Pt(pbt){PPh₂(R)-kP,O}] (**2a-2c**) y [Ir(pbt)₂{PPh₂(R)-kP,O}] (**3a-3c**), utilizando como ligando C^ΛN el 2-fenilbenzotiazol (pbt) y como ligandos auxiliares P^ΛO ácidos desprotonados funcionalizados, PPh₂(R) (R = *o*-C₆H₄CO₂ **a**, *o*-C₆H₄SO₃ **b**, CH₂CH₂CO₂ **c**). Los compuestos se han caracterizado mediante las técnicas habituales y se han confirmado las estructuras de **1**, **2a-2c**, **3a** y **3b** por difracción de Rayos X. Se han estudiado las propiedades ópticas de todos los compuestos en diferentes medios con el apoyo de cálculos teóricos DFT y TD-DFT. La fosforescencia de los complejos de Pt(II) se asigna a estados excitados ³IL con un menor carácter ³MLCT, mientras que en los derivados Ir(III) se origina de una mezcla de estados excitados ³IL/³MLCT/³LLCT (L = pbt). Las diferencias en los rendimientos cuánticos se explican por la diferencia de energía calculada entre niveles ³MC-³IL y ³MLCT para los compuestos **2a** y **3a**.

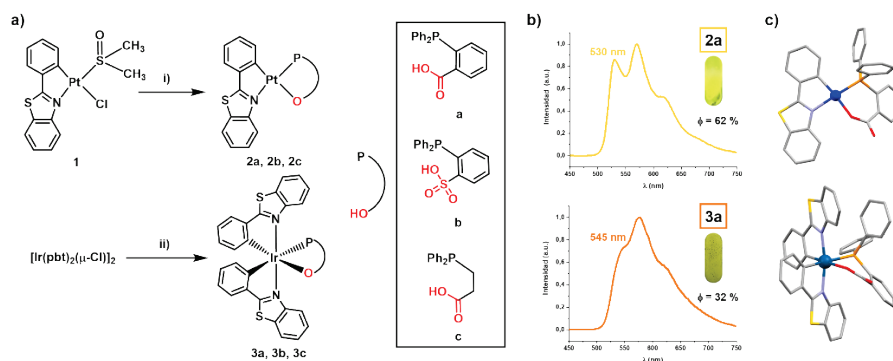


Figura 1. a) Esquema de síntesis. b) Emisiones de **2a** y **3a** en films de PS (10%). c) Estructuras de **2a** y **3a**.

Referencias

- [1] G. Zhou, W. Y. Wong and X. Yang, *Chem. Asian J.*, 2011, **6**, 1706.
- [2] M. Záborský, J. Soellner, F. Horký, I. Císařová, P. Štěpnička and T. Strassner, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2019, **2019**, 2284.
- [3] F. Zhang, L. Wang, S.-H. Chang, K.-L. Huang, Y. Chi, W.-Y. Hung, C.-M. Chen, G.-H. Lee and P.-T. Chou, *Dalton Trans.*, 2013, **42**, 7111.

Agradecimientos

Agradecemos la ayuda financiera al Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2019-109742GB-I00). D.G.S. y M. M. J. agradecen a la UR y a la CAR sus contratos predoctorales FPI-UR.