

## SÍNTESIS, PROPIEDADES ÓPTICAS Y BIOLÓGICAS DE UNA NUEVA FAMILIA DE COMPUESTOS PENTAFLUOROFENIL-BIS(CICLOMETALADOS) DE Pt<sup>IV</sup>

**D. Gómez de Segura<sup>1</sup>, N. Gimenez<sup>1</sup>, R. Lara<sup>1</sup>, D. Rincón<sup>1</sup>, M. T. Moreno<sup>1</sup>, E. Lalinde<sup>1</sup>,  
I. P. López<sup>2</sup>, J. G. Pichel<sup>2</sup>**

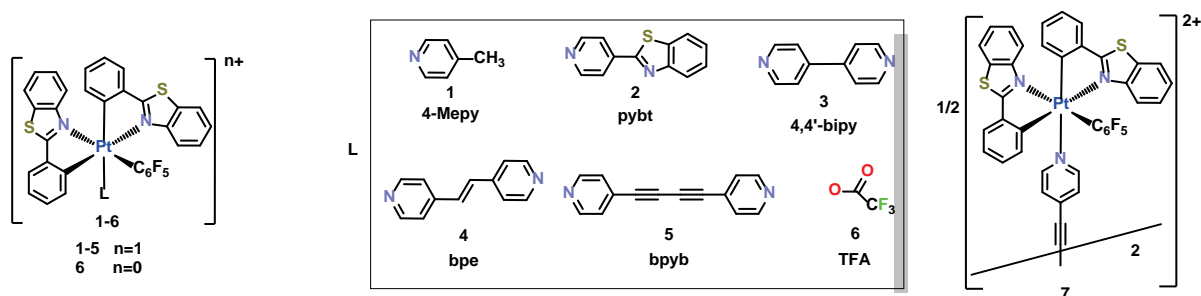
<sup>1</sup> Departamento de Química-Centro de Síntesis Química de La Rioja, (CISQ), Universidad de La Rioja, 26006, Logroño, España.

<sup>2</sup> Unidad de Cáncer de Pulmón y Enfermedades Respiratorias (CIBIR), Fundación Rioja Salud, 26006, Logroño, España.

daseguz@unirioja.es

Los complejos luminiscentes de metales de transición basados en cromóforos orgánicos han traído un gran interés debido a su amplio potencial en campos como la fotocatalisis, biosensores, fotosensibilizadores en química médica y en dispositivos optoelectrónicos. En los últimos años se han llevado a cabo numerosos estudios sobre fluoróforos ciclotmetalados de iones d<sup>6</sup>, como son Ru<sup>II</sup>, Os<sup>II</sup> o Ir<sup>III</sup>, y d<sup>8</sup>, particularmente Pt<sup>II</sup>. En contraste los estudios sobre compuestos luminiscentes de Pt<sup>IV</sup>, que son relativamente escasos<sup>1</sup>. Nuestro grupo de investigación ha publicado recientemente dos series de derivados pentafluorofenil-bis(ciclotmetalados) de Pt<sup>IV</sup> con Cl<sup>-</sup> o CN<sup>-</sup> como ligandos auxiliares<sup>2</sup>. En esta área, los cromóforos del tipo 2-arilbenzotiazol han sido empleados como ligandos para formar complejos metálicos fosforescentes que emiten en el rango del amarillo-naranja, y estudios recientes han demostrado su prometedora actividad antiproliferativa<sup>3</sup>.

En esta comunicación presentamos una nueva serie de complejos mononucleares catiónicos *fac*-[Pt(pbt)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)(L)](PF<sub>6</sub>) (**1** – **5**) y neutro *fac*-[Pt(pbt)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)(O<sub>2</sub>CCF<sub>3</sub>)] (**6**) y un complejo bimetalico *fac*-[{Pt(pbt)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)}<sub>2</sub>(-4,4'-bpyb)](PF<sub>6</sub>)<sub>2</sub> (**7**) en el que dos unidades idénticas de Pt<sup>IV</sup> están conectadas por el ligando bis(4-piridil)butadieno (bpyb) actuando como puente de forma bidentada. Los compuestos han sido caracterizados por las técnicas habituales y su configuración *fac* ha sido confirmada mediante estudios de difracción de Rayos-X en **1** y **4**. Las propiedades ópticas han sido estudiadas en diferentes medios (estado sólido, disolución y film polimérico), encontrando que el compuesto **4** solo presenta emisión en vidrio congelado debido a la rápida fotoisomerización *E/Z*. Se ha llevado a cabo un estudio teórico exhaustivo mediante cálculos mecanocuánticos a nivel DFT/TD-DFT con el fin de profundizar en la naturaleza de los estados excitados de los compuestos. La actividad antiproliferativa de una selección de compuestos ha sido examinada, mediante ensayos *in-vitro*, frente a dos líneas de células tumorales (A549 y HeLa) y su índice de selectividad frente a línea no tumoral (BEAS-2B). Este estudio revela una buena actividad citotóxica, con valores muy pequeños de IC<sub>50</sub> para los derivados catiónicos. Por último, se ha evaluado también la citotoxicidad fotoinducida con el complejo neutro **6**, observándose un notable aumento de la actividad citotóxica en relación a la observada en oscuridad.



### Referencias

- [1] F. Juliá, M.-D. García Legaz, D. Bautista and P. González-Herrero, *Inorg. Chem.*, 2016, 55, 7647-7660.
- [2] N. Giménez, R. Lara, M. T. Moreno, E. Lalinde, *Chem. Eur. J.*, 2019, 25, 5514-5526.
- [3] E. Lalinde, R. Lara, I. P. López, M. T. Moreno, E. Alfaro-Arnedo, J. G. Pichel, S. Piñeiro-Hermida *Chem. Eur. J.* 2018, 24, 2440.

### Agradecimientos

Agradecemos al Ministerio de Ciencia e Innovación la financiación (Proyecto PID2019-109742GB-I00). D.G.S. agradece a la UR y a la CAR sus contratos predoctorales FPI-UR.