

HOOFSTUK 1: INLEIDING EN DOEL VAN STUDIE

1.1 Inleiding

KMR-spektroskopie is een van die kragtige tegnieke tot beskikking van chemici vir die opklaring van chemiese verbindings. Hierdie tegniek het gegroei vanaf die eenvoudige proton-waarneming van water tot komplekse mediese diagnoses met magnetiese resonans beelding (MRI).⁽¹⁾⁽²⁾ Alhoewel hierdie tegniek so ver gevorder het, word Grubbs-tipe prekatalisatore nie ten volle gekarakteriseer nie – veral die voorbeelde in **Tabel 1.1**. Die maklikste karakteriseringsmetodes soos ^1H , ^{31}P en COSY eksperimente word, gebruik en by uitsondering ^{13}C .⁽³⁾⁻⁽¹¹⁾

Tabel 1.1 Gepubliseerde karbeen toekennings

Prekatalisator	^1H (Ru=CH)	^{13}C (Ru=CH)
1	20.02	294.72
2	19.16	294.24
3	19.16	–
4	19.6	297.66
5	17.77	–
6	18.02	–
7	17.67	–
8	17.39	262.14
9	–	–
10	17.32	–

Moontlike verduidelikings hiervoor is dat dit 'n duur en tydsintensiewe karakteriseringsmetode is naamlik dat dit ± 17 ure neem om die data opname te doen volgens die eksperimente bepaal in dié studie. Hierdie Grubbs-tipe prekatalisatore het 'n beperkte leeftyd wat veroorsaak dat die KMR-monster gereeld vervang moet word en dat nie al die eksperimente gelyktydig uitgevoer kan word nie.

1.2 Doel

Die doel van die studie was om ses nie-kommersiële Grubbs-tipe prekatalisatore **5-10** te sintetiseer en met behulp van KMR-eksperimente volledig te karakteriseer. Vier kommersiële

prekatalisatore **1-4** is gebruik om die KMR-parameters saam te stel en die resultate te bevestig.

Om hierdie doel te bereik word die volgende doelwitte gestel:

1. 'n Omvattende literatuurstudie te doen oor die karakterisering van Grubbs-tipe prekatalisatore met behulp van KMR.
2. 'n Sintese te doen van die ligande sowel as die ooreenstemmende Grubbs-tipe prekatalisatorderivate.
3. Te leer hoe om die Bruker 600 MHz KMR selfstandig en optimaal te gebruik.
4. 'n Standaard parameterstel saam te stel.
5. Om die Grubbs-tipe prekatalisatorderivate volledig met behulp van KMR te karakteriseer.

1.3 Verwysings

- 1) Bloch F., Hansen W.W. en Packard M.E., *Phys. Rev.* 1946, **69**, 127
- 2) Lauterbur P.C., *Nature.*, 1973, **242**, 190.
- 3) Robitaille P.M.L., Abduljalil A.M., Kangarlu A., Zhang X., Burgess Y.Yu.R., Bair S., Noa. P., Yang L., Zhu H., Palmer B., Jiang Z., Chakeres D.M. en Spigos D., *NMR Biomed.*, 1998, **11**, 263.
- 4) A complete introduction to modern NMR spectroscopy, Macomber R.S., Wiley 1998. ISBN 0-471-15763-8.
- 5) Schwab P., Grubbs R.H. en Ziller J.W., *J. Am. Chem. Soc.*, 1996, **118**, 100.
- 6) Gallagher M.M., Rooney A.D. en Rooney J.J., *J. Organomet. Chem.*, 2008, **693**, 1252.
- 7) Louie, J. en Grubbs, R.H., *Organometallics*, 2002, **21**, 2153.
- 8) Chatterjee A.K., Morgan J.P., Scholl M. en Grubbs R.H., *J. Am. Chem., Soc.* 2000, **122**, 3783.
- 9) Jordaan, M., *Experimental and Theoretical investigation of New Grubbs-type Catalysts for the Metathesis of Alkenes*. PhD-thesis (North-West University), 2007.
- 10) Huijismans, C.A.A., *Modelling and synthesis of Grubbs-type complexes with hemilabile ligands*. MSc-dissertation (North-West University), 2009.
- 11) Schachner J.A., Cabrera J., Padilla R., Fischer C., van der Schaaf P.A., Pretot R., Rominger F., en Limbach M., *ACS Catal.*, 2011, **1**, 872.