

# Die sintese, karakterisering, elektrochemiese eienskappe en katalitiese toepassing van nuwe [CpNiBr(NHK)]-komplekse

**Authors:**

F.P. Malan<sup>1</sup>  
E. Singleton<sup>1</sup>  
M. Landman<sup>1</sup>  
P.H. van Rooyen<sup>1</sup>  
J. Conradie<sup>2</sup>

**Affiliations:**

<sup>1</sup>Department of Chemistry,  
University of Pretoria,  
South Africa

<sup>2</sup>Department of Chemistry,  
University of the Free State,  
South Africa

**Corresponding author:**

M. Landman,  
marile.landman@up.ac.za

**How to cite this article:**

Malan, F.P., Singleton, E., Landman, M., Van Rooyen, P.H. & Conradie, J., 2016, 'Die sintese, karakterisering, elektrochemiese eienskappe en katalitiese toepassing van nuwe [CpNiBr(NHK)]-komplekse', *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* 35(1), a1423. <http://dx.doi.org/10.4102/satnt.v35i1.1423>

**Copyright:**

© 2016. The Authors.  
Licensee: AOSIS. This work is licensed under the Creative Commons Attribution License.

**The synthesis, characterisation, electrochemistry, and the catalytic application of new [CpNiBr(NHC)] complexes.** A range of symmetric and asymmetric aliphatic-arene NHC ligands has been synthesised and reacted with NiCp<sub>2</sub> to form [CpNiBr(NHC)] complexes in high yield (> 72%). A direct relationship between their electrochemical properties derived from cyclic voltametry and their catalytic activity in the Suzuki-Miyaura coupling reaction has been found.

Die afgelope twee dekades het sogenaamde *N*-heterosikliese karbene (NHK) radikaal ontwikkel vir gebruik as doeltreffende sintetiese uitgangstowwe, biologies aktiewe verbindings, asook hoogs aktiewe katalisators vir unieke organiese transformasies (Budagumpi & Endud 2013; Prakasham & Gosh 2015). Hierdie NHK-ligande bevat gesogte eienskappe wat deur sterk metaal-karbeenbindings stabiliteit aan oorgangsmetale verleen, asook maklike hantering en versoenbaarheid met 'n wye reeks hoë- en lae-oksidasietoestandmetale (Budagumpi & Endud 2013).

Ons ondersoek tans nuwe direkte roetes na nuwe groep 6–10 oorgangsmetaal-NHK-komplekse wat stabiliteit in oplossing toon, maar terselfdertyd katalities aktief is. Verskeie simmetriese en asimmetriese alifatiese-areen-NHK-ligande is gesintetiseer, en is verder gereageer met Ni(Cp)<sub>2</sub> (Cp = siklopentadiëniel) om 'n reeks van nuwe [CpNiBr(NHK)]-komplekse in hoë opbrengs (> 72%) te lewer. Die ligande bevat sowel elektron-onttrekkings- as elektron-donorgroepe om sodoende 'n reeks van elektronies diverse Ni(II)-NHK-komplekse te sintetiseer waar die elektroniese aard van die R-groepe van die stikstofatome van mekaar verskil. Die elektrochemiese eienskappe van die [CpNiBr(NHK)]-komplekse is met behulp van sikliese voltametrie ondersoek. Die *E*<sup>0</sup>-potensiaal van die Ni(I)/Ni(II) oksidasie en/of reduksie-koppel, en hoe hierdie waarde verander met die onderskeie Ni-komplekse namate die R-groep van die NHK-ligande verander word, is van belang. Ons het gevind dat die *E*<sup>0</sup>-potensiaal oor die algemeen effens verhoog met die meer elektrononttrekkende-R-groepe van die NHK-ligandbevattende nikkelkomplekse.

Die gebruik van homogene katalisators in verskeie selektiewe organiese transformasies verg bonkige ligande en metale wat gewoonlik duur en sensitief is vir beide lug en lig. Hierdie eienskappe van die katalisators beperk die skaal en toepassing vir industriële gebruik. Nikkel as oorgangsmetaal bevind hom tans in 'n belangrike posisie in organiese sintese en homogene katalise, aangesien verskeie transformasiereaksies en organiese verbindings wat in die verlede slegs met duur palladiummetaalkatalisators haalbaar was, nou moontlik is danksy die goedkoper en minder giftige nikkelmetaalkatalisators. Die katalitiese aktiwiteit van die Ni(II)-komplekse in die bekende Suzuki-Miyaura-reaksie is ondersoek, waarby 'n gegewe arielhalied aan 'n fenielring van fenielboorsuur gekoppel word om sogenaamde gefunksionaliseerde bifeniëlverbindings te vorm. Oor die algemeen is 'n hoë tot matige aktiwiteit (53%–79%) onder die nikkelkomplekse in die spesifieke koppeling van 4-chlorokarboksaldehyd en fenielboorsuur waargeneem. Ons het ook – selfs onder optimale reaksiekondisies – 'n konstante kompetisie tussen die vorming van bifeniëlkarboksaldehyd en die ongewenste byproduk bifeniël (13%–30%) waargeneem.

Hierdie katalitiese resultate sluit direk aan by die elektrochemiese resultate waar die vermoë van 'n Ni(II)-NHK-kompleks om aan 'n redoksproses deel te neem, op 'n katalisator met 'n hoë C-C-koppelingaktiwiteit dui. 'n Interessante liniêre verband tussen die C-C-koppelingopbrengs (%) en

**Note:** A selection of conference proceedings: Student Symposium in Science, 29–30 October 2015, University of the Free State, South Africa. Organising committee: Mr Rudi Pretorius and Ms Andrea Lombard (Department of Geography, University of South Africa); Dr Hertzog Bisset (South African Nuclear Energy Corporation (NECSA)); Dr Ernie Langner and Prof Jeanet Conradie (Department of Chemistry, University of the Free State).

**Read online:**

Scan this QR code with your smart phone or mobile device to read online.

die  $E^0$ -potensiaal (V) is verkry, wat verder op die direkte verwantskap dui. Berekeningschemie word op hierdie reeks van [CpNiBr(NHK)]-komplekse beoog om verdere bevestiging van verhoudings tussen die komplekse se stabiliteit, elektrochemiese eienskappe en katalitiese aktiwiteit te verkry.

## Literatuurverwysings

Budagumpi, S. & Endud, S., 2013, *Organometallics* 32(6), 1537–1562. <http://dx.doi.org/10.1021/om301091p>

Prakhasham, A.P. & Gosh, P., 2015, *Inorganica Chimica Acta* 431, 61–100. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ica.2014.11.005>