



NORTH-WEST UNIVERSITY  
YUNIBESITHI YA BOKONE-BOPHIRIMA  
NOORDWES-UNIVERSITEIT

WETENSKAPLIKE BYDRAES  
REEKS H: INTREEREDE NR. 190

**Katalitiese Chemie –  
Verlede, Hede en Toekoms**

Prof HCM Vosloo

Intreerede gehou op 13 Mei 2005

Die Universiteit is nie vir menings in die publikasie aanspreeklik nie.

Navrae in verband met *Wetenskaplike Bydraes* moet gerig word aan:

Die Kampusregistrator  
Noordwes-Universiteit  
Potchefstroomkampus  
Privaatsak X6001  
POTCHEFSTROOM  
2520

Kopiereg © 2007 NWU

**ISBN** 978-1-86822-525-5

# KATALITIESE CHEMIE – VERLEDE, HEDE EN TOEKOMS

HCM Vosloo

*Mevrou die rektor,  
Meneer die waarnemende vise-rektor,  
Meneer die waarnemende dekaan,  
Dames en here kollegas  
Dames en here besoekers,  
Dames en here studente,*

## Inleiding

Soos in die geval van diegene van u wat reeds soos ek vanaand aan hierdie kant van die podium gestaan het, het die keuse van die tema van vanaand se rede nie sondermeer ontstaan nie. Ek het myself ook die vraag afgeva: Is die intreerede van 'n individu in die moderne tegnologiese universiteit, met sy groot en komplekse strukture, nog vanpas of is dit net die spreekwoordelike *stem roepende in die woestyn*? Ek het my onder andere tot die Handboek van die Afrikaanse Taal (HAT) en intreeredes van kollegas gewend. Volgens die HAT is een van die betekenis van *intree* om jou in iets te begewe, dit te begin en *rede* is die samehangende woorde gerig tot 'n gehoor. Volgens my behoort 'n intreerede ook rigtingwysend, al is dit net om myself en my belangstellings aan u bekend te stel, en krities te wees. Vir die doel gaan ek vanuit my navorsingsgebied, naamlik Katalitiese Chemie, die rol van die universiteit (ook die chemiedosent) en sy vennote om 'n kultuur van Wetenskap, Ingenieurswese en Tegnologie binne die breë samelewing te vestig, in oënskou neem. Ek hoop dat dit waarin ek myself vanaand gaan begewe, samehangend en rigtingwysend sal wees.

Dit is ook belangrik om dit vanuit 'n historiese perspektief te doen, vandaar die subtitel van die rede – *Verlede, Hede en Toekoms*. Die gedagte is nie om u vanaand met historiese feite te verveel nie, maar om tog die konteks waarbinne ontwikkeling op enige vakgebied plaasvind en hoe ons, ons posisioneer om 'n beter toekoms te skep, te bepaal. Dit is DF Malan wat gesê het, en hier gebruik ek dit buite politieke verband:

*"Neem uit die verlede dit wat goed is en bou die toekoms daarop."*

Ons moet egter ook die aanhaling wat aan die beroemde Duitse digter Goethe toegeskryf word in gedagte hou:

*"Een ding wat ons uit die geskiedenis leer, is dat ons nie uit die geskiedenis leer nie."*

Ek wil graag aan die volgende aspekte aandag gee:

1. Wat is die stand van die onderrig van en navorsing in Chemie in Suid-Afrika en dan spesifiek aan die Noordwes-Universiteit (NWU)? Die klem hier sal hoofsaaklik op navorsing as deel van die opdrag van die universiteitdosent val.
2. Is Katalitiese Chemie een van die subdissiplines van Chemie waarin daar belê (materieel en intellektueel) behoort te word en het dit 'n volhoubare toekoms? Die uitdagings van Katalitiese Chemie as een van die pionierdissiplines ("frontier disciplines") sal uitgelig word.

3. Die lesse wat ek uit my navorsing in Katalitiese Chemie geleer het. Kan dit help om ons lewenstaak uit te leef en ons strategiese posisie te verbeter? Knelpunte sal uitgelig en enkele beskeie aanbevelings sal in u midde gelaat word.

Elke vraag sal nie individueel benader word nie maar in samehang met mekaar en sonder om die noue verband tussen Chemie en ander natuurwetenskaplike vakdisiplines te ignoreer.

Hoekom nou juis Katalitiese Chemie? Ek wil dit antwoord aan die hand van 'n aanhaling van Morrison uit sy boek *Man in a chemical world* van 1937:

*"Nature is the great chemist. All the processes of Nature involve chemical changes which vitally affect you and me; indeed are the processes of our very existence. The chemist observes and studies Nature's methods to discover means by which he can emulate or change her products, create new substances or better adapt natural material to uses of man. The chemical industry, utilizing the results of this research, endeavors to anticipate and supply man's developing needs for material things, thus contributing mightily to the advance of civilization."*

Ek wil twee voorbeelde uit die natuur gebruik om die belangrikheid van katalise te illustreer:

1. Die bombardeerkerwe maak van 'n katalisator gebruik om waterstofperoksied na water en suurstof in 'n hoogs eksotermiese reaksie om te skakel. Die stoom wat so opgewek word tesame met ander chemikalieë baie effektief as 'n verdedigingsmeganisme aangewend om die oorlewing van dié kerwe te verseker.
2. Die metallo-ensiem, Vitamien B12 ko-ensiem, speel 'n geweldige belangrike rol in die menslike liggaam en is betrokke in 'n verskeidenheid lewensnoodsaaklike prosesse wat reaksies soos C-C-, C-O- en C-N-bindingsbreking en metielaktivering insluit.

Dit is dus duidelik dat Katalitiese Chemie vir ons voortbestaan noodsaaklik is. Is daar enige lesse daaruit te leer?

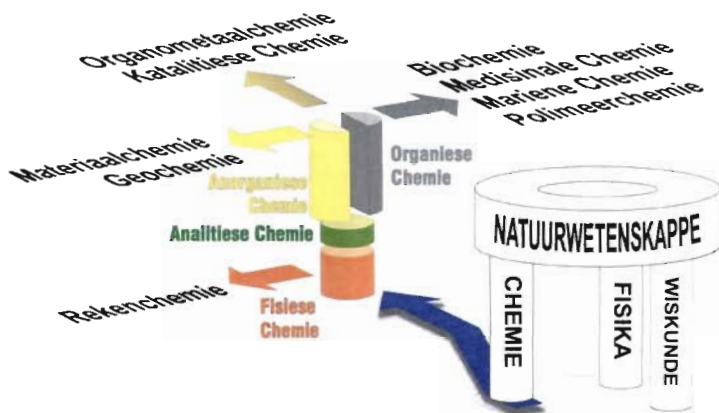
## **Definisies**

Om die speelveld min of meer gelyk te maak, is dit nodig om enkele terme te definieer en my intrede teen dié agtergrond verder te ontwikkel.

Die eerste term wat gedefinieer moet word, is natuurlik die term *Chemie*. Chemie is die studie van materie op atoom- en molekulevlak en die veranderinge (transformasie) wat materie ondergaan. Hierdie definisie impliseer dat die studie op die molekulevlak geskied; dus is dit nie nodig om Chemie na molekulewetenskappe te transformeer nie. Die uitkoms van hierdie studie is die daarstel van modelle om die werklikheid te verduidelik of 'n poging om dit te verduidelik. 'n Model is nie noodwendig waar nie, maar beskryf die probleem, wat op 'n gegewe tydstip ondersoek word die beste. In Chemie is daar heelwat voorbeelde waar die model in een vakdisipline aangehang word, terwyl dit in 'n ander 'n minder prominente rol speel; dink byvoorbeeld aan hibridisasie, resonans, ens.

In die moderne natuurwetenskappe is Chemie een van die drie basiese wetenskappe, een van die steunpilare waarop die natuurwetenskappe rus; die ander twee is Fisika en

Wiskunde (kyk Figuur 1). Chemie word verder in vier hoofafdelings verdeel, naamlik Fisiese, Analitiese, Anorganiese en Organiese Chemie. Fisiese Chemie vorm die basis van Chemie (met apologie aan die Fisiese Chemici, aangesien ander chemici hierdie feit gewoonlik ontken) met sterk koppeling aan die Wiskunde en Fisika. Analitiese Chemie handel oor die analisemetodes wat in Chemie gebruik word en het 'n noue verbintenis met Fisika. Organiese Chemie handel oor die verbindings wat uit 'n skelet van koolstof en waterstof bestaan en Anorganiese Chemie oor verbindings van al die elemente uitgesluit eersgenoemde. Geeneen van hierdie subdissiplines bestaan alleen nie en daar is 'n fyn gebalanseerde sinergistiese samehang. Uit hierdie hoofafdelings het verdere onderafdelings ontwikkel wat vandag vak- of spesialiteitsrigtings in eie reg is. Voorbeelde hiervan is Rekenchemie uit Fisiese Chemie; Biochemie, Farmaseutiese Chemie, Mariene Chemie en Polimeerchemie uit Organiese Chemie; Materiaalchemie en Geochemie uit Anorganiese Chemie; en Organometaalchemie en Katalitiese Chemie uit Anorganiese en Organiese Chemie.

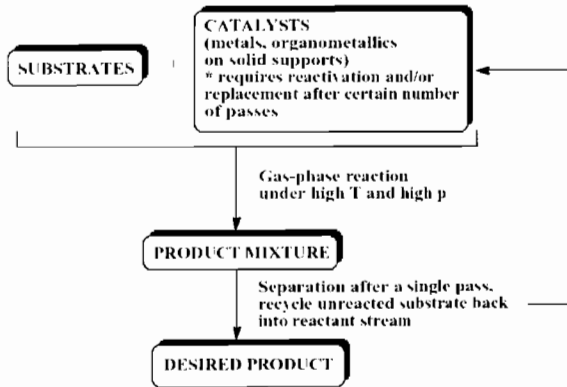


Figuur 1. Strukturering van Chemie.

Katalitiese Chemie handel oor die studie van chemiese reaksies wat onder die invloed van 'n katalisator plaasvind. Die reaksie kan natuurlik 'n anorganiese of organiese reaksie wees; weens die omvang daarvan sal daar in hierdie rede slegs op organiese reaksies gekonsentreer word. Die algemene paradigma om organiese reaksies uit te voer behels die vermenging van reagentse, uitvoer van reaksiekondisies, opwerk van die reaksiemengsel om 'n produkmenngsel te kry gevolg deur 'n suiweringsstap om die verlangde produk te kry. Om chemiese reaksies te optimaliseer is dit nodig om 'n aantal reaksieparameters te minimaliseer, byvoorbeeld kostes, reaksietye, toksisiteit en afval, en ander te maksimeer, byvoorbeeld opbrengs, hergebruik, herwinning en suiwerheid (Tabel 1). Aangesien die meeste industriële organiese reaksies katalitiese reaksies is, geld 'n eenvoudiger paradigma wat hierdie optimaliserings wel in ag neem (Figuur 2).

**Tabel 1.** Optimalisering van organiese reaksies.

Parameters om te minimaliseer	Parameters om te maksimeer
Koste van reagense	Opbrengs van elke stap
Koste van oplosmiddels	Veiligheidsprosedures
Aantal reaksiestappe	Hergebruik van katalisatore
Toksisiteit van reagense	Herwinning van katalisatore
Koste van aanvullende toerusting	Suiwerheid van produkte
Koste van katalisatore	Optiese suiwerheid
Reaksietye	Termodinamiese stabiliteit
Verwydering van afvalmateriale	
Newereaksies en -produkte	
Arbeidskoste	
Energiekoste	



**Figuur 2.** Algemene paradigma om industriële organiese reaksies uit te voer.

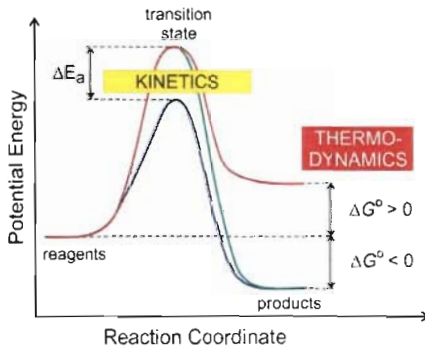
In baie Chemiehandboeke word 'n katalisator gedefinieer as 'n stof wat 'n chemiese reaksie laat plaasvind sonder om self aan die reaksie deel te neem of onveranderd tydens die verloop van die reaksie te bly. Hierdie is egter geensins 'n akkurate beskrywing nie. 'n Meer aanvaarbare en korrekte definisie wat as uitgangspunt in my rede gebruik sal word, is: 'n katalisator is 'n stof wat die tempo van nadering tot ewewig van 'n chemiese reaksie verhoeg sonder om wesenlik in die reaksie verbruik te word.

Die onderliggende beginsel agter Katalitiese Chemie is dus die vermoë van die katalisator om die kinetika van die reaksie te wysig ( $\Delta E_a$  in Figuur 3a), met ander woorde die ewewig word nie deur die katalisator versteur nie. Ander faktore wat die ewewig; en dus die chemiese reaksie beïnvloed, is die reaksietemperatuur (verander die ewewigskonstante se waarde), reagenskonsentrasie, volume van die reaksie-

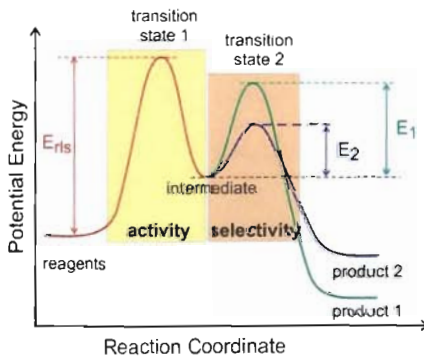
mengsel en druk (wysig die ewewigskonsentrasies van die reaksiemengsel). Die werkverrigting van 'n katalisator word in terme van twee begrippe beskryf:

- die *omsettingsgetal* (TON, "turnover number") is die aantal mol produk gevorm per mol katalisator gebruik en
- die *omsettingsfrequentie* (TOF, "turnover frequency") is die omsettingsgetal per tydseenheid.

Die TON, en dus ook die TOF, hang beide van die *aktiwiteit* en *selektiwiteit* van die katalisator af (Figuur 3b). Deur die omsettingsbeperkende of tempobepalende stap in die katalitiese siklus te bepaal en deur die tempo van hierdie spesifieke elementêre proses te verhoog kan die TOF verhoog word. Op soortgelyke wyse kan die katalisatorleef tyd (stabiliteit) en TON van die katalisator verhoog word deur die ontbindingspad te bepaal. In die algemeen is dit relatief maklik om die aktiwiteit van 'n reaksie te verstel; dit word normaalweg deur 'n aanpassing van die reaksiekondisies of faktore gedoen.



(a) eenstap ongekataliseerde en gekataliseerde reaksies



(b) tweestap gekataliseerde reaksie

**Figuur 3.** Energieprofile van chemiese reaksies.

Katalise word tipies beskou as 'n manier om chemiese prosesse te versnel om hulle kommersieel lewensvatbaar te maak. Ekonomiese en omgewingsvereistes het die noodsaaklikheid vir hoogs selektiewe katalisatore om reagensverbruik te verminder, skeidingsproesse te minimaliseer en die behoefte aan duur skoonmaakproesse en verwydering van ongewenste neweprodukte te vermy, daar gestel. Die selektiwiteit word gedefinieer as die opbrengsverhouding van neweprodukte tot die verlangde of hoofproduk en word deur die verskil in aktiveringsenergieë ( $E_a$ ) bepaal. Veranderlikes wat die selektiwiteit beheer is baie meer sensitief en moeilik om te verstel. Om selektiwiteit in katalitiese reaksies te voorspel is 'n beter begrip van die meganismes van die onderliggende reaksies noodsaaklik.

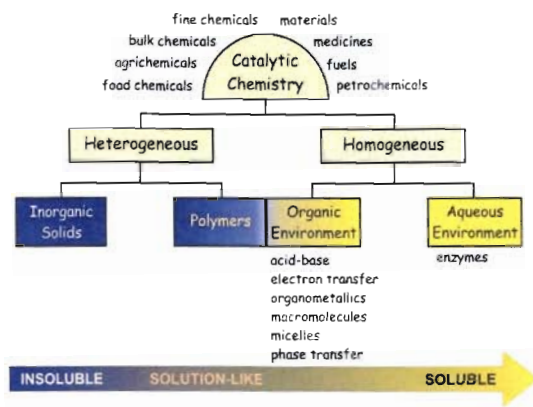
'n *Reaksiemeganisme* is die reeks elementêre stappe of reaksies wat tot produkvorming aanleiding gee (in Figuur 3b bestaan die reaksies uit twee stappe). Meganismes kan op verskeie maniere voorgestel word; in Organiese Chemie word 'n pyltjienotasië vir konsepsuele begrip gebruik, terwyl uit die Fisiese Chemie wiskundige en statistiese metodes gebruik word om met behulp van kinetiese en termodinamiese data die elementêre stappe voor te stel. Molekuulmodellering wat op die fundamentele grondslag van die kwantumfisika en -chemie rus, is ook 'n kragtige tegniek wat vir die verstaan van meganismes ingespan word.

Die opklaring van meganismes in homogene katalise behels 'n grondige begrip van elk van die volgende elementêre prosesse:

- liganddissosiasie en -koördinasie,
- oksidatiewe addisie en reduktiewe eliminasië,
- invoeging en uitstoting van onversadigde verbindings,
- transmetallering (dit is die oordrag van 'n alkielgroep van een metaalatoom na 'n ander om 'n nuwe tipe metaal-alkielkompleks te vorm),
- aanval van 'n nukleofiel of elektrofiel op 'n ligand wat aan 'n oorgangsmetaal gekoördineer is,
- sigma-bindingmetatese en
- reaksies van metaalalkilideen- en -alkilidynkomplekse met alkene en alkyne.

Katalise word tradisioneel geklassifiseer op grond van die oplosbaarheidsgedrag van die katalisator in heterogene en homogene katalise (kyk Figuur 4). Heterogene katalise word by voorkeur in die nywerheid bedryf hoofsaaklik weens die gemak waarmee dit hanteer word terwyl homogene katalise nog hoofsaaklik 'n akademiese oefening bly. Homogene katalise het besliste voordele bo heterogene katalise (kyk Tabel 2) maar moet nog aan sekere kritiese vereistes (veral betreffende katalisatorleef tyd, totale TON en hergebruik) voldoen, alvorens dit in die nywerheid aanvaar sal word.





Figuur 4. Klassifikasie van Katalitiese Chemie.

Tabel 2. Vergelyking van homogene en heterogene katalise.

	Homogeen	Heterogeen
Aktiwiteit	+++	-
Selektiwiteit	+++	-
Katalisatorstruktuur	+++	-
Reaksiekondisies	+++	+
Katalisatorleef tyd	++	+++
Katalisatorhoeveelheid	++	+++
Totale TON	+	+++
Diffusieprobleme	0	-
Katalisatorstelling	++	nie moontlik nie
Verstaan meganisme	++	---
Gifsensitiwiteit	--	---
Hergebruik	---	+++

## Katalitiese Chemie: Die verlede

In sy boek *From caveman to chemist* (1991) het Salzberg die geskiedenis van Chemie kragtig soos volg verwoord:

*"The story of chemistry is fascinating,  
full of paradoxes and oddities,  
false starts and misdirections.  
Its most strikingly anomaly is the glaring  
contrast between the great age of chemical technology and  
the extreme youth of the science."*

Chemie as wetenskap het eers ná die wetenskaplike revolusie ongeveer aan die einde van die 18de eeu sy opwagting gemaak en dan ook redelik tydsaam. Chemiekennis is egter so oud soos die geskiedenis self, maar was hoofsaaklik met die praktiese aspekte van die daaglikse lewe gemoeid. Kook, smelt van metale en die toediening van medisyne is voorbeelde hiervan. Die ontwikkeling van 'n wetenskaplike benadering tot Chemie was egter deur drie faktore belemmer. Eerstens was die skynbaar eindelose beskikbaarheid van materiaal aan die antieke mens en die gevolglike onvermoë om dit in een of ander sisteem te organiseer, 'n ernstige probleem. Tweedens was daar sosiale en intellektuele probleme. Omdat Chemie by uitstek 'n praktiese vak was, was dit grootliks deur die intellektueles en filosowe van die tyd geïgnoreer. In antieke Griekeland, en ander beskawings, was praktiese take primêr as slawewerk beskou. Die vooruitgang van Chemie in China was aan die houding van die Taoïste te danke wat nie hierdie houding van meerderwaardigheid oor handvaardighede aanvaar het nie en chemiese navorsing beoefen het.

Die derde probleem vir vroeë chemiese wetenskap was die element van geheimhouding wat hoogty gevier het. Die Alchemiste was veral hiervoor verantwoordelik en chemiekennis is dus met jaloersheid deur onder andere middeleeuse gildes bewaak. Dit is verder versterk deur die verborge en soms magiese kennis van die Alchemiste wat die hersenskim om basismetale na goud om te skakel nagejaag het of dié wat na die elikser van die Lewe op soek was. Veral laasgenoemde het daartoe gelei dat rekords van chemiese prosesse wat deur die Alchemiste ontdek is, in onleesbare simboliese taal of duistere simbole geskryf is. Astrologie en towerkuns was twee belangrike invloede op die aard van die Alchemiste se werk.

Houdings het gedurende die Renaissance geleidelik begin verander; met die koms van papier uit China het die publikasie van tegniese boeke begin en het chemiese tegnieke aan 'n wyer gehoor bekend begin word. Teen die agtiende eeu het die nuwe wetenskaplike benadering begin vrug dra. Dit het verdere impetus gekry met Dalton se atoom- en molekulteorieë in die eerste dekade van die negentiende eeu. Nog 'n negentiende eeu ontwikkeling wat 'n groot impak gehad het, was die ontdekking dat die wette en tegnieke van Chemie ook van toepassing is op stowwe wat in lewende dinge voorkom. Die omvang van Chemie is geweldig vergroot en sy toepassings soveel verbreed dat dit al die vertakkinge van die natuurwetenskappe gedek het.

As gekyk word na die historiese tydlyn van die ontwikkeling van Chemie, en dan spesifiek na dié van Katalitiese Chemie (kyk Figuur 5), dan is die noue samehang van die ontwikkeling van Organiese Chemie, Industriële Chemie en Organometaalchemie baie opvallend. In my rede gaan ek slegs daarop konsentreer en dan weens die omvang daarvan slegs op enkele hoofmomente. Volgens my oordeel kan vyf hoof-

momente of tydperke geïdentifiseer word, naamlik (1) die donker tydperk, (2) die tydperk van verligting wat met die Renaissance in Europa saamgeval het, (3) die onseker-tydperk, (4) die goue tydperk en (5) die groen tydperk. Ek het reeds voldoende na tydperke 1 en 2 in die inleiding tot die verlede verwys. Vergun my nog enkele opmerkings oor die Renaissance. In die historiese ontwikkeling van die kuns en die wetenskap speel die Renaissance-tydperk 'n geweldige groot rol. Die Renaissance was as gevolg van 'n kulturele opstand van die individu teen die sosiale bestel van die dag, 'n "Renaissance" kan nie deur 'n politieke wilsbesluit tot sukses bestuur word nie. Die Renaissance het duidelik sy merk op die ontwikkeling van Chemie gelaat – tot voordeel van die vak en die ontwikkeling daarvan.

In die onsekertydperk, so genoem omdat "onbewysbare" teorieë voorgestel is, is die eerste maal na "katalitiese aksie" verwys. Berzelius het die woord in 1817 uitgedink, maar eers aan die begin van die goue tydperk het Haber hom reg bewys met sy ontdekking van die bereiding van ammoniak. Die goue tydperk het ongelooflike ontwikkelinge op akademiese en industriële gebied tot gevolg gehad. Enkeles wat uitstaan, is die ontwikkeling van die kwantumteorie (1900 – 1924), die ontdekking van die hidroformileringsreaksie (1938) en die Ziegler-Natta-katalisator (1955). Hierdie en ander ontdekkings het tot 'n ongekende groei in die Chemie nywerheid dwarsoor die wêreld gelei.

Die prys wat die omgewing in hierdie tydperk betaal het was egter baie duur, waarskynlik te duur. Rachel Carson waarsku in haar boek getiteld *Silent Spring* in 1962 teen die onbeheerde gebruik van chemikalieë en hul impak op die omgewing. Alhoewel dit nie dadelik tot aksie gelei het nie, het dit wel die begin van die groentydperk aangedui deurdat natuuraktiviste 'n belangrike rol in die bewusmaking van die gevare gespeel het. Eers in 1990 is Groen Chemie amptelik van stapel gestuur, tyd sal leer of dit 'n kwessie van *te min te laat* was. Maar meer hieroor later in my rede.

Ek wil die geskiedenisverhaal afsluit soos wat ek dit begin het, met 'n aanhaling van Salzberg:

*"A peculiarity of the story of chemistry is the connection between chemistry and alchemy, that mysterious pseudoscience. Much of the apparatus of early chemistry, and many of the processes, were the same as those of alchemy. The terms and the name were often the same. In fact many early chemists were also alchemists. Yet chemistry and alchemy were very different, and chemistry did not arise from alchemy."*



## **Katalitiese Chemie: Die hede**

Die belangrikheid van Katalitiese Chemie kan deur die volgende feite toegelig word:

- die bereiding van 60 – 80% van alle industriële chemikalieë hang van katalisatore af;
- die wêreldmark vir katalitiese produkte is ongeveer R 60 triljoen; en
- die totale investering op winsaandeles en lisensies in dié veld beloop meer as R 18 biljoen.

Verder word katalisatore al hoe meer deel van die daaglikse lewe van die gewone mens; in motoruitlaatstelsels, om onaangename huisreuke (byvoorbeeld tabak- en toiletreuke) te elimineer. Ook om vlugtige organiese verbindings (VOC's) tydens kook, in houtprodukte, plastiek, kantoortoerusting, gomme, ens. te verwyder. Die lewenssiklus van 'n industriële katalisator behels 'n opeenvolging van die volgende stappe: bereiding → aktivering → werking → deaktivering → regenerering. Katalise navorsing sluit interdissiplinêre gebiede van wetenskap en ingenieurswese in, op dieselfde manier dat katalitiese modellering verskeie dissiplines behels: kwantumchemie, klassieke meganika, molekuldinamika, Monte Carlo, kinetika, fluïeddinamika, termodinamika en prosesingenieurswese.

Die katalisenavorsing wat aan die NWU gedoen word het sy oorsprong reeds in 1974, aan die destydse PU vir CHO, gehad toe my voorganger, prof JAK du Plessis, met hierdie navorsing begin het. In 2002 het die katalisegroep en sintesegroep hul kragte bymekaar gevoeg en is die Katalise en Sintese Navorsingsgroep onder my leiding tot stand gebring. Die doel van die groep is om homogene reaksies en polimeermateriale te bestudeer en te berei om sodoende spesifieke probleme in skeidingsprosesse aan te spreek. Alhoewel die toegepaste aspekte van Chemie in die navorsingsfokus beklemtoon word, word dit alles vanuit 'n fundamentele oogpunt gedoen. Die groep bestaan uit vier dryfkragte afgestem op 'n katalitiese proses:

### *Organiese Sintese*

Sintese van ligande, dendrimere, monomere en polimere gebaseer op gefunksionaliseerde alisikliese koolwaterstofverbindings.

### *Organometalaalsintese*

Sintese van organometaalverbindings met onder andere bogenoemde organiese verbindings vir toepassing in katalitiese reaksies.

### *Katalise*

Bestudering van katalitiese reaksies soos alkeenmetatese en alkynpolimerisasie vir toepassing in skeiding, nanokatalise en tandemkatalise.

### *Modellering*

Rekenmetodes (molekuulmodellering) bied unieke oplossings in katalitiese en oppervlakchemie. Dit bied 'n in diepte kennis van die reaksiemeganismes en die rol van reaksiekomponente. Sagtewarepakette kan uiters waardevolle inligting, soos die termodinamika en energetika van 'n proses, teen 'n relatiewe lae koste lewer. Die tyd en koste om nuwe katalisatore te ontwikkel kan beduidend verlaag word. Verder kan katalisatore noukeurig ontwerp word om beperkinge soos reaksietempo en/of omgewingsbeperkings te bevredig. Eerstens kan die eienskappe van die katalisator en laastens die katalitiese proses self, soos die bepaling van die reaksieweg, tot 'n

uitvoerige begrip van die katalitiese siklus lei. Ons het reeds die meganisme van die metatesereaksie van 1-okteen met die Grubbs-katalisator volledig op hierdie manier ondersoek. 'n Goeie korrelasie met die eksperimentele resultate is verkry wat ons insig oord die reaksie aansienlik verdiep het. Aan die NWU is die Laboratorium vir Toegepaste Molekuulmodellering (LAMM) op die been gebring. Die LAMM bestaan uit deelnemers uit die Navorsingsfokusareas Medisinale Navorsing en Ontwikkeling en Skeidingswetenskappe en -Tegnologie. Die doel van die LAMM is om 'n forum daar te stel om molekuulmodellering op alle vlakke binne die NWU verder uit te bou.

Die navorsingsgroep is verder goed toegerus met instrumente aan die eksperimentele kant. Gesofistikeerde tegnieke word ook gebruik om komplekse reaksiemengsels (GCxGC-TOFMS) en die kinetika (KMR) van katalitiese reaksies met sukses te ondersoek.

### **Katalitiese Chemie: Die Toekoms**

Ek wil my rede afsluit met 'n toekomsblik vir Chemie en dit dan binne die konteks van my/ons akademiese omgewing plaas. Dit is waar dat die omgewing waarbinne ons funksioneer kompleks en omvangryk is as wat ek hier voorstel, die bedoeling is nie om 'n volledige geheelbeeld te gee nie maar om vanuit my perspektief, hoe beperk ook al, 'n bydrae te lewer.

#### *Chemie en sy sub-dissiplines*

Die vraag oor die toekoms van Chemie, of enige ander vak, is natuurlik een wat oor die eeue heen baie gevra is en waaroor elkeen 'n mening het. Dit het gewoonlik gestrek van die "doomsday"-filosofie tot die wetenskap as antwoord vir alles. Daar is natuurlik baie faktore wat die toekoms van 'n vak bepaal, ek gaan hier aandag gee aan slegs één van dié dryfkragte, wat soos ek vroeër genoem het reeds aan die begin van die negentigjare van die vorige eeu sy beslag gevind het, naamlik die beweging vir die sogenaamde Groen Chemie. Die groen in die naam roep natuurlik helder televisie-beelde op van mense wat in 'n rubberbootjie 'n groot vragskip, wat kernafval vervoer, probeer keer of 'n ander ekstremiste daad wat sonder aansiens des persoons uitgevoer word. Dit roep ook beelde op van lande waar daar 'n anti-chemiese histerie is, sonder plek vir kalmte en realisme, die beweging na die sogenaamde *slegs natuurlike produkte is goed vir die mens*. Ongeag waar ons staan, die feit van die saak is dat Groen Chemie noodsaaklik is vir die toekoms van mens en dier op hierdie planeet, ook vir die oorlewing van die planeet self. Ek wil nie hier die meriete van die verskillende standpunte beoordeel nie, maar eerder holisties daarna kyk.

Ek wil hier die twaalf beginsels van Groen Chemie gee soos deur die *American Chemical Society* in 2001 verwoord:

- Voorkoming.
- Atoomekonomie.
- Minder gevaarlike chemiese sinteses.
- Ontwerp van veiliger chemikalieë.
- Veiliger oplosmiddels en hulpmiddels.
- Ontwerp vir energie effektiwiteit.
- Gebruik van hernieubare voerstrome.
- Verminder derivate

- Katalise
- Ontwerp vir degradasie ("degradation").
- Intydse analise vir besoedelingvoorkoming.
- Inherente veiliger Chemie vir ongelukvoorkoming.

Uit hierdie twaalf beginsels is dit duidelik dat die toekoms van Chemie nie in gevaar is nie, maar wel die manier hoe Chemie (dan veral in die praktyk met ander woorde die eksperiment) bedryf word. Nuwe moontlikhede vir ou metodes moet dringend gesoek en gevind word, ons kan nie net voortgaan nie. Die uitdagings vir die akademikus is te veel om op te noem; vanuit die Katalitiese Chemie wil ek graag drie noem. Eerstens, moet meer selektiewe katalisatore vir meeste van die bestaande reaksies gevind word en tweedens moet nuwe reaksies wat aan die beginsels vir Groen Chemie voldoen, gevind word. Laastens, molekulemodellering gaan al hoe belangriker word om die eksperiment vooruit te loop. Let wel, ek sê nie vervang nie, die geskiedenis van Chemie het reeds vir ons geleer dat die eksperiment en "filosofie" in 'n delikate ewewig is.

Die eerste twee uitdagings is voor die hand liggend, so ek gaan nie verder daarvoor uitwei nie. Ek wil enkele gedagtes oor die laaste uitdaging in u midde lê. Dit is belangrik dat die bestaande kwantum-meganiese en ander modelle verfyn word, sodat modellering meer effektief as voorspellingsinstrument gebruik kan word. Om dit egter te bereik is MEER fundamentele navorsing nodig. Dit is onrusbarend dat daar juis by universiteite al hoe meer op die materiële voordele van innovasie deur navorsing gefokus word, terwyl die intellektuele en fundamentele aspekte verwaarloos word. Dit is belangrik dat die bestaande modelle getoets en verfyn word. Ek pleit nie hier dat almal nou nuwe rekenaarprogramme skryf of teoretiese chemici word nie (daar is genoeg van hulle en hulle is 'n groep op hul eie), ek pleit hier dat nie-winsgewende fundamentele navorsing meer ondersteun moet word, want sonder hierdie werk kan nuwe modelle nie ontwikkel word nie. Ter illustrasie hiervan; dr Warren Hehre, 'n ontwikkelaar van berekeningsmetodes, het by geleentheid van 'n opleidingsessie tydens die SA Chemiese Instituut se konvensie in Potchefstroom in 2000 die opmerking gemaak dat die ontwikkeling van molekulemodellering veral gestrem word deur afname in navorsing in eksperimentele termodinamika wêreldwyd. Dit is 'n veld wat nou nie juis die aandag van finansieringsagentskappe trek nie, want die "wins" is nie bepaalbaar nie. Ten laaste is dit ook belangrik dat hierdie modelle so wyd as moontlik deur eksperimentele chemie navorsers op hulle sisteme getoets word om die geldigheid daarvan te verifieer.

Ek wil hierdie afdeling met 'n waarskuwing afsluit; navorsing gaan nie goedkoper word as die twaalf beginsels in sy volle konsekwensies (wat ek glo ons almal mee saamstem) uitgevoer word nie. Verder hoop ek, dat ek kon aantoon dat Katalitiese Chemie 'n belangrike sub-dissipline van Chemie is en dat die omvang daarvan so wyd is dat 'n enkele "deskundighedsentrum" aan een universiteit/nywerheid nie alleen daarop kan aanspraak maak nie.

#### *Universiteit-dosent-student*

Daar is alreeds baie geskryf en gedebatteer oor wat 'n universiteit is, en verskeie modelle is alreeds ontwikkel. Ek wil nie hierdie debat onnodiglik uitrek met 'n komplekse definisie en 'n breedvoerige motivering daarvan nie. Die vraag is hoe ek, in terme van vanaand se rede, 'n universiteit sien. Ek wil dit so eenvoudig as moontlik

hou en ek is van mening dat min mense van my sal verskil as ek sou sê dat die kernbesigheid van 'n universiteit *mense en kennis*, of anders gestel *mense met kennis* is. As ek in die lig hiervan 'n lysie sou saamstel van die drie belangrikste eienskappe van 'n universiteit, staan die volgende eienskappe bo-aan my lysie (nie noodwendig in volgorde van belangrikheid nie):

- 'n Universiteit is by uitstek 'n stryder van baie dinge; om enkeles te noem, vir die reg op kritiese denke, vir taal (dit gaan nie net oor spreektaal nie maar ook oor vaktaal), vir al die wetenskappe (daar is 'n noodsaaklike ewewig wat nie versteur moet word nie), ens.
- 'n Universiteit is 'n versameling selfgemotiveerde individue.
- 'n Universiteit is verantwoordelik krities – eers na binne dan na buite, met die klem op krities.

Ek het aan die begin van die rede genoem dat ek hoofsaaklik op navorsing in my rede gaan konsentreer. Ek doen dit nie omdat ek dink navorsing is belangriker as onderrig nie. Daar is 'n sinergisme wat onafskeibaar is, soos 'n siamese-tweeling wat dieselfde hart deel – die een kan nie sonder die ander bestaan nie. Die vraag moet deurlopend gevra word of die onderrig aan die PUK navorsing ondersteun en omgekeerd. Ek laat dit vir 'n ander debat.

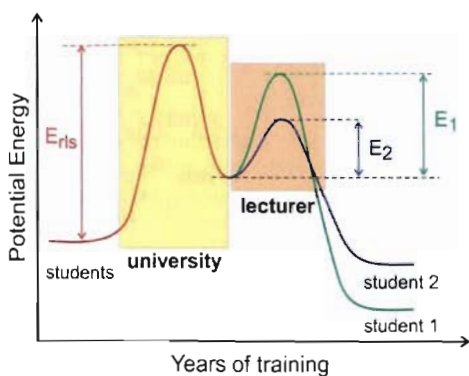
Hoe sien die navorsingsrol van die universiteit daaruit? Ek ondersteun die standpunt dat die sentrale taak van die akademiese navorser *is om nuwe konsepte te vind en dan die konsepte te bewys*. Vir die navorser in Katalitiese Chemie beteken dit dat nuwe konsepte, katalisatore en reaksies ontwikkel moet word, dat die bewys van konsep van 'n katalitiese reaksie gedemonstreer moet word en sy meganisme ondersoek moet word.

Om verder aan die navorsingsrol van die universiteit gestalte te gee, is dit nodig dat ek weer by die teorie van (Katalitiese) Chemie gaan leen, aangesien dit 'n handige metafoor is om my punt te verduidelik. As ons na die energieprofiel van 'n tweestapreaksie kyk en dit nou op die universiteit toepas kan dit soos in Figuur 6 geïllustreer word. Die verband illustreer vir my die universiteit-dosent-student-verhouding. Met universiteit bedoel ek die bestuursfunksie (universiteits-, fakulteits- en skoolbestuur) sonder om daardeur te bedoel dat die twee soos die teenpole van 'n magneet is nie. Om katalitiese terme te gebruik is universiteit-dosent die katalisator en die student die reaksie. Die universiteit se rol is om die energiebuil te verlaag deur 'n omgewing te skep (vir beide dosent en student) wat optimale opbrengs vir al die rolspelers moontlik maak (*aktiwiteit*). Die dosent se rol is om die student te begelei sodat hy/sy tot sy/haar volle potensiaal ontwikkel wat natuurlik nie dieselfde vir almal is nie (*selektiwiteit*). As elke rolspelere aan die NWU myns insiens dit regkry kan ons almal as wenners op alle vlakke uit die stryd tree.

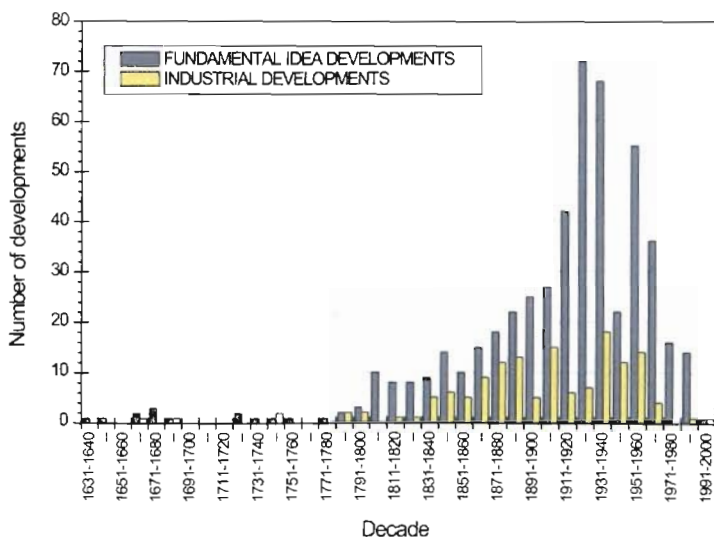
#### *Universiteit-Nywerheid*

Aangesien Katalitiese Chemie so 'n groot rol in die chemiese nywerheid speel en ook vanweë ons betrokkenheid by nywerheidsprojekte, vergun my enkele opmerkings oor dié onderwerp. Die hooftaak van industriële of toegepaste navorsing is *om die kennis wat deur basiese of universiteitsnavorsing geskep is op praktiese probleme toe te pas*. Volgens de Vos *et al.* behels die uitdagings vir die nywerheid die ontwikkeling, opskaal en kommersialisering van industrieel-buikbare katalisatore en prosesse (reaksies); om 'n gereedskapskas vir vinnige ontwikkeling en kommersieel-beskikbare katalisatore te wees.





Figuur 6. Energieprofiel van rolspelers aan 'n universiteit.



Figuur 7. Verband tussen fundamentele idees en industriële ontwikkelings in Chemie.

Daar moet op gelet word dat die fundamentele idee altyd die industriële ontwikkeling voorafgaan. Verder dat nie alle idees winsgewende gevolge in die industriële domein het nie, intendeel die verhouding is redelik swak en nuwe idees is aan die afneem in die wêreld (kyk Figuur 7). Die rol van beide partye (akademie en nywerheid) is goed gedefinieer en daar behoort geen negatiewe spanning hierin te wees nie. As daar wedersydse respek vir elkeen se rol is kan hulle in harmonie saamwerk tot voordeel van die hele Suid-Afrikaanse gemeenskap.

#### *Universiteit-Staat*

Hoe sien die staat die universiteit en sy rol as navorser? Die staat besef dat alhoewel Suid-Afrika die bes ontwikkelde en toegeruste nasionale navorsings- en innovasiesisteem op die vasteland van Afrika het, is hy besig om te kwyn wat sy internasionale stand betref. Die staat besef dat iets gedoen moet word en baie planne is besig om die lig te sien. 'n Kritieke beoordeling van die staat se planne en rol val buite die bestek van my rede vanaand. Ek wil egter volstaan met inligting oor ons aktiewe deelname aan die NRF-DST Sentrum van Deskundigheid in Katalise, c\*change. Behalwe vir die projekte wat vanjaar aan die NWU 'n aanvang geneem het, is ek ook die bestuurder van die program oor SA Olefiene.

#### **Samevatting**

As samevatting wil ek die volgende aanhaling van Robert Day as boodskap in julle midde laat:

*"There are four things that make this world go round:  
love, energy, materials and information.  
We see about us a critical shortage of the first commodity,  
a near-critical shortage of the second,  
an increasing shortage of the third,  
but an absolute glut of the fourth."*

*"We in science, of necessity, must contribute to the glut.  
But let us do it with love, ... ,  
let us also do it with energy, ... ,  
and let us husband our materials, ... "*

#### **Bedankings**

Mevrou die rektor, vergun my om enkele bedankings te doen.

'n Hartlike dank aan die universiteit wat my die eer van 'n professoraat aangedoen het en almal wat in die proses instrumenteel was.

Baie dankie aan my kollegas (administratief, tegniese en akademies) in die Skool vir Chemie en Biochemie en die Navorsingsfokusarea Skeidingswetenskap en -Tegnologie vir die kollegialiteit en aangename werksatmosfeer. Vergun my enkele uitsonderings, met die risiko dat iemand te nagekom sal word – my apologie by voorbaat. In die besonder wil ek dr Gerhard Lachmann bedank vir die akademies beleë gesprekke van die afgelope aantal jare wat ons oor Chemie en verwante sake voer, dit help om die *raaisel agter die spieël* beter te verstaan. Ek wil ook vir prof JAK du Plessis vir sy aandeel in my akademiese vorming en die stewige fondament wat hy

vir katalise aan die PUK gelê het, bedank (danksy sy pioniersbydrae word homogene katalise vanjaar reeds 32 jaar aan die universiteit wetenskaplik nagevors).

Ek wil ook kollegas in die ondersteuningsdienste van die universiteit bedank. Hier dink ek veral aan mev. Zita Prinsloo, Anriëtte Pretorius, mnr. Hennie van Zyl en personeel van die instrumentmakery en ITB (om die enkeles te noem waarmee ek die meeste te doen gehad het) vir hul vriendelike bereidwilligheid om hierdie noodsaaklike funksie te verrig; geen probleem is ooit te groot nie.

Geen akademiese navorsingsloopbaan aan 'n universiteit kan suksesvol wees sonder die bydrae van die nagraadse studente, baie dankie ook aan hulle vir die harde werk en lojaliteit. Weens die tyd tot my beskikking kon ek ongelukkig nie vanaand reg laat geskied aan elkeen se bydrae tot ons groep se navorsing nie, maar wees verseker dat elkeen se bydrae hoog geag word. Dit sluit ook die studente van voor my tyd in.

My hartlike dank aan oud-kollegas van die Vaaldriehoekse Technikon, medewerkers uit die nywerheid, ander universiteite en c\*change en vriende vir elkeen se belangstelling en bydrae tot my loopbaan.

My ouers en familie vir hulle ondersteuning. In die besonder my ouers wat ook in omstandighede waar hulle eie drome nie altyd bewaarheid is nie, net die beste vir hulle kinders wou hê en gereeld baie opgeoffer het vir ons sukses. 'n Besondere woord van geluk- en seënwense met die viering van hulle 50ste huweliksherdenking môre.

My vrou Hesta en dogters Hanmari, Wilmie en Johandri vir julle liefde en die ruimte wat julle my gee om my stokperdjie met passie te beoefen.

**Aan God alle Eer!**

## **Bronnelys**

Odendaal FF, *HAT, Verklarende Handwoordeboek van die Afrikaanse Taal*, Tweede uitgawe, Perskor (Johannesburg), 1984

Martins FJC, *Uitdagings vir chemici*, PU vir CHO Inougurele Rede nr 56, 1980

van Eldik R, *Die chemiedosent as navorser aan Suid-Afrikaanse Universiteite*, PU vir CHO Inougurele Rede nr 59, 1980

Steyn PS, *Chemie – Quo Vadis?*, PU vir CHO Inougurele Rede nr 139, 1980

Morrison AC, *Man in a chemical world*, Scientific Book Club (London), 1937

Androas J, *Notes on Industrial and Applied Green Chemistry*, <http://careerchem.com/courses/3070/3070.html> [toegang: 29 April 2005]

Gates BC, *Catalytic Chemistry*, Wiley (New York), 1992

Salzberg HW, *From caveman to chemist*, ACS (Washington), 1991

Rona C, *The Atlas of Scientific Discovery*, Crescent Books (London), 1983

Armor J (Red.), North American Catalysis Society, <http://www.nacatsoc.org/edu.catalysis.asp> [toegang: 29 April 2005]

Anastas PT, Kirchoff MM, Williamson TC, *Applied Catalysis A: General*, 2001, **221**, 3

RA Day, *How to write and publish a scientific paper*, 2<sup>nd</sup> Edition, ISI Press (Philadelphia), 1983

Kurosawa H, Yamamoto A (Reds.), *Current Methods in Inorganic Chemistry, Volume 3: Fundamentals of Molecular Catalysis*, Elsevier (Amsterdam), 2003

de Vos DE, Vankelecom IFJ, Jacobs PA (Reds.), *Chiral Catalyst Immobilization and Recycling*, VCH-Wiley (Weinheim), 2000

de Boer FP, *Research is an investment not an expense*, *Applied Catalysis A: General*, 2005, **280**, 3-15  
*South African Higher Education in the first decade of democracy*, CHE (Pretoria), 2004