

Referaatopsommings

Opsommings van geselekteerde referate gelewer tydens die S.A. Akademie vir Wetenskap en Kuns se Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, gehou op 1 November 2004

Die analise van bier-aroma deur middel van gaschromatografie en vooraf-konsentrasie met silikoonrubber

Nardus Potgieter,* Erla Harden en Egmont Rohwer

Departement Chemie, Universiteit van Pretoria; *WNNR, Bio/Chemtek, Modderfontein

Die sogenaamde “vingerafdrukprofiel” wat deur gaschromatografiese analise gegenereer kan word, is baie handig vir gebruik in kwaliteitsbeheer in die voedsel- en drankbedryf. Bier-aromaprofiel kan gebruik word vir die uitkenning van spesifieke biersoorte en vir foutopsporingsdoeleindes soos die identifikasie van ongewenste smake in voedsel of drank.

Die *multikanaal-silikoonrubber*konsentreerder (MSK) is ideaal vir hierdie taak. Die eenvoud en robuustheid van die MSK maak dit uiters geskik om vlugtige chemikalieë, wat die aroma van ’n produk soos bier uitmaak, te konsentreer. Hierdie aroma-verbindinge word met ’n oplosproses in die silikoonrubber vasgevang. In teenstelling tot meer tradisionele adsorpsiemetodes verleen hierdie meganisme groter stabiliteit aan die gekonsentreerde aromakomponente.

Termiese desorpsie word gebruik om die vasgevangde aromakomponente na die gaschromatograaf oor te dra. Dit

elimineer die gebruik van duur, hoë-suiwerheid oplosmiddels en verkort die monstervoorbereidingstyd. Die herkenbare en stabiele chromatografiese agtergrondpieke van die MSK vergemaklik die herhaalde gebruik daarvan met termiese desorpsie.

Gedurende hierdie studie is die toepaslikheid van die MSK as konsentreerder vir vlugtige aromakomponente ondersoek. Die monsternemings- en desorpsieprosedure is geoptimeer en geëvalueer in terme van chromatografiese herhaalbaarheid.

LITERATUURVERWYSING

E.K. Ortner, E.R. Rohwer (1996). Trace analysis of semi-volatile air pollutants using thick film silicone rubber traps with capillary gas chromatography, *J. High Resol. Chrom.*, 19, 339-344.

Die isolering en identifisering van die hondafwerende faktor in die kutikulêre afskeiding van die geelhondebosluis, *Haemaphysalis leachi*

B. Marx

Departement Chemie, Universiteit van Stellenbosch

Honde toon duidelike tekens van afkeer of selfs naarheid wanneer hulle in noue kontak kom met die afskeiding van die geelhondebosluis, *Haemaphysalis leachi*. Daar word aangeneem dat die bosluis die afskeiding produseer as afweermiddel om te verhoed dat die hond dit met sy bek verwyder.

’n Studie is gemaak van die samestelling van die vlugtige komponente van hierdie afskeiding om die hondafwerende chemiese verbindinge te identifiseer.

As gevolg van die sensitiwiteit van ’n hond se reuksintuig, hoef die bosluis slegs uiters klein kwantiteite afweerstof af te skei, wat die waarneming van die verskillende komponente deur middel van konvensionele GC-metodes baie bemoeilik het. Ten einde ’n metode te vind wat ’n gepaste hoeveelheid monster vir waarneming op ’n gaschromatograafdetektor sou verseker, is verskeie monsternemings- en monsterverrykingsmetodes ondersoek.

Twee monsternemingsmetodes het aanvaarbare resultate gelewer: Eerstens is geïrriteerde wyfiebosluis met dichloormetaan afgespoel en die ekstrak is ná indamping met behulp van monsterinspuiting sonder inlaatstroomverdeling deur middel van GC-MS geanaliseer. Tweedens is die afskeiding van geïrriteerde bosluis met mikroglasveselpapier afgegee en die papier is direk in die binnebuise van die inlaat van die GC-MS-sisteem geplaas, waar die vlugtige komponente termies gedesorbeer is vir GC-MS analise.

Deur van gedragstoetse met honde gebruik te maak, is met behulp van biotoetsgeleide mikropreparatiewe gaschromatografie daarin geslaag om die aktiewe komponente te isoleer. Daar is gevind dat ’n reeks onvertakte aldehiede, vanaf heksanaal tot dodekanaal, gesamentlik verantwoordelik is vir die afweerwerking wat die bosluis se afskeiding op honde het.

Ekstraksie van sonneblomolie (*Helianthus annuus*) met superkritieke koolstofdioksied

A.A. Wessels (NWU), E.L.J. Breet (NWU), J.C. Breytenbach (NWU), A. Nel (ARC-LNR)
Skool vir Farmasie, Noordwes-Universiteit

Sonneblomolie het verskeie gebruike in die farmaseutiese, kosmetiese en voedselnywerhede. Superkritieke koolstofdioksied (sc-CO₂) kan die aktiewe bestanddele van plante isoleer sonder om termiese of chemiese ontbinding te veroorsaak of om ekstrakte met oplosmiddelreste te lewer.

Verskillende vries-, oond- en natuurlik gedroogde saadmonsters (3.5 g) is met ISCO SFX 220 en LECO TFE 2000 superkritieke fluïedekstraktors by temperature 35 - 90°C en drukke 250 - 620 bar geëkstraheer. Die vloeiempo is onderskeidelik tussen 1.8 - 2.5 mL/min gevarieer met die ISCO SFX 220 en op 1.5 L/min konstant gehou met die LECO TFE 2000. Die ekstrakte is vir % suur, peroksiedinhoud, % vog, seep- en jodiuminhoud deur 'n sonneblomolievervaardiger (EPKO) geanaliseer.

Die persentasie olie (m/m) wat met sc-CO₂ geëkstraheer is, beloop (44 ± 2) % na 'n optimale ekstraksieduur van slegs 60

minute. Dit vergelyk gunstig met die opbrengs van 26.1% (m/m) wat met die koelpersmetode verkry word en die persentasie olie (m/m) van (44 ± 1) % wat met behulp van Soxhlet geëkstraheer word. Die sc-CO₂-verkreë olie is 100% natuurlik, bevat geen oplosmiddels of modifiseerders nie en het 'n merkbaar laer vetsuurinhoud as selfs die uitgeperste olie. Die optimumkondisies vir die ekstraksie met sc-CO₂ is met behulp van 'n statistiese eksperimentele ontwerp as 70°C en 625 bar vasgestel, wat neerkom op 'n fluïeddigtheid van 0.964 g/mL. Die sc-CO₂ is by hierdie digtheid 'n "vloeistof" met voortreflike oplosmiddelsterkte. Die ekstraksieproses word op grond daarvan as 'n chemiese oplosproses getipeer.

Die gehalte van sc-CO₂ geëkstraheerde sonneblomolie en die wesenlik korter ekstraksietyd maak die ekstraksie met sc-CO₂ die metode van voorkeur.

Samestelling van superkritieke koolstofdioksied-verkreë ekstrakte van *Mentha piperita*

G. Naudé,* E.L.J. Breet† en J.C. Breytenbach*
Skool vir Farmasie* en Chemie†, Noordwes-Universiteit

Superkritieke fluïedekstraksie word in hierdie projek aangewend om vlugtige oliës uit pepermentblare te isoleer. Die voordele van die tegniek bo tradisionele ekstraksiemetodes (stoomdistillasie, Soxhlet-ekstraksie) sluit oplosmiddelvrye ekstrakte en isolasie van termies gevoelige komponente in. Die ekstrakte van *Mentha piperita* kan na gelang van die samestelling in sowel die farmaseutiese as die geurmiddelnywerheid gebruike vind.

Ekstraksies is met laboratorium- sowel as loodsaanleg skaal-superkritieke fluïedekstraktors uitgevoer. Die samestelling van die ekstrakte wat by verskillende kondisies verkry is, is met GC, GC-MS en 2D-GC/TOF-MS bepaal. Die kondisies vir optimum opbrengs is met behulp van 'n statistiese eksperimentele ontwerp vasgestel.

Die opbrengs word hoofsaaklik deur die temperatuur en druk (of digtheid) bepaal. Die digtheid bepaal weer die oplosmiddelsterkte van die superkritieke fluïed, waaruit blyk dat die ekstraksieproses meganisties as 'n chemiese oplosproses getipeer kan word. Die ekstraksiedata pas 'n wiskundige prosesbeskrywing wat op 'n dimensielose groepering van veranderlikes gebaseer is. Die samestelling van die ekstrakte kan in 'n mate verander word deur bogenoemde veranderlikes te verstel. Die analiseresultate dui daarop dat komponentryke ekstrakte met superkritieke koolstofdioksied verkry word.

Die resultate toon dat SFE vir die ekstraksie van komponente uit pepermentblare 'n werkbare alternatief vir klassieke ekstraksie bied.

Sirkoonveredeling

Ettienne Snyders

Suid-Afrikaanse Kernenergiekorporasie Beperk (Necsa - *South African Nuclear Energy Corporation*)

Suid-Afrika is tans, naas Australië, die grootste verskaffer van sirkoon (ZrSiO₄) in die wêreld. Die meerderheid sirkoon, ongeveer 49% van 'n totale jaarlikse produksie van naastebly 1 miljoen ton wêreldwyd, word gebruik in die keramiekindustrie, hoofsaaklik as opasifiseerder vir teëls en sanitêre ware. Ongeveer 9% van die sirkoonproduksie word gebruik vir die vervaardiging van sirkonia vir onder andere pigmente, sirkoniumchemikalieë en sirkoniummetaal.

Bykans 96% van Suid-Afrika se sirkoonproduksie word

uitgevoer teen pryse wat wissel van ongeveer R 3.30 tot R 3.60 per kilogram. Die veredelde sirkoonprodukte, byvoorbeeld sirkoon-gedoteerde pigmente en gemaalde sirkoon (opasifiseerder), word gevolglik ten duurste ingevoer en plaaslik verkoop vir ongeveer R 110 en R 6 per kilogram onderskeidelik.

Die doel van dié navorsing is om sirkoon plaaslik te veredel en sodoende waarde toe te voeg deur innoverende vervaardigingsmetodes, wat aanleiding gegee het tot die registrasie van twee patente deur Necsa.

'n Alternatiewe bereidingsmetode vir die vervaardiging van sirkoon-gedoteerde pigmente deur gebruik te maak van plasmagedissosieerde sirkoon as uitgangstof, is ontwikkel. Hierdie unieke vervaardigingsmetode, wat geen vooraf maling of chemiese behandeling van plasmagedissosieerde sirkoon vereis nie, is gevolglik 'n meer kostedoeltreffende proses vir die vervaardiging van vanadium-blou, praseodymium-geel en ysterkoraal sirkoon-gedoteerde pigmente.

'n Tweede sirkoonveredelingsprojek behels die opgradering van 'n swakker graad sirkoon (standaardgraad) wat oor ekwivalente of beter opasifiseringseienskappe beskik as die premiumgraad sirkoon wat tans kommersieel gebruik word as opasifiseerder in keramiektoepassings. Hierdie unieke bereidingsmetode verbeter die opasifiseerbaarheid van sirkoon vir keramiektoepassings drasties en verkort die maaltyd van sirkoon met amper die helfte.

Parametriseringsmetodes vir geslote driedimensionele liggame

W.H. Brink en M.F. Maritz

Departement Toegepaste Wiskunde, Universiteit van Stellenbosch

Die parametrisering van 3D-liggame is 'n fundamentele probleem in rekenaargrafika. Dit speel 'n belangrike rol in toepassings soos monsterneming, multiresolusie-analise, filtrering, morfose en tekstuurafbeelding. 'n Algemene manier om 3D-liggame op 'n rekenaar voor te stel, is om van 'n netwerk van veelhoeke, wat die oppervlak van die liggaam beskryf, gebruik te maak. Deur liggame op hierdie wyse voor te stel, is daar 'n noue verwantskap met grafiekteorie - elke liggaam het 'n onderliggende grafiek.

Vir die doel van hierdie referaat, beperk ons onself tot liggame wat topologies ekwivalent aan die eenheidsfeer is (met ander woorde, genus-0 liggame). Dit volg dan dat 'n geskikte parameterruimte vir hierdie liggame die oppervlak van 'n sfeer is. Om 'n gegewe liggaam te parametriseer word daar dan 'n een-tot-een afbeelding op die oppervlak van die sfeer gesoek. Daar word vereis dat hierdie afbeelding die sfeer se oppervlak heeltemal moet vul, en ook dat geen lyne in die onderliggende grafiek van die afbeelding mekaar mag sny nie. Vanweë die topologie van die liggame bestaan daar altyd 'n oplossing vir hierdie probleem.

Daar is verskeie metodes om sulke oplossings te vind, byvoorbeeld die toepassing van Laplace-verslapping (met en sonder randwaardes), en progressiewe netwerke. Laplace-verslapping is 'n iteratiewe proses, wat begin met 'n aanvanklike verspreiding op die sfeer (wat eenvoudig verkry kan word deur elke punt van die liggaam te normeer), en dan elke punt se koördinate te vervang met 'n geweegde gemiddeld van die

koördinate van sy buurpunte. Hierdie iterasie konvergeer dan hopelik na 'n geldige oplossing. Vir sekere liggame is hierdie metode baie suksesvol en goeie oplossings kan met relatief min moeite verkry word. Die probleem is egter dat geldige oplossings nie gewaarborg is nie. Vir sommige liggame verval die onderliggende grafiek van die afbeelding tot 'n enkele punt, of dit verg net bloot heeltemal te veel iterasiestappe (en dus berekening) om 'n geldige oplossing te verkry.

'n Alternatiewe metode, wat wel 'n oplossing waarborg, is om randwaardes op te lê. Twee punte van die liggaam, wat in die parameterruimte ooreenstem met die noord- en suidpool van die sfeer, word uitgesoek. 'n Lyn wat die noord- en suidpool verbind, word ook uitgesoek. Op hierdie twee punte en op die lyn wat hulle verbind, word randwaardes dan afgedwing. Hierdie metode waarborg wel oplossings, maar die aard van die oplossings is nie altyd na wense nie. Dit gebeur tipies dat hierdie metode nie 'n baie egalige verspreiding oor die sfeer se oppervlak bewerkstellig nie. 'n Meer egalige verspreiding kan wel hieruit verkry word deur Laplace-verslapping op hierdie oplossing toe te pas. Bevredigende oplossings is op hierdie wyse verkry vir 'n diverse versameling van toetsvoorbeelde. 'n Kwessie wat nog aangespreek moet word, is die spesifieke strategie om die twee pole op die liggaam uit te soek. Daar word tans gekyk na die moontlikheid om simmetrie in 'n gegewe liggaam te vind, en dan vir hierdie doel aan te wend.

Outonome koppelvlakagente vir die evaluering van rekenaarprogramme

Gideon Francois Joubert

Standard Bank Akademie vir Inligtingstegnologie, Universiteit van Johannesburg

Outonome koppelvlakagente is 'n relatiewe nuwe area van navorsing in die kunsmatige intellegensie-arena. Direk afkomstig van koppelvlakagente, volg dit dat die klas van sagteware-agente al die eienskappe van standaard koppelvlakagente toon, sowel as outonomie. Dus, die gebruiker moet die outonome aksies van die agent in die koppelvlak kan waarneem, en ook die agent moet die outonome aksies van die gebruiker in die koppelvlak kan waarneem.

Die volgende drie eienskappe van mens-rekenaar-interaksie sal in die toekoms toenemend van belang wees:

- Die vermoë van die outonome koppelvlakagent om met dieselfde koppelvlak as die menslike gebruiker interaktief te verkeer.

- Die vermoë van die outonome koppelvlakagent om individueel met die koppelvlak te verkeer.
- Die vermoë van die outonome koppelvlakagent om gelyktydig met die menslike gebruiker, met die koppelvlak te verkeer.

Al hoe meer toekomstige rekenaarprogramme sal met hierdie drie vereistes in gedagte ontwerp word.

Die studie van outonome koppelvlakagente is onderneem met menslike hulpbronoptimering in gedagte. By die Standard Bank Akademie van Inligtingstegnologie, Universiteit van Johannesburg, is daar die behoefte aan 'n outonome sisteem wat die evaluering van eerstejaar Visual Basic.Net programme kan vergemaklik. Dit is die mening van die lektor dat die assistente

wat huidige die evaluering behartig, se waardevolle tyd eerder aangewend kan word om eerstejaarstudente met probleme te ondersteun.

Kunsmatige intelligensietegniese wat bestudeer is tydens hierdie navorsingsprojek, sluit ondermeer die volgende in:

- Masjienleer
- Enige tyd-leer

- Konteksgebaseerde redenasie
- Genetiese algoritmes.

In die referaat is elk van die onderwerpe kortliks aangeraak en daarna is hul toepassing en implementering in die finale sisteem bespreek.

Plagiaatsnuier vir rekenaarprogramme

McElory Hoffmann

Departement Rekenaarwetenskap, Universiteit van Stellenbosch

'n Stelsel is ontwikkel om plagiaat in C-programme op te spoor. Die stelsel is gebaseer op standaard patroonpassingstegniese, maar daar word ook gebruik gemaak van heuristiese wat voortspruit uit ons kennis van plagiaat.

Die stelsel bestaan uit 'n taal-afhanklike voorverwerker, 'n vergelykingsenjien en 'n dokumentgenereerder. Tipies is die voorverwerker 'n leksikale ontleder en/of 'n sintaksontleder. Die afvoer van die voorverwerker is stringe wat die struktuur van die program bevat.

Die stringvoorstellings van die programme word as invoer vir die vergelykingsalgoritme gebruik. Afhangende van die mate van

oorsleueling wat daar bestaan in die invoerstringe, sal daar 'n besluit geneem word of twee programme met mekaar ooreenstem al dan nie. 'n Algoritme, bekend as "Running Karp-Rabin Greedy String Tiling" word as die vergelykingsalgoritme gebruik.

Die afvoer van die stelsel is beskikbaar in XHTML formaat. Ooreenstemmende dele in verskillende programme word met verskillende kleure gekodeer. 'n Eendersheidswaarde word ook aan elke paar programme toegeken.

Empiriese resultate dui daarop dat die stelsel in staat is om die meeste bekende gevalle van plagiaat te herken.

Die toepassing van LULU-gladstrykers op finansiële tydreeks

M.D. Jankowitz, W.J. Conradie* en T. de Wet*

Departement Kwantitatiewe Bestuur, UNISA en *Departement Statistiek en Aktuariële Wetenskap, Universiteit van Stellenbosch

Tydreeksdata bestaan gewoonlik uit 'n gladde komponent (sein) en 'n growwe komponent (ruis). Die doel van gladstryking van 'n tydreeks is om die stogastiese fout te verminder; sodoende is die variansie van die gladgestrykte ry kleiner in vergelyking met die variansie van die oorspronklike ry.

Gladstrykers kan in twee klasse verdeel word, naamlik lineêre en nielineêre gladstrykers. Lineêre gladstrykers is nie gepas vir alle probleme nie, en nielineêre gladstrykers het gevolglik al hoe meer aandag begin kry sedert 1974 toe Tukey die bewegende mediaan vir tydreeksanalise voorgestel het.

LULU-gladstrykers, 'n nuwe klas van nielineêre gladstrykers, is in 1989 deur C. H. Rohwer bekendgestel. LULU-gladstrykers is gebaseer op maksimum en minimum operatore. Dit blyk dat LULU-gladstrykers meer aantreklike wiskundige eienskappe het in vergelyking met ander nielineêre gladstrykers. Die LULU-gladstrykers is suksesvol toegepas in die velde van beeldprosessering, ingenieurswese en die aardwetenskappe.

Die waarskynlikheidsverdelings van kombinasies van LULU-

gladstrykers is vir verskillende venstergroottes en die algemene geval afgelei. Die asimptotiese verdelings van LULU-gladstrykers is ook ondersoek.

LULU-gladstrykers het besonder aantreklike eienskappe soos die wyse waarop dit blokpulse hanteer, asook die wyse waarop dit die variasie in 'n tydreeks opbreek met rekursiewe toepassing. Hierdie eienskappe word empiries geïllustreer deur middel van die toepassing van LULU-gladstrykers op finansiële data.

'n Teoretiese vergelyking tussen LULU-gladstrykers en die mediaangladstrykers word ook getref.

Die gladstryking van 'n tydreeks speel 'n baie belangrike rol in die beraming van volatilititeit van finansiële tydreeks. LULU-gladstrykers sal op finansiële tydreeks toegepas word en die impak daarvan op die beraming van volatilititeit sal ondersoek word. Die uitkoms hiervan kan met bestaande modelle, soos EWMA, ARCH en GARCH, vergelyk word om die bruikbaarheid van LULU-gladstrykers te bepaal.

Gronderosievoorspelling met verandering in grondgebruik op Mauritius

J.J. le Roux

Departement Geografie, Universiteit van Pretoria

Meer as helfte van die totale oppervlakte van die eiland Mauritius (1844 km²) word intensief verbou, hoofsaaklik met suikerriet. Suikerrietverbouing mag heel waarskynlik gediversifiseer word na ander landboustelsels, aangesien die industriële tans hewige ekonomiese beperkinge ondervind. Besorgdheid oor die suikerrietindustrie en die gevolge van landboudiversifisering noodsaak die toepassing van grondverliesmodelle binne die raamwerk van 'n Geografiese Inligtingstelsel (GIS). Dié studie integreer GIS-tegnieke met twee empiriese grondverliesmodelle: Die *Revised Universal Soil Loss Equation* (RUSLE); en die *Soil Loss Estimation Model of Southern Africa* (SLEMSA). Albei modelle, asook die GIS-toepassing genoem *Soil Erosion Assessment Using GIS* (SEAGIS), is gebruik om grondverlies onder 'n verskeidenheid van grondgebruik in die 32 km² Rivier Des Anguilles opvanggebied (RDAO) in suidelike Mauritius te bepaal. Die RUSLE is addisioneel gebruik om potensieël

grondverlies te voorspel op toekomstige landboudiversifiseringssenario's, naamlik groente, pynappel en bosbou. Voorspelde grondverlieswaardes van die RDAO, onder huidige en toekomstige omstandighede, is ook gekarteer.

Gemiddelde grondverlieswaardes vir huidige omstandighede in die opvanggebied is geskat op ongeveer 11 t·ha⁻¹·jr⁻¹ deur die RUSLE en 22 t·ha⁻¹·jr⁻¹ deur SLEMSA. Resultate dui verder daarop dat landboudiversifisering 'n aansienlike invloed op gronderosie sal hê. In vergelyking met die huidige situasie, sal die gemiddelde grondverlies in die RDAO verdubbel met pynappelverbouing en verviervoudig vermeerder met groenteverbouing. In teenstelling hiermee, sal die gemiddelde grondverlies met ongeveer 98% afneem met bosbou. Grondeienaars en die regering kan resultate en voorstelle in die studie gebruik vir die bevordering van lewensvatbare landboustelsels wat nie die landelike hulpbronne sal degradeer nie.

Bewustheid van atmosferiese besoedeling op die hoëveld van Mpumalanga

Moses David Mathebula

Departement Geografie, UNISA

Die hoëveld van Mpumalanga het oor jare tot die hart van Suid-Afrika se industriële sektor ontwikkel. Alhoewel baie industriële in hierdie gebied voorkom, word SASOL en Eskom aanhoudend deur die media en die algemene bevolking as die hoofbronne van slechte reuke, deinsigtheid en ander lugbesoedelingsverwante probleme geblameer.

'n Navorsingsprojek is in 2001 begin om 'n aanduiding te kry van die mate waartoe laasgenoemde twee industriële vir lugbesoedeling in die Secunda- en Standerton-gebiede verantwoordelik is. In die lig van die beplande heropening van drie Eskom-kragstasies in en om hierdie gebied, is hierdie studie tydig.

Aangesien die persepsie van mense oor atmosferiese besoedeling en die gevolge daarvan deur hulle kennis en bewustheid in dié verband beïnvloed word, het die eerste deel van die studie behels om inligting hieroor in te samel. Die studie het ook ondersoek

ingestel na die werklike oorsprong van die besoedeling tydens elke besoedelingsepisode soos deur respondente geïdentifiseer. Hierdie aanbieding fokus egter op die eerste deel van die studie.

Die een studiegebied behels die gebied binne 'n radius van 30 km vanaf Secunda. Die tweede het Standerton as middelpunt. Inligting oor kennis en bewustheid van lugbesoedeling by die algemene bevolking in die studiegebiede is deur vraelyste ingesamel. Die opnamegebiede is met behulp van gestratifiseerde steekproefneming geïdentifiseer. Respondente is met behulp van ewekansige steekproefneming gekies.

Daar is bevind dat daar 'n baie lae vlak van bewustheid oor lugbesoedeling in die studiegebied is. Van die totale steekproef wat geneem is, is 74% van die respondente onbewus van lugbesoedeling. Respondente wat wel van lugbesoedeling bewus is, het reuke, rook en stof as algemene probleme geïdentifiseer.

Tanzanietmineralisasie

B. Olivier

Edelsteennavorsingsentrum, Departement Geologie, Universiteit van Stellenbosch

Tanzaniet is die blou-violet edelsteenvariëteit van die mineraal *zoisite*. Dit is tans een van die mees gesogte kleureldstene in die wêreld met 'n jaarlikse industrieverkoopswaarde van meer as sewe honderd miljoen rand. Tanzaniet is uniek omdat daar tot op hede slegs een afsetting in die wêreld bestaan, waarvan die huidige leeftyd tans bereken word as net meer as 'n dekade.

Tanzaniet kom slegs voor in noord-oos Tanzanië in 'n area van ongeveer 7 km by 1 km. Die baie besonderse afsetting het ontstaan deur die samekoms van 'n netwerk van uiters unieke geochemiese en strukturele komponente.

Die afsetting vorm deel van die Mosambiek mobiele gordel en is geleë op die noord-westelike flank van die Letatema

Antiform. Die ontstaan en vervorming van die antiform tydens die Oos-Afrika orogenese (550 Ma) het veroorsaak dat die tanzanietafsetting intensief verplooi is. Die verplooiing is gesuperponeer oor ouer bestaande plooi- en boudin- (>1 Ga) strukture. Die boudins kom hoofsaaklik slegs in die geochemiese unieke ertssone voor, wat bestaan uit kompetente kalk-silikate. Die kalk-silikate word omring deur meer vervormbare gneisse wat gelei het tot 'n skarn-tipe uitruiling van elemente tussen die kalk-silikate en die gneisse onder granuliet fasies metamorfose. Tanzanietmineralisasie het ontstaan as gevolg van gepaardgaande

hidrotermale vanadiumryke vloeistowwe wat gekristaliseer het in lae druksone binne in die boudinstrukture. Die vanadium is verantwoordelik vir die blou-violet kleur van tanzaniet en is afkomstig vanaf grafiet wat in hoë konsentrasies in die gneisse voorkom. Die oorgrote meerderheid van tanzaniet in die wêreldmark word verhit, wat tot gevolg het dat tanzaniet verander van 'n tri-chromiese na 'n di-chromiese mineraal. Dit word veroorsaak deur die valensieverandering van vanadium en titaan in die tanzanietkristalstruktuur, wat 'n meer intense en gesogte blou kleur aan die edelsteen lewer.

Die gebruik van geochemiese eksplorasiemetodes vir die eksplorasië van kleuredelsteenafsetting met spesifieke verwysing na Tanzaniet

R.N. Hansen

Raad van Geowetenskap, Pretoria

Geochemiese eksplorasiemetodes word al vir dekades binne die metaalindustrie in die soektog na metaalagtige afsettings gebruik. Dieselfde kan egter nie van die groeiende edelsteenindustrie gesê word nie. Die vraag ontstaan dus of geochemie vir die eksplorasië van onbekende edelsteenafsettings gebruik kan word. Die naam "kleuredelsteen" dui daarop dat dit dalk moontlik mag wees, omdat die kleur in baie gevalle deur chromoforiese spoorelemente teweeg gebring word.¹⁻⁴

'n Geochemiese studie is in die omgewing van die tanzanietafsetting in die Merelani-gebied in noord-oos Tanzanië uitgevoer. Die fokus was om die gedrag van sekere spoorelemente te bepaal om sodoende 'n eksplorasiemodel vir die eksplorasië van tanzaniet af te lei. Dit sou dan hopelik die weg baan vir 'n eksplorasiemodel vir die eksplorasië van kleuredelsteenafsettings in die algemeen.

Die tanzanietafsetting is in die Lelatema-bergreeks in noord-oos Tanzanië gesetel, wat weer op sy beurt in die groter noord-suidstrekende Mosambiekgordel geleë is.⁵ Hierdie gordel strek vanaf die Arabies-Nubiese skild in die noorde tot Antarktika in die suide. Die orogenetiese gordel bevat neoproterozoïese metasedimente wat tydens die pan-Afrika tektono-metamorfe gebeurtenis herwerk is.⁶

Drie tipes media is vir die doel van die studie gemonster:

1. Gronde vanuit 'n sloot wat loodreg op die Merelani-litologieë se strekkingsrigting en oor geminaliseerde sowel as ongeminaliseerde litologieë gegrawe is.
2. Stroomsedimente vanuit drie eerste- en tweede-ordestrome wat in 'n area wat geminaliseerde litologiese horisonne bevat, geleë is.
3. Kalkreë wat oor 'n tanzaniet-geminaliseerde horison geleë is.

Verwerking van die grondmonster- en stroomsedimentdata het positiewe resultate gelewer, terwyl geen verwantskap tussen die kalkreë en die geminaliseerde horison gevind is nie.

Dit blyk uit bogenoemde studie dat die spoorelemente in beide die gronde sowel as in die strome op hoofsaaklik fisiese maniere gemobiliseer word. Hidromorfiese spoorelement-mobilisasie is tot die minimum beperk. Die gronde word as gevolg van die feit dat dit op 'n helling geleë is, deur swaartekrag en reënwater in die reënseisoen gemobiliseer. Berekening was dus nodig om te korrigeer vir die grondbeweging en die resultate het die elementprofiele tot gevolg gehad wat naby aan dié van die onderliggende litologieë is. Dit het ook duidelik geword dat V 'n belangrike element in die eksplorasië van tanzaniet is.

Die stroomsedimente word hoofsaaklik in die reënseisoen gemobiliseer. Faktoranalises op die stroomsedimente het 'n moontlike verwantskap tussen geminaliseerde litologiese horisonne en die posisie van 'n stroomsedimentmonster aangedui. Opvolgwerk word aanbeveel ter bevestiging van hierdie resultate.

1. Levitski, A.G., Sims, D.H.R. (1997). *Jnl. Geoch. Expl.*, 59, 87-98.
2. Fritsch, E., Rossman, G.R.A. (1987). *Gems & Gemology*, Fall, 127-139.
3. Fritsch, E., Rossman, G.R.A. (1988). *Gems & Gemology*, Spring, 3-15.
4. Fritsch, E., Rossman, G.R.A. (1988). *Gems & Gemology*, Summer, 81-102.
5. Muhongo, S., Lenoir, J.L. (1994). *Journal of the Geological Society of London*, 151, 343-347.
6. Stern, R.J. (1994). *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 22, 319-351.

Die semantiese web en voordele wat dit vir objekherkenning kan inhou

U. Minnaar

Standard Bank Akademie vir Inligtingstegnologie, Universiteit van Johannesburg

In 1989 het Tim Berners-Lee sy visie van die *World Wide Web* aan CERN voorgelê, maar die huidige web skiet steeds ver tekort aan hierdie visie, en die semantiese web-inisiatief is 'n poging om hierdie visie te verwesenlik.

Van die woord "semanties", wat met betekenis te doen het, kan 'n mens aflei dat die semantiese web iets is wat verstaan kan word – met ander woorde 'n web wat masjiënverstaanbare data bevat. Volgens Berners-Lee is die semantiese web 'n "extension

of the current Web, in which information is given well-defined meaning, enabling computers and people to work in better cooperation". Hier verwys "masjiënverstaanbare data" na data wat deur 'n masjiën verwerk kan word. In die semantiese web word sodanige "goed gedefinieerde" data geskep deur die gebruik van XML-gebaseerde tale, soos RDF, om ontologieë te skep.

Een van die hoofkategorieë van objekherkenning is RBC ("Recognition by Components"), waar 'n objek in basiese komponente opgebreek word. Hierdie herkenningkategorie kan baat vind by semantiese webkonsepte. Deur agente te skep wat

toegang het tot 'n ontologie wat die basiese komponente beskryf, sowel as moontlike verhoudings tussen komponente, kan 'n agent sy eie objekbeskrywingsontologieë opstel. Hy kan dan die inligting tot sy beskikking gebruik om te bepaal of 'n nuwe objek soortgelyk is aan 'n bekende objek, of om afleidings oor die objek te maak (bv. dat twee objekte dieselfde is omdat $\langle A \rangle \langle bo \rangle \langle B \rangle$ ekwivalent is aan $\langle B \rangle \langle onder \rangle \langle A \rangle$). Deur agente op die semantiese web vry te stel, ontstaan die moontlikheid van inligtinguitruiling tussen verskillende agente ook.

Molekuulmodellering van die metatese van alkene met Ru-karbeenkomplekse

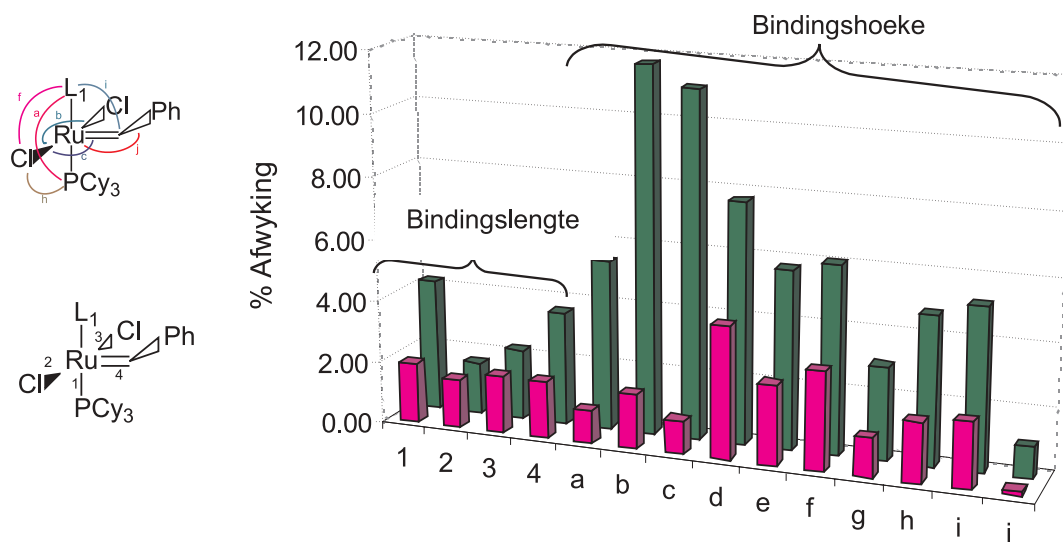
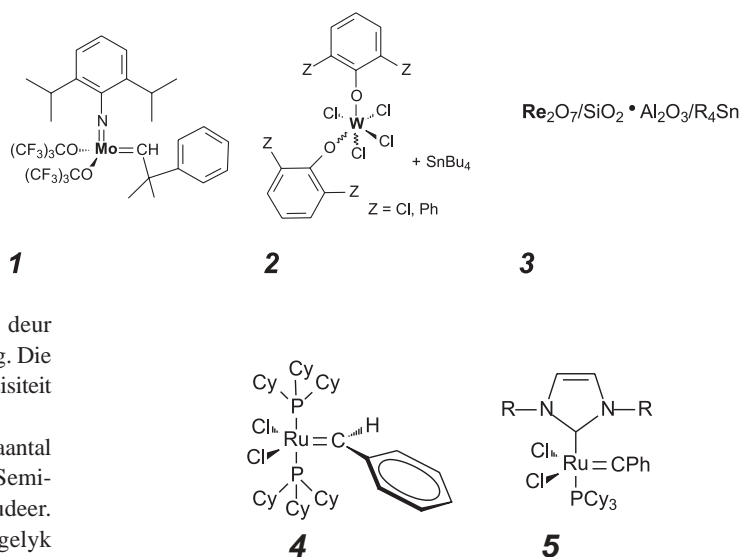
M. Rousseau, P. van Helden, S. Oosthuizen, C.G.C.E. van Sittert en H.C.M. Vosloo

Skool vir Chemie en Biochemie, Noordwes-Universiteit, Potchefstroomkampus, chemr@puk.ac.za

Tydens die vroeë ontwikkeling van die metatesereaksie, is 'n groot aantal swak gedefinieerde veelkomponent-katalitiese sisteme (gebaseer op molibdeen (1), wolfram (2) en renium (3)) ontwikkel wat relatief maklik in die teenwoordigheid van lug, water en polêre funksionele groepe gedeaktiveer het.¹

Die Ru-karbeenkomplekse (4 en 5), ontwikkel deur die Grubbs-groep vir alkeenmetatese, is van belang weens hul hoë aktiwiteit en weerstand teen polêre funksionele groepe.² Die leeftyd en reaktiwiteit van die metaalkarbeen word verhoog³ deur die fosfienligand(e) deur byvoorbeeld *N*-heterosikliese ligande (NHC) (5) te vervang. Die toename in aktiwiteit is aan die steriese aard en verhoogde basisiteit van die ligand in vergelyking met PCy₃ toegeskryf.⁴

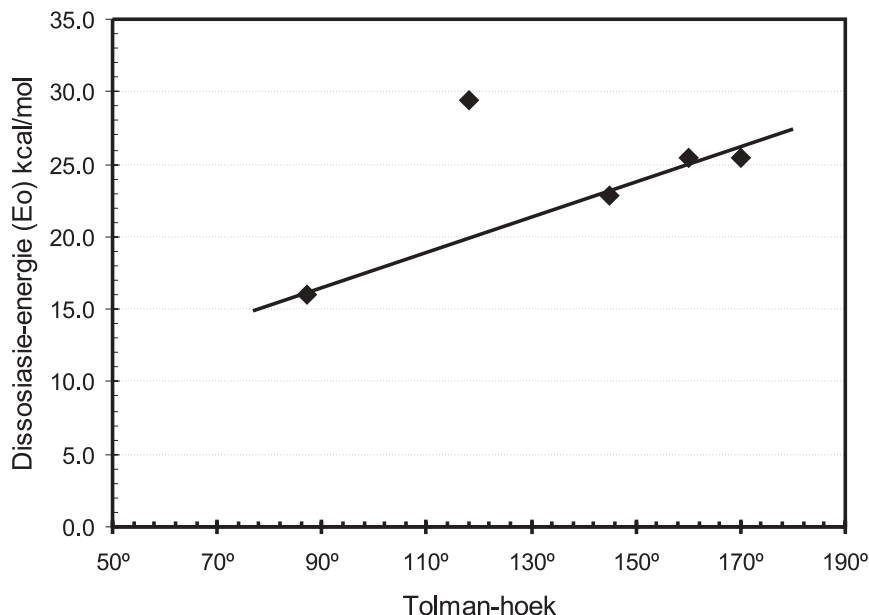
In hierdie studie is molekuulmodellering gebruik om 'n aantal Grubbs-metaalkarbene by verskillende vlakke van teorie (Semi-empiries – Spartan Pro en DFT – Materials Studio) te bestudeer. Die resultate is met beskikbare kristallografiese data vergelyk om sodoende die modelleringstegniek te verifieer. Grafiek 1 toon dat die DFT-berekeningsmetode (GGA/PW91-funksionaal en DNP-basisstel) beter vergelykbaar was met die kristallografiese data en is dus verder in die studie gebruik.



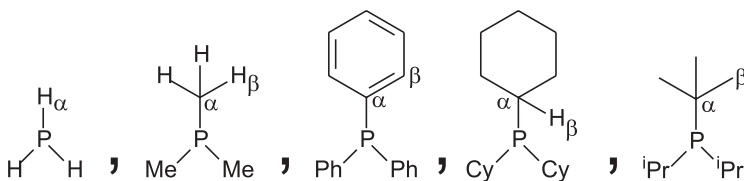
Grafiek 1: % Afwyking van berekende waardes vanaf kristallografiese data DFT – Materials Studio (DMol³) teenoor Semi-empiries – Spartan Pro (PM3)

Die effek van liganddissosiasie op die katalitiese aktiwiteit van $[(L_1)(L_2)Cl_2Ru=CHPh]$ -tipe katalisatore in die aktiveringstap, is bestudeer. Met die uitsondering van die PMe_3 -ligand, is 'n lineêre verband tussen die dissosiasie-energie en steriese massa, gemeet aan die Tolman-hoek, van die fosfienligande gevind (Grafiek 2). Die PMe_3 -ligand moet dus struktureel verskillend

wees van die ander fosfienligande aangesien dit slegs 'n Tolman-hoek van 118° het, maar die hoogste dissosiasie-energie. Die verhoogde dissosiasie-energie word toegeskryf aan 'n sekondêre elektroniese effek, naamlik hiperkonjugasie. Die interaksie van die gevulde bindende π -tipe orbitale van die drie metielgroepe met die ongevulde niebindende p-orbitaal van fosfor, gee



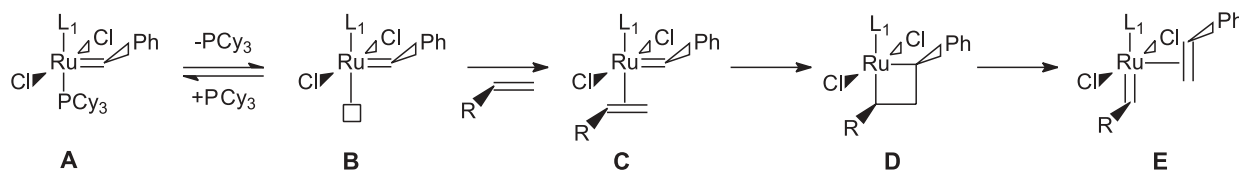
Grafiek 2: Ligand dissosiasie-energie as funksie van steriese massa vir $[(L_1)(L_2)Cl_2Ru(=CHPh)]$ met $L_1 = L_2$



Skema 1: Die α en β posisies op die fosfienligande PH_3 , PMe_3 , PPh_3 , PCy_3 en $PiPr_3$

aanleiding tot die delokalisasie van elektrone en dus 'n verhoogde σ -skenkende effek van die fosfienligand. Die ander ligande, met die uitsondering van PCy_3 , toon geen hiperkonjugasie weens die afwesigheid van 'n H-atoom op die β -posisie nie (Skema 1).

Tot op hede is slegs 'n beperkte aantal molekuulmodelleringstudies op die meganisme van alkeenmetatese in die teenwoordigheid van **4** gedoen. Die meeste van die studies is met



Skema 2: Dissosiatiewe meganisme van alkeenmetatese met $[(L_1)(L_2)Cl_2Ru=CHPh]$ katalisatore.

vereenvoudigde substrate en ligande gedoen.^{5,6} Na aanleiding van die studies het Adlhart et al.⁵ 'n aantal meganistiese weë voorgestel wat in twee hoofkategorieë ingedeel kan word, naamlik 'n assosiatiewe en dissosiatiewe meganisme.

Die aktiveringstap (A-E) van die dissosiatiewe meganisme (Skema 2) vir 1-okteenmetatese met **4** en **5** is met behulp van molekuulmodellering bestudeer.

'n Goeie verband tussen die berekende en literatuur^{5,6} energiewaardes vir die fosfienligand-dissosiasie-energie is gevind (Tabel 1).

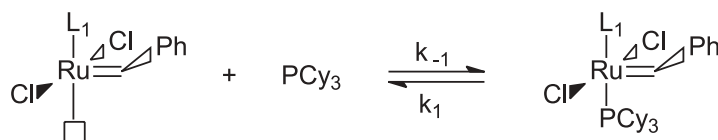
TABEL 1 Vergelyking tussen elektroniese dissosiasie-energie en literatuur waardes

Ligand Pair L_1/L_2	ΔH^\ddagger kcal/mol	ΔG^\ddagger kcal/mol	ΔE_0 kcal/mol
PCy_3 / PCy_3	23.6 ± 0.5	19.88 ± 0.1	25.4
H_2IMes / PCy_3	27 ± 2	23 ± 0.4	24.4
H_2IMes / PPh_3	21 ± 3	19.6 ± 0.3	19.3
$IMes / PCy_3$	25 ± 4	24 ± 1	25.0

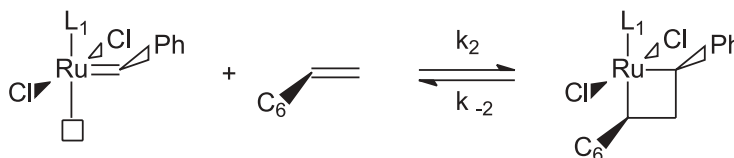
Die verhouding k_{-1}/k_2 vir PCy_3 herkoördinering (Skema 3) teenoor alkeenkoördinerings om metallasiklobutaan te vorm (Skema 4) kan as maatstaf gebruik word om die aktiwiteit van 'n katalisator te bepaal. 'n Verhouding van 4.5 vir Grubbs 1 teenoor 2.8 vir Grubbs 2, toon dat Grubbs 2 'n groter affiniteit vir alkeenkoördinerings sal ervaar as Grubbs 1 en dus die katalitiese sisteem se reaktiwiteit vir alkeenmetatese verhoog.

Vanuit die vergelyking van die berekende bensilideenresultate met die literatuur (Grafiek 3), waar meestal 'n metilideenkompleks gebruik is, is dit duidelik dat die fenielring (aan die karbeen), wel 'n rol speel in die aktivering van die prekatalisator om die aktiewe alkilideen spesie te vorm.

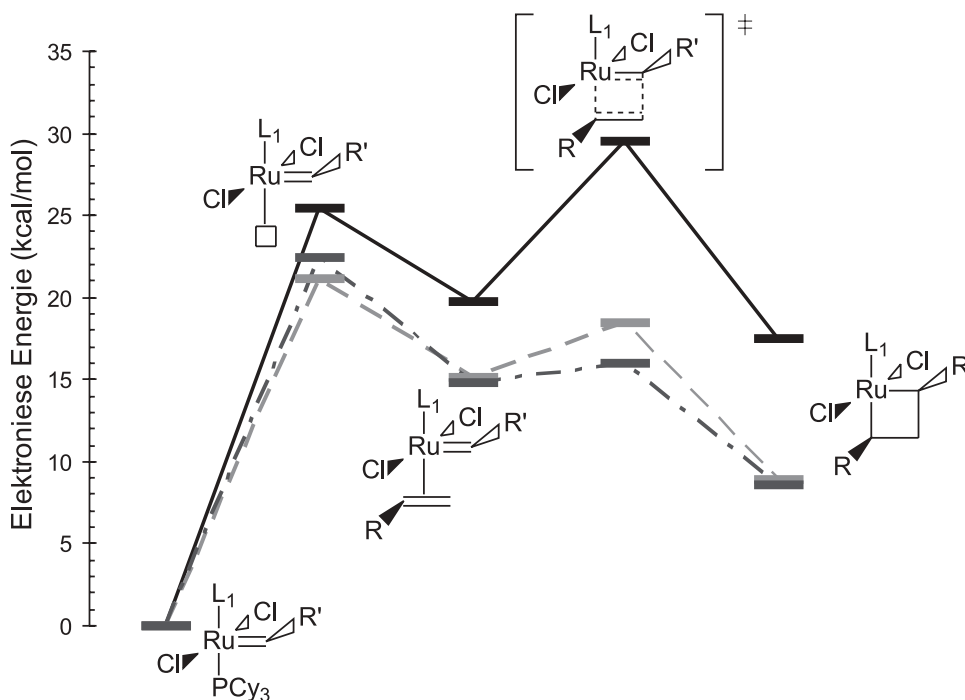
Dit is duidelik dat steriese sowel as elektroniese effekte van die onderskeie ligande 'n rol speel tydens die aktiveringstap van die dissosiatiewe meganisme. Die kompleksiteit van die sisteem verhoog as volledige katalitiese sisteem bestudeer word met relatiewe groot substrate.



Skema 3: PCy_3 herkoördinerings om prekatalisator te vorm



Skema 4: Alkeenkoördinerings om metallasiklobutaan te vorm



Grafiek 3 : Vergelyking met die literatuur: — DMol^3 (DNP/PW91) ($R'=Ph$)
 - - . 2003: ADF (BP86) ($R'=H$) - . - 2004: Jaguar 4.1 (B3LYP/LACVP) ($R'=H$)

- Ivin, K.J., Mol, J.C. (1997). *Olefin metathesis and metathesis polymerization* (Academic Press, San Diego).
- Van Schalkwyk, C., Vosloo, H.C.M., du Plessis, J.A.K. (2002). *Adv. Synth. Catal.*, 344, 781.
- Huang, J., Schanz, H.J., Stevens, E.D., Nolan, S.P. (1999). *Organometallics*, 18, 5375.
- Weskamp, T., Kohl, F.J., Hieringer, W., Gleich, D., Herrmann, W.A. (1999). *Angew. Chem. Int. Ed.*, 38, 2416.
- Adlhart, C., Chen, P. (2003). *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 3496.
- Vyboishchikov, S., Bühl, M., Thiel, W. (2002). *Chem. Eur. J.*, 8, 3962.
- Sanford, M.S., Love, J.A., Grubbs, R.H. (2001). *J. Am. Chem. Soc.*, 123, 6543.

Stikstofbevattende alisikliese verbindings as ligande: sintese en modellerings

D. van Niekerk, A.M. Viljoen, H.C.M. Vosloo

Skool vir Chemie en Biochemie, Noordwes-Universiteit, Potchefstroomkampus

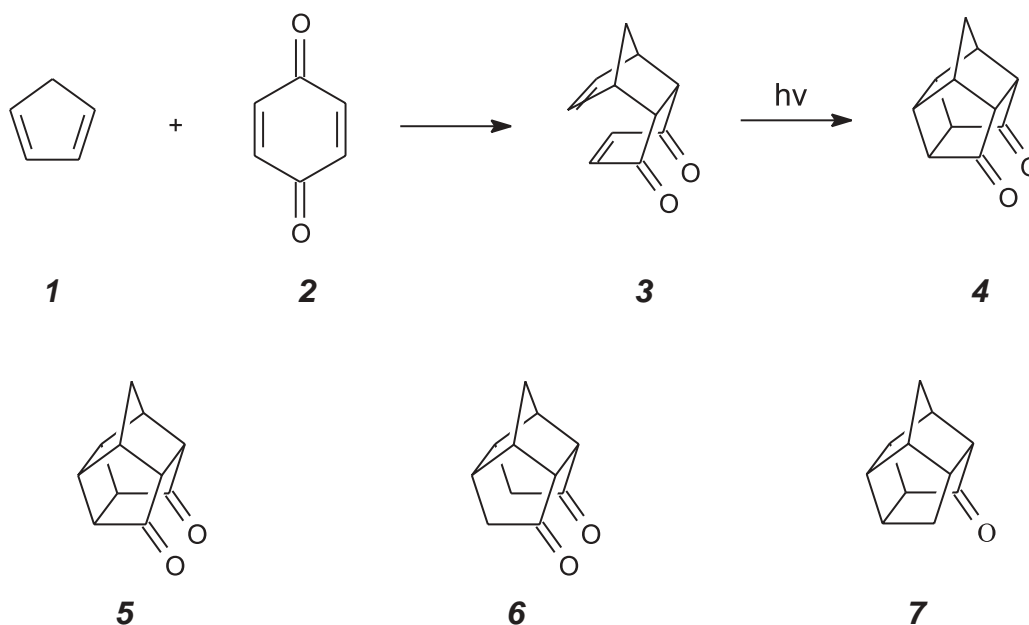
Die studie van alisikliese koolwaterstofverbindings het in die laaste paar jaar op grond van die moontlike gebruike van hierdie verbindings toegeneem. Die fotosiklisering van die endo-Diels-Alder-adduk van p-bensokinoon en siklopentadien lewer die gespanne hokverbinding, pentasiklo [5.4.0.0^{2.6}.0^{3.10}.0^{5.9}] undekaam-8,11-dioon (**4**). Hierdie verbinding is 'n klassieke vertrekpunt vir die sintese van 'n wye verskeidenheid alisikliese verbindings.

'n Potensieel belangrike gebruik van alisikliese verbindings is as ligande in organometaalverbindings. Elektronryk organiese ligande het die vermoë om in oplossing aan metale te bind om stabiele metaal-ligandkomplekse te vorm. Daar is weinig literatuur bekend waarin alisikliese koolstofverbindings optree

as ligande. Slegs enkele voorbeelde bestaan waar alisikliese verbindings aan platinum en molibdeen gebind is.¹⁻⁵ In dié studie is gefokus op die sintese van stikstofbevattende hokverbindings wat moontlik organometaalkomplekse met oorgangsmetale kan vorm.

In die literatuur is drie baie stabiele en maklik bereibare uitgangstowwe geïdentifiseer wat gebruik kan word in die sintese van alisikliese ligande:

Uitgangstowwe **6** en **7** kan vanaf pentasiklo [5.4.0.0^{2.6}.0^{3.10}.0^{5.9}] undekaam-8,11-dioon (**4**) berei word. Verskillende pentasiklo [5.4.0.0^{2.6}.0^{3.10}.0^{5.9}] undekaam-amienverbindings is in die literatuur geïdentifiseer⁶⁻⁹ en in hierdie projek gesintetiseer.



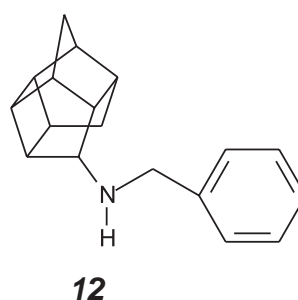
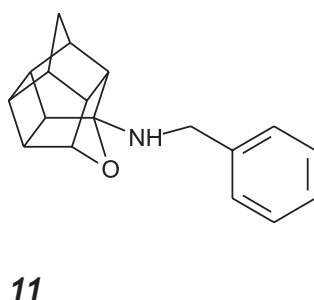
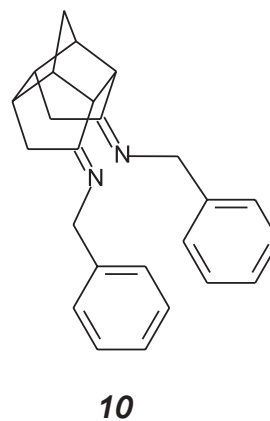
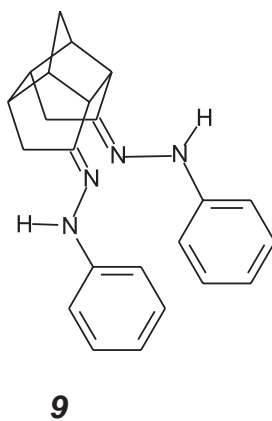
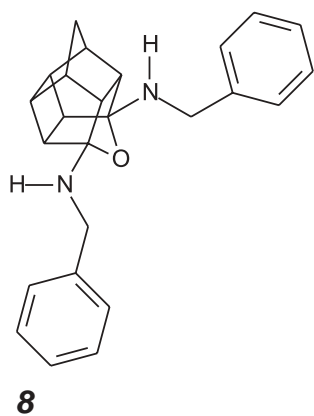
Ligande **8** en **11** was maklik sintetiseerbaar deur 'n metode voorgestel deur Sasaki et al.⁶ wat uitgangstof **5** gebruik het. Sasaki et al.⁶ het bewys dat verskeie stikstofbevattende heterohokverbindings gesintetiseer kan word deur van transannulêre siklisering gebruik te maak. Ligand **9** is gesintetiseer deur uitgangstof **6** te behandel met fenielhidrasien in ethanol onder terugvloei vir 45 minute.⁷ Daar is waargeneem dat wanneer uitgangstof **6** gebruik word in die sintese van alisikliese stikstofbevattende verbindings, geen transannulêre siklisering plaasvind nie. Ligand **14** is vanaf monoketoon **7** gesintetiseer.⁸ Ligand **10** was glad nie in literatuur berei nie en daar is van dieselfde metode as ligand **9** gebruik gemaak.

GC-MS en KMR-analise van ligand **8** en **10** het getoon dat bensielamienkontaminasie teenwoordig was, wat met geen beskikbare skeidingsmetode van die ligand geskei kon word nie.

Ligande **8**, **9**, **10** en **12** is getoets vir ligandaktiwiteit deur van palladiummetaal gebruik te maak. Die bron van palladiummetaal in die studie was litium-tetrachloropalladaat(II) wat maklik bereibaar is vanaf palladium(II) chloried.⁹ Dit is bekend dat

bensielamien en derivate van bensielamien maklik siklopalladering ondergaan met palladium om stabiele organopalladium komplekse te vorm. Ligande **8**, **9** en **10** het onmiddellik met die metaal gereageer om 'n organopalladiumkompleks te vorm wat as 'n geel presipitaat geïsoleer is. Ligand **12** reageer ook met die palladiummetaal om 'n mengsel van suiwer palladium en 'n organopalladiumkompleks te vorm. Die komplekse is met behulp van MS, IR, KMR en SEM met EDS gekarakteriseer.

Die verbindings is met behulp van Accelrys Material Studio en Spartan Pro gemodelleer om kwantum- en fisiese eienskappe van die ligande te bepaal. Molekuulmodellerings het getoon dat al die ligande nog steeds elektrofiliese en/of nukleofiliese aanval kan ondergaan op een of beide van die fenielringe. Elektrostatiese potensiaalberekening is gedoen om die mees elektronegatiewe gebiede in die ligand te bepaal. Dit gee 'n aanduiding van waar 'n metaal moontlik aan die ligand kan koördineer. Modellerings het getoon, soos verwag, dat die metaal sal koördineer met die vry-paarelektrone van die stikstofgroepe van die ligande.



LITERATUURVERWYSINGS

1. Marchand, A.P., Earlywine, A.D. (1984)., *J. Org. Chem.*, 49, 1660.
2. Marchand, A.P., Wu, A-H. (1985). *J. Org. Chem.*, 50, 396.
3. Chow, T.J., Ding, M-F. (1987). *J. Organomet. Chem.*, 329, 212.
4. Lee, T.R., Whitesides, G.M. (1991). *J. Am. Chem. Soc.*, 113, 368.
5. Lee, T.R., Wierda, D.A., Whitesides, G.M. (1991). *J. Am. Chem. Soc.*, 113, 8745.
6. Sasaki, T., Eguchi, S., Kiriya, T., Hiroaki, O. (1974). *Tetrahedron*, 30, 2707.
7. Riesgo, E.C., Jin, X., Thummel, R.P. (1996). *J. Org. Chem.*, 61, 3017.
8. Oliver, D.W., Dekker, T.G., Snyckers, F.O., Fourie, T.G. (1991). *J. Med Chem*, 34, 851.
9. Cope, A.C., Friedrich, E.C. (1968). *J. Am. Chem. Soc.*, 40, 909.

Die depolimerisering van PTFE-afval om sodoende herverkoopbare produkte te vervaardig

I.J. van der Walt, O.S.L. Bruinsma en J.T. Nel

Departement Chemie, Noordwes-Universiteit, Potchefstroomkampus

Fluorkoolstof- (CF) produkte wat nie aan kommersiële spesifikasies voldoen nie, sowel as afvalpolitetrafluoreteileen (PTFE), is van die moeilikste afval om te verwerk. Hierdie afval is nie biodegradeerbaar nie en kan ook nie soos ander termoplastieke hersmelt en hergebruik word nie. Dit veroorsaak dat groot hoeveelhede CF-vastestowwe ophoop en ten duurste in 'n landvulling geberg moet word. Daar bestaan wel prosesse om CF-bevattende produkte te vernietig. In hierdie prosesse vorm produkte soos HF, HCl en CO₂, wat in elk geval as ongewenste afval hanteer moet word. Die stelsel wat in hierdie studie ontwikkel is, skakel die CF-bevattende polimeer PTFE om in bruikbare produkte wat kommersiële waarde het.

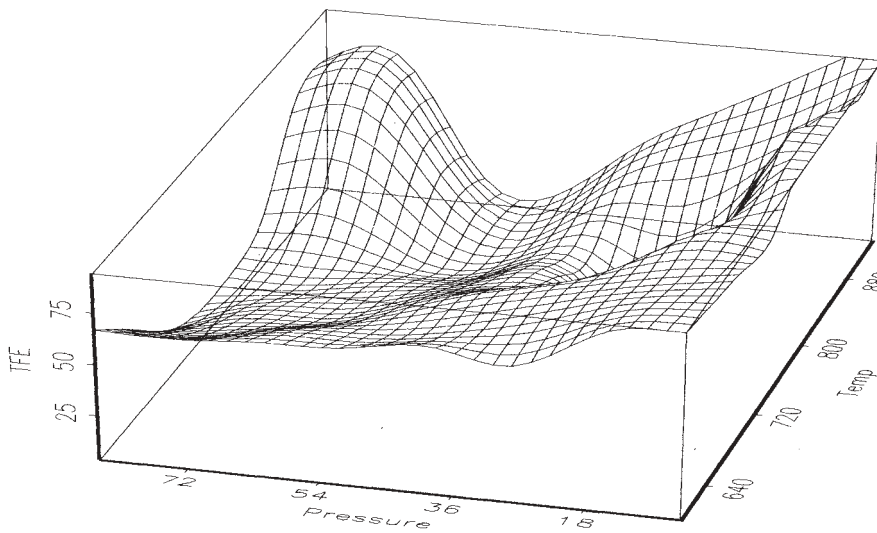
Vaste CF-bevattende afval (PTFE) kan in 'n pirolisereaktor, by 'n spesifieke temperatuur en druk, omgeskakel word na tetrafluoreteileen (TFE), heksafluoropropileen (HFP) en perfluorosiklobutaan (PSB) wat van groot kommersiële waarde is. Voortspruitend uit hierdie studie is 'n internasionale patent

op hierdie proses deur Necsa uitgeneem.

Die fokus van hierdie studie is die bepaling en optimalisering van die parameters om die konsentrasie van die bruikbare produkte TFE, HFP en PSB te optimaliseer. Dit is ook noodsaaklik om 'n kontinuë werkende reaktor daar te stel wat PTFE kan depolimeriseer. Die volgende faktore is belangrik ten opsigte van die prosesparameters:

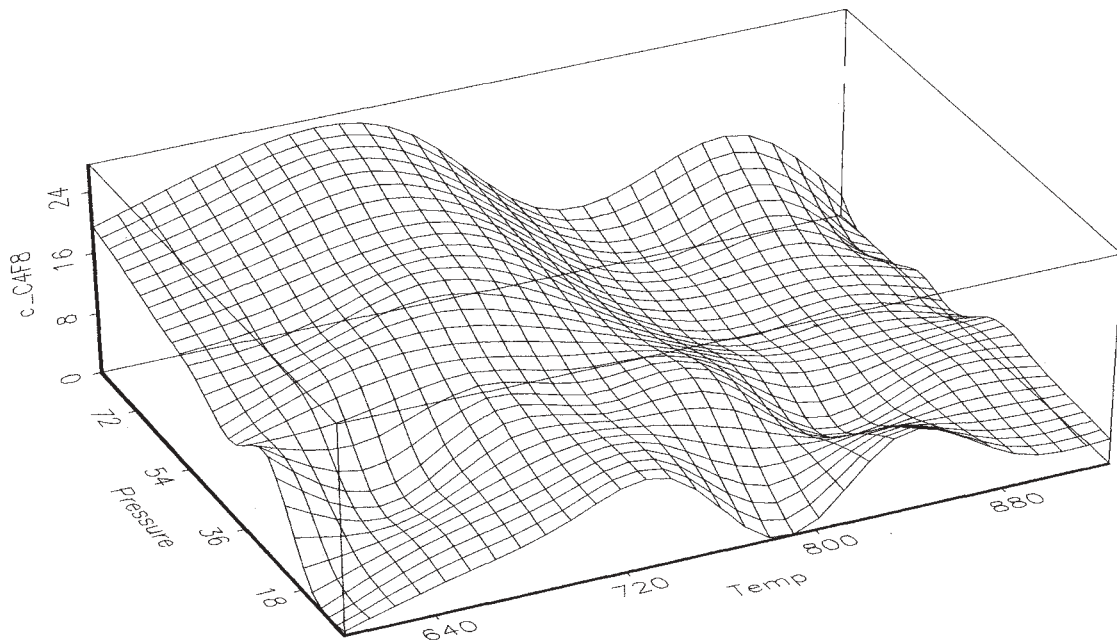
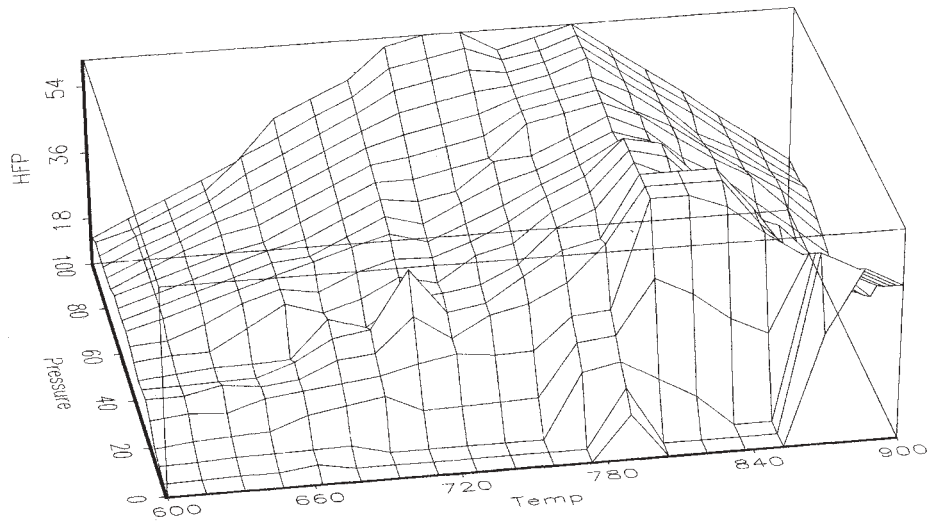
- verkoelingstempo
- reaktordruk
- reaktortemperatuur
- vastestof- en gasresidensietyd in die reaktor
- voertempo en samestelling van die voermateriaal en produkte.

Die resultate wat verkry is deur die temperatuur en druk te varieer terwyl PTFE gedepolimeriseer word, word grafies soos volg voorgestel:



Figuur 1: TFE-konsentrasie as 'n funksie van temperatuur en druk

Figuur 2: HFP-konsentrasie as 'n funksie van temperatuur en druk



Figuur 3: PCB-konsentrasie as 'n funksie van temperatuur en druk

Figure 1-3 beeld die temperatuur- en drukafhanklikheid van TFE, HFP en PCB uit. Dit is duidelik dat die konsentrasies van depolimeriseringsprodukte dramaties verskil namate die temperatuur verander. In die algemeen neem die TFE- en PCB-konsentrasie af soos die temperatuur toeneem, terwyl HFP 'n maksimum konsentrasie bereik tussen 700-800°C. Die effek wat druk op die onderskeie konsentrasies het, is groter as dié van temperatuur.

Die TFE-konsentrasie neem af wanneer die druk verhoog word, terwyl verhoogde druk weer beide HFP en PCB se konsentrasies laat toeneem. Die optimum prosesparameters waar TFE 'n maksimum opbrengs bereik, is laer as 10 kPa en 850°C respektiewelik. HFP bereik sy maksimum opbrengs by 100 kPa en tussen 700-800°C terwyl PCB ongeveer 25% opbrengs lewer by 80 kPa en 720°C. Die neiging vir beide HFP en PCB is dat hoër opbrengste verwag kan word by nog hoër drukke.

Die analise en assessering van ruimtelike vaardighede

H. Wessels

Laerskool Lynnwood, Pretoria

Sewe ruimtelike vaardighede word onderskei, naamlik hand-oog koördinasie, voorgrond-agtergrond persepsie, perseptuele konstantheid, persepsie van ruimtelike posisie, persepsie van ruimtelike verhoudinge, visuele diskriminasie en visuele geheue (Del Grande 1990; Hoffer 1977). Hierdie vaardighede word verdeel in twee hoofgroepe, naamlik ruimtelike oriëntasie en ruimtelike visualisering. Tans lei gebrekkige ontwikkeling van ruimtelike vaardighede tot latere probleme by die meer formele meetkunde in die hoërskool.

Die ontwikkeling van ruimtelike vaardighede van 101 Graad 4- tot 6-leerders is geassesseer in 'n staatskool as deel van 'n groter studie om die invloed van ruimtelike ontwikkeling op leerders se voorstelling van statistiese data te ondersoek. 'n Assesseringsinstrument met 23 take is ontwikkel uit die navorsing van verskeie outeurs. Die moeilikheidsgraad van take is bepaal deur gebruik van die Wattanawaha klassifikasiesstelsel

(Clements 1983) vir ruimtelike probleme waarin vier onafhanklike eienskappe gebruik word om ruimtelike probleme te klassifiseer. Die antwoorde en verduidelikings van antwoorde is gekodeer op 'n nominale skaal van 0, 1 of 2 na aanleiding van die vereistes van die taak.

Die sterk onderlinge verwantskap tussen die ruimtelike vaardighede het die analise en verklaring van resultate gekompliseer. Swak response in byvoorbeeld persepsie van ruimtelike verhoudinge (die skatting van korter en langer afstande) en posisie in die ruimte (siglyne), toon dat meer aandag aan die ontwikkeling van hierdie vaardighede gegee sal moet word.

Die bevindinge het belangrike implikasies vir die onderrig, leer en assessering van meetkunde in die primêre skool en aspekte hiervan behoort in ag geneem te word by die ontwikkeling van leerprogramme en leer materiaal.

'n Afrikaanse komposita-analiseerder: langstringpassing vs. masjienleertegniese

Suléne Pilon en Martin Puttkammer

Sentrum vir Tekstegnologie, Noordwes-Universiteit, Potchefstroomkampus

Rekenaarlinguistiek is een van die jongste studierterreine in Suid-Afrika. Binne hierdie terrein word rekenaarwetenskap met linguistiek versoen om sodoende Mensetaal tegnologiese hulpbronne (MTT-hulpbronne) te ontwikkel wat op natuurlike taal gemodelleer is. Sulke MTT-hulpbronne sluit spel- en grammatikatoetsers, masjienvertalingsisteme, spraak- en sprekerherkenningsisteme, ensovoorts in.

Die Afrikaanse Speltoets 2.0 en Woordafbreker is oor 'n tydperk van 3 jaar aan die Noordwes-Universiteit (Potchefstroomkampus) ontwikkel. Die feit dat hierdie 'n tweede-generasiespeltoets is, noodsaak een of ander vorm van outomatiese morfologiese analise. Dus moes 'n outomatiese morfologiese analiseerder vir Afrikaans ontwikkel word. Die analiseerder wat ontwikkel is, bestaan uit 'n stamidentifiseerder ("stemmer") en 'n komposita-analiseerder. Die reëlgebaseerde stamidentifiseerder verwyder affikse soos ge-, be-, -heid, -agtig, en sodoende kan net die woord se stam in die speltoetsleksikon opgesoek word om seker te maak dat die woord korrek gespél is.

Omdat komposita 'n baie produktiewe morfologiese produksieproses is, is dit nodig om ook 'n komposita-analiseerder

in die morfologiese analiseerder te hê. Die komposita-analiseerder breek komplekse woorde (boekrakverf, verstopperioolingenieur) in konstituente op en sodoende kan elke konstituent (boek, rak, verstoppe, riool, ingenieur) in die leksikon opgesoek word. Sodoende sal kreatiewe, nuwe samestellings nie onnodig deur die speltoets as foute gemerk word nie.

Aangesien rekenaarlinguistiek nog nie 'n gevestigde terrein in Suid-Afrika is nie, skiet die beskikbare MTT-hulpbronne vir Suid-Afrikaanse tale ver tekort. Daar bestaan nog geen komposita-analiseerder vir Afrikaans nie en daarom is dit ook nie bekend watter tegniek die mees geskikte is vir die ontwikkeling van so 'n hulpbron nie. Daar is dus binne die speltoetsprojek twee komposita-analiseerders met twee verskillende tegnieke (langstringpassing en besluitnemingsbome) ontwikkel.

In hierdie referaat word kortliks uiteengesit hoe hierdie twee komposita-analiseerders ontwikkel is. Die akkuraatheid van die twee analiseerders word vervolgens met mekaar vergelyk en daar word aangetoon watter tegniek die mees geskikte is. Vervolgens word aanbevelings gemaak oor hoe om die akkuraatheid van die gekose analiseerder verder te verbeter.

Neurale netwerke as moontlike woordafkappingstegniek vir Afrikaans

M. Fick

Departement Kwantitatiewe Bestuur, UNISA

In Afrikaans word saamgestelde woorde aanmekaar geskryf en nuwe woorde word voortdurend gevorm. Aangesien daar dus nie 'n statiese verwysingsbron bestaan nie, is die proses van woordafkapping tydens teksprosessering 'n probleem – veral by smal kolomme soos in tydskrifte en koerante. 'n Neurale netwerk (vorentoevoer-terugverspreiding) is vir die afkappingsprobleem ontwikkel en met sowat 5 000 Afrikaanse woorde met korrekte lettergreepverdeling afgerig. Die neurale netwerk

het gemiddeld 97,56% van moontlike posisies in 5 000 willekeurig-gekose woorde korrek as óf geldige óf ongeldige afkappingspunte geklassifiseer. Tydens 'n toets met woorde uit 'n Afrikaanse tydskrif het die neurale netwerk 98,75% van woordposisies korrek geklassifiseer. Hieruit is die gevolgtrekking gemaak dat neurale netwerke wel suksesvol as afkappingstegniek vir Afrikaans gebruik kan word.

'n Rekenaarspel om programmeringsbeginsels aan te leer

R. Olivier

Departement Rekenaarwetenskap, Universiteit van Stellenbosch

Hierdie projek behels 'n rekenaarspel om programmeringsbeginsels vir kinders tussen tien en elf aan te leer. Die projek bestaan uit drie fases, naamlik:

- Die identifikasie van die elemente van programmering wat in die spel geïnkorporeer moet word.
- Die ontwikkeling van 'n storielyn vir 'n geskikte spel.
- Die grafiese implementering van die spel.

Die elemente van programmering wat in die spel geïnkorporeer word, kan almal saamgevat word in een konsep, naamlik algoritmes. Algoritmes is die basis van enige program en om 'n kind programmeringsbeginsels aan te leer, word dan dus reduseer om die kind te leer om algoritmes te dink.

Dit is dan wat die rekenaarspel beoog om te doen, gevolg

deur 'n gepaste storielyn wat hierdie beginsel ondersteun. Die spel se naam is CarGOrithm, 'n karspel, en dit werk soos volg:

- Die skerm bestaan uit twee renbane (een vir rekenaar, en een vir speler) en 'n aantal knoppies waarmee die speler sy kar kan beheer.
- Die rekenaar laat sy kar 'n sekere trajek volg op die renbaan, en die speler se doel is om sy kar presies dieselfde trajek te laat volg, deur 'n algoritme te skep met behulp van die knoppies tot sy beskikking.

Die storielyn word geprogrammeer in die Java programmeringstaal. Die spel is in 2D grafika, waarvoor Java volledige gereedskap het. Java Swing word gebruik vir die gebruikerskoppelvlak.

Persoonlike identifikasie en magtiging deur middel van die menslike hart

J. du Preez

Universiteit van Johannesburg

Die gebruik van huidige geheime kodes en kentekens, wat die gewildste en mees gebruikte meganisme van elektroniese identifikasie insluit, kan slegs die kentekens identifiseer en nie die fisiese verbruiker self nie. Biometriese kentekens adresseer juis hierdie leemte deur uit die aard van die saak direk deel van die verbruiker te vorm. Een van die grootste probleemareas rondom biometriese kentekens is die feit dat die meeste huidige biometriese kentekens (vingerafdrukke, handgeometrika, gesigsherkenning en selfs die menslike oog) gebruik kan word om in sekere gevalle 'n persoon, nadoods, te identifiseer as lewendig. Die problematiek kom te vore in die geval van 'n oorledene wie se biometriese eienskappe steeds gebruik kan word om toegang tot byvoorbeeld die persoon se bank te verkry.

In 'n "C*'*s Magazine" artikel, "Body Check: Biometrics Defeated" word verskeie maniere en metodes gedemonstreer om van die nuutste kommersiële biometriese stelsels te flous (Woodward, Orlans, & Higgens, 2003). Hierdie artikel lig maar net een probleem met huidige biometriese meganismes uit,

naamlik lewendigheidstoetsing.

As 'n lewendigheidsmeganisme soos "die manier waarop die menslike hart klop" as 'n biometriese kentekens gebruik kan word om persone te identifiseer, kan hierdie probleem van lewendigheidstoetsing opgelos word, aangesien "die manier waarop die menslike hart klop" 'n natuurlike biometriese kentekens is wat slegs geldig is vir lewende mense.

Die res van die projek handel oor die versameling van gedetailleerde inligting in verband met bogenoemde probleem met verwysing na die sensors wat waarskynlik sal nodig wees vir die korrekte meting van "die manier waarop die menslike hart klop", die meting van die elektriese vloei deur die hart (EKG), hartklanke, impedansie en beweging van die hart.

Die gebruik van "die manier waarop die menslike hart klop" as 'n inherente lewendige biometriek¹ word uitgelig, onder andere die kombinasie van identifikasie en toetsing van stresvlakke tydens 'n ATM-transaksie.

¹ 'n Biometriese kentekens wat nie bestaan as die eienaar nie lewe nie, bv. "die manier waarop die menslike hart klop" as biometriese kentekens.

Biodiversiteitsrisiko-assessering van Suid-Afrika

L. Gerber

Universiteit van Stellenbosch

Die druk op biodiversiteit in Suid-Afrika neem al hoe meer toe en tans word daar nog te min gedoen op staatsvlak aan hierdie kwellende saak. Een van die groot probleme in Suid-Afrika is dat die beperkte hoeveelheid hulpbronne soos geld en personeel, wat wel beskikbaar is vir biodiversiteit, swak versprei en bestuur word. Voordat hulpbronverspreiding verbeter kan word, moet die huidige stand en waarde van biodiversiteit in Suid-Afrika eers bepaal word.

Verskeie datastelle wat die sosiale, ekonomiese en biofisiese aspekte van Suid-Afrika verteenwoordig, is beskikbaar om belangrike verwantskappe te ondersoek wat biodiversiteit kan beïnvloed. Daar is besluit om verwantskappe op die munisipale vlak te ondersoek om besluitneming omtrent hulpbronverspreiding te vergemaklik. Die stand en waarde van biodiversiteit

en die druk op biodiversiteit word dus per munisipaliteit uitgedruk. 'n Indeks is ook ontwerp wat die plaaslike munisipaliteite in orde van hoogste tot laagste biodiversiteitsrisiko rangskik volgens die beginsels van die bestaande *National Biodiversity Risk Assessment Index* (NABRAI).

Munisipaliteite wat geïdentifiseer word met 'n hoë biodiversiteitsrisiko, besit dus waardevolle biodiversiteit maar het ook baie faktore wat druk op biodiversiteit uitoefen en min hulpbronne wat die druk kan verlig. Daar moet dus meer van Suid-Afrika se beperkte hulpbronne aan hierdie tipe munisipaliteite toegeken word as aan ander munisipaliteite wat onder minder druk verkeer of dalk meer hulpbronne beskikbaar het. Hulpbronne kan dus met die hulp van hierdie indeks beter toegeken word.

Sintese en modellering van alisikliese dendrimere

A.E. Boshoff, A.M. Viljoen en H.C.M. Vosloo

Skool vir Chemie en Biochemie, Noordwes-Universiteit, Potchefstroomkampus

Dendrimere is 'n klas van makromolekule nabyverwant aan polimere. In plaas daarvan dat monomeereenhede in een lang ketting aanmekaar geheg word, word monomere laag vir laag aan 'n kern gebind. Elke generasie ("laag") kan dus ongeveer dubbel die aantal molekules as die vorige generasie hanteer, afhangende van die tipe funksionaliteit. Die aantal molekules in die dendriemere groei dus eksponensieel met elke generasie. Hierdie molekules verskil dus van hipervertakte polimere (figuur 1):¹

Dendritiese katalise is 'n veld wat toenemend aandag geniet. Die katalisator kan óf op die periferie van die dendriemere óf in die kern geïnkorporeer word. Dendritiese katalisatore van laasgenoemde aard toon ook dan besondere selektiwiteit ten opsigte van die substraat deurdat net sekere molekules deur die lae van die dendriemere gelaat word.

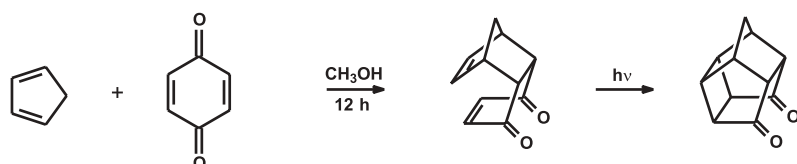
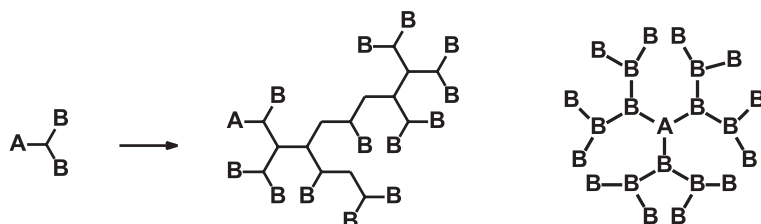
Dendritiese katalisatore kombineer die voordele van homogene en heterogene katalise. Dit toon homogene aktiwiteit as gevolg van die struktuur, maar kan terselfdertyd weens die molekulêre

massa uit die produkmengsel herwin word deur nanofiltrasie. Eerstegenerasie en die meerderheid tweedegenerasie dendritiese katalisatore toon verhoogde aktiwiteit teenoor gewone monofunksionele katalisatore. Hoër generasie dendritiese katalisatore se aktiwiteit val egter drasties vanweë steriese hindernis op die oppervlak van die molekule.

Die nadeel is egter dat eerste- en tweedegenerasie-dendrimere nie sterk driedimensionele karakter toon nie en dus maklik kan plat vou en deur die membraan beweeg tydens die skeidingsfase. Deur dus verbindings met intrinsieke, driedimensionele karakter in 'n dendriemere in te bou, kan die rigiditeit van die dendriemere verhoog word en skeiding dus meer effektief gemaak word.

Alisikliese verbindings, soos verkry word uit die Diels-Alder reaksie tussen siklopentadien en *p*-bensokinoon (figuur 2), behoort aan 'n klas driedimensionele molekules met sterk karakteristieke stabiele, rigiede en dus baie bruikbare eienskappe. Verder beskik die verbindings oor geïsoleerde aktiewe

Figuur 1: Skematiese voorstelling van 'n hipervertakte polimeer (links) en 'n dendriemere (regs)



Figuur 2: Sintese van tetrasiklo-undekaandioon

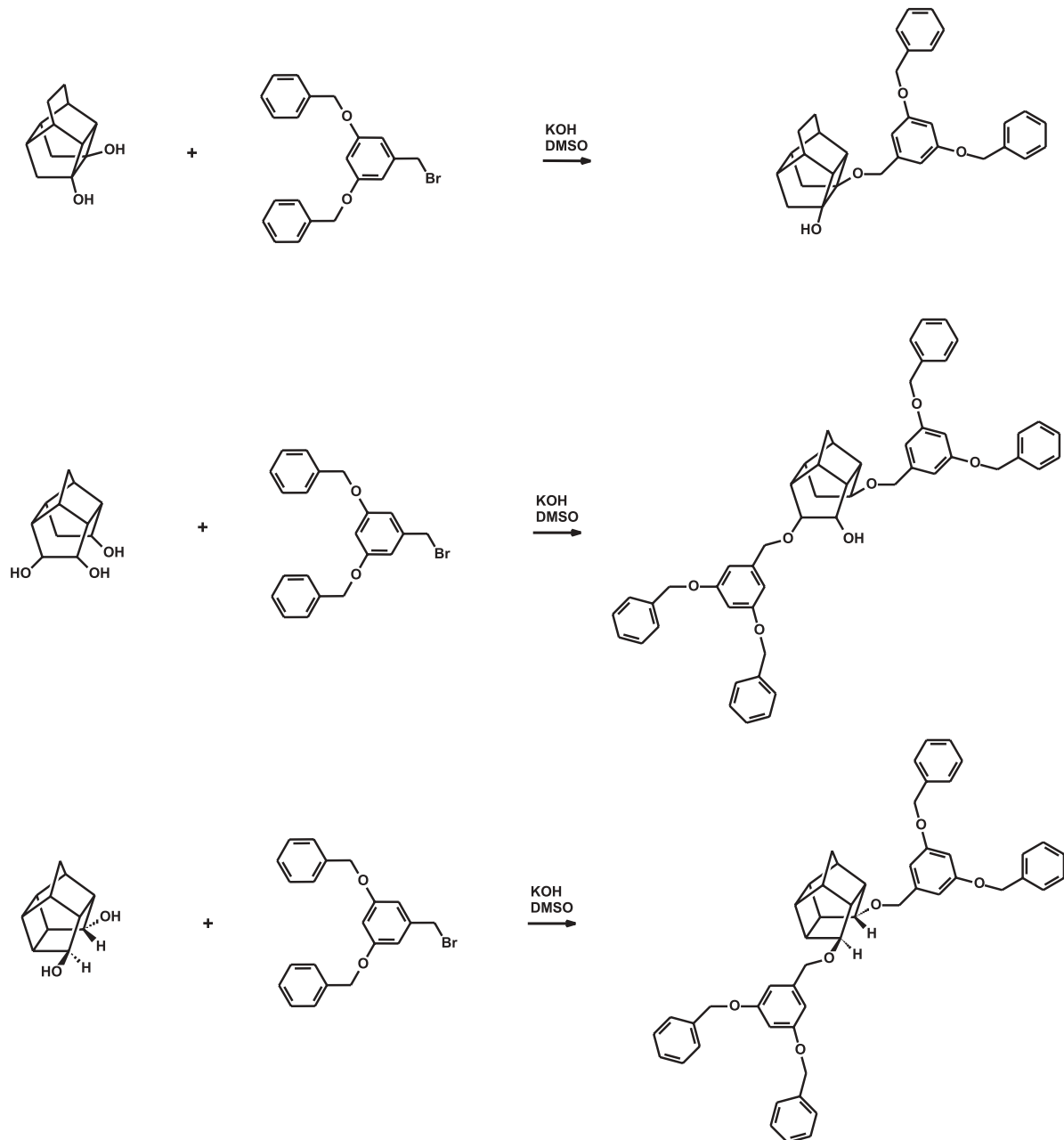
karbonielgroepe wat maklik deur verskeie reagense gemodifiseer kan word.^{2,3} Hierdie alisikliese strukture kan dus in dendrimere geïnkorporeer word om die verlangde driedimensionele karakter in die dendrimere in te bou.

In hierdie studie is die inkorporering van alisikliese strukture in laegenerasie dendrimere ondersoek. Verskeie alisikliese strukture is gesintetiseer wat geskikte hidroksigroepe bevat. Die alisikliese strukture is met eerste generasie poli-eter-dendrimere in die teenwoordigheid van KOH en DMSO gereageer, sodat 'n nukleofiliese substitusiereaksie plaasgevind het. Die alisikliese

struktuur dien dus as driedimensionele kern.

Die reaksies soos aangetoon in figuur 3 is uitgevoer, maar strukture moet nog geverifieer word met ^1H , ^{13}C KMR en MS. Verder sal die betrokke strukture gemodelleer word om meer inligting te bekom oor die betrokke reaksies, energieë en steriese effekte.

Alisikliese dendrimere kan dalk as moontlike oplossing dien vir die probleme wat tans tydens nanofiltrasie in dendritiese katalise ondervind word en is 'n belowende veld wat verdere aandag verlang.



Figuur 3: Sintese van alisikliese dendrimere

LITERATUURVERWYSINGS

1. Hawker, C.J., Fréchet, J.M.J. (1990). *J. Am. Chem.Soc.*, 112, 7638.
2. Marchand, A.P., Annapurna, P., Pulla Reddy, S. (1989). *J. Org. Chem.*, 54, 187.
3. Cookson, R.C., Hill, R.R., Hudec, J. (1964). *J. Chem. Soc.* 1681.

'n Onderzoek na die metatese van alkyne met $\text{Mo}(\text{CO})_6/\text{PhOH}$

Carin van der Merwe, Manie Vosloo en Gerhard Lachmann

Skool vir Chemie en Biochemie, Noordwes-Universiteit, Potchefstroomkampus

Die gekataliseerde metatesereaksie van alkene is in 1964 deur Banks en Bailey¹ ontdek. In 1967 is die homogene sisteem deur Calderon et al.² beskryf. Hierdie ontdekkings het tot 'n algemene aanname gelei dat dieselfde reaksie ook met alkyne moontlik sou wees. Die bewys hiervoor is deur Pennella et al.³ gevind met 'n heterogene sisteem wat uit $\text{WO}_3 \cdot \text{SiO}_2$ bestaan het. In 1972 het Mortreux⁴ die eerste homogene sisteem ontwikkel wat interne alkyne gemetateseër het.

In hierdie studie is die metatesereaksie van alkyne met hierdie klassieke $\text{Mo}(\text{CO})_6/\text{PhOH}$ -katalisatorsisteem deur middel van laboratoriumeksperimentering en molekulemodellering ondersoek. Die sisteem is geoptimeer en gebruik om 'n aantal aannames te ondersoek, naamlik dat metatese slegs met interne of digesubstitueerde alkyne plaasvind en dat monogesubstitueerde of terminale alkyne polimeriseer of siklotrimeriseer.⁵ Die reaksies is met die alkyne wat in die oorspronklike studie gebruik is, naamlik *p*-toliefenielasetileen, geoptimeer (figuur 1). *p*-Toliefenielasetileen is volgens beide organiese en gekataliseerde metodes gesintetiseer.⁶

Tydens die optimisering van die metatesereaksie is verskeie faktore, wat moontlik 'n invloed op die aktiwiteit van die sisteem kan hê, ondersoek, naamlik reaksietemperatuur, kokatalisator, oplosmiddel, aktiveringstydperk, $\text{Mo}(\text{CO})_6$ -inhoud, PhOH-inhoud asook verskillende alkynsubstrate.

Die optimum reaksieaktiwiteit is bereik by 160°C. Geen aktiwiteit is onder 100°C waargeneem nie en bokant 160°C was daar 'n duidelike afname in aktiwiteit. Drie fenoliese kokatalisatore, naamlik fenol, resorsinol en α -naftol, se invloed op die reaksieaktiwiteit is getoets. Hulle eienskappe is vergelyk met dié wat vir metatesepolimerisasie-kokatalisatore met dieselfde katalisatorsisteem bepaal is. Die verskil in reaktiwiteit tussen die getoetsde kokatalisatore was egter so gering dat PhOH vir die oorblywende optimiseringsreaksies gebruik is. Die optimum PhOH-inhoud is vasgestel as 25:1 (molverhouding) ten opsigte van $\text{Mo}(\text{CO})_6$.

Niepolêre oplosmiddels het die beste resultate gelever. Die oplosmiddel moes egter steeds die vermoë besit om 'n polêre spesie in oplossing te kan stabiliseer. Oplosmiddels wat tot metatese aanleiding gegee het, was tetralien, dekalien, indaan en chloorbenseen.

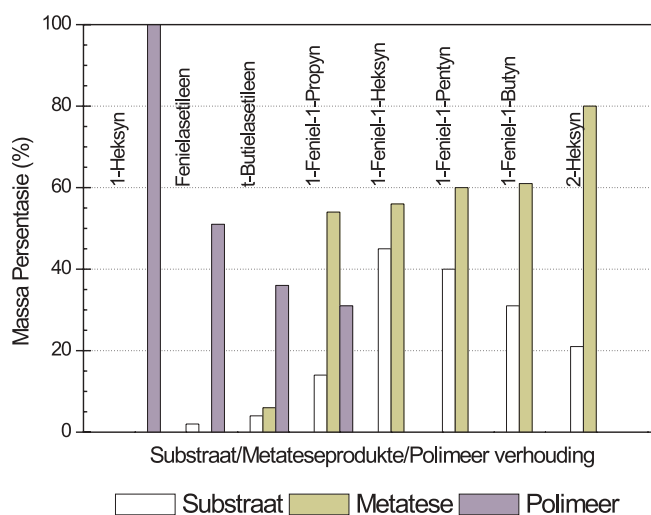
'n Meganistiese voorstel, waartydens die hidroksielwaterstof van die fenol aan die trippelbinding van die alkyne koördineer, is getoets deur die moontlikheid van 'n aktiveringstydperk te ondersoek. Die reaksiemengsel, sonder die katalisator, is vir 'n vasgestelde tydperk verhit teen 70°C waarna die katalisator bygevoeg, die reaksie tot 160°C verhit en met behulp van GC

teen tyd gemonitor is. Geringe verskille in omskakeling tussen die geaktiveerde monsters en die standaard, 'n ongeaktiveerde reaksiemengsel, is waargeneem.

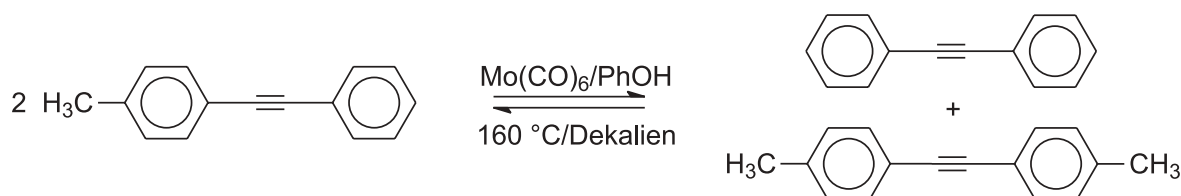
Die optimum $\text{Mo}(\text{CO})_6$ -inhoud is met behulp van verstellers aan die alkyninhoud bepaal. Daar is gevind dat 'n verhouding van 25:1 alkynsubstraat: $\text{Mo}(\text{CO})_6$ -molverhouding die optimum konsentrasie is en dat hoër konsentrasies alkyne tot deaktivering van die sisteem lei. Die alkynsubstraat is ook gevarieer deur van alkyne met verskillende substituentte gebruik te maak (figuur 2). Daar is gevind dat veral interne alkyne vir metatese geskik is, maar dat terminale alkyne (wat hoofsaaklik polimeriseer) metatese kan ondergaan indien 'n geskikte steriese substituent teenwoordig is. Daar is ook gevind dat 1-fenielgesubstitueerde alkyne met 'n hoofkettinglengte van vier koolstowwe (binne die alkyne) die optimum omskakelingsverhouding ten opsigte van die ondersoekte alkyne tot gevolg het.

Molekulemodelleringstudies, waartydens die vorming van die voorgestelde metalla-siklo-butadiene ondersoek is, is met bestaande studies⁷ uit die literatuur vergelyk en daar is gevind dat DMol³ (DFT-kode) van Accelrys Materials Studio (2002) 'n baie goeie korrelasie gee.

Molekulemodellering is verder gebruik om die invloed van elektron-onttrekkende ligande op die metaalkern en ook die dissosiasie van die metallasiklobutadiene-kompleks, om metateseprodukte te vorm, as die snelheidsbepalende stap te ondersoek.



Figuur 2: Invloed van die alkynsubstraat op die metatesereaksie



Figuur 1: Metatese van *p*-toliefenielasetileen

Ten slotte is 'n postulaat vir die metatesereaksie van 1-feniel-1-propyn in die teenwoordigheid van die $\text{Mo(CO)}_6/\text{PhOH}$ -katalisatorsisteem voorgestel. 'n Gebuigde ring is as die mees stabiele konformasie vir die metallasiklobutadieentussenverbinding aangewys en alternatiewe tussenverbinding-komplekse, waaronder metallatetrahedraan- en siklopropeniel-komplekse, is ook geïdentifiseer.

LITERATUURVERWYSINGS

1. Banks, R.L., Bailey, G.C. (1964). *Ind. Eng. Chem., Prod. Res. Develop.*, 3, 170.
2. Calderon, N., Chen, H.Y., Scott K.W. (1967). *Tetrahedron Lett.*, 3327.
3. Pennella, F., Banks, R.L., Bailey, G.C. (1968). *Chem. Commun.*, 1548.
4. Mortreux, A., Blanchard, M. (1974). *J.Chem. Soc., Chem. Commun.*, 786.
5. Ivin, K.J., Mol, J.C. (1997). *Olefin Metathesis and Metathesis Polymerization* (Academic Press, London).
6. Van der Merwe, A.C., Vosloo, H.C.M., Lachmann, G., Publikasie in voorbereiding.
7. Folga, E., Ziegler, T. (1993). *Organometallics*, 12, 325; Woo, T.K., Folga, E., Ziegler, T. (1993). *Organometallics*, 12, 1289.