



Suid-Afrikaanse Tydskrif vir **Natuurwetenskap en Tegnologie**

Vol. 42 No. 1 2023

ISSN: 0254-3486



Gesondheidsevaluasie van stedelike eike (*Quercus robur* L.) met behulp van fisiologiese parameters: 'n Suid-Afrikaanse gevallestudie
Soané Ludick, Jacques M Berner, Roelof D Coertze,
Sarel S Cilliers

Sirkoon as voerstof vir sirkoniumgebaseerde chemikalieë, keramieke, die metaal en sy legerings: 'n Oorsigartikel
SJ Lubbe, PL Crouse

Telepraktyk en die behandeling van volwasse nes met primere en sekondere spierspanningsdisfonie: 'n Omvangsbepaling
M Theron, D Klop, H Theron

Suid-Afrikaanse Tydskrif vir
Natuurwetenskap en Tegnologie

Medpharm Publikasies

Grondvloer, Centurion Wyn en Kuns Sentrum, Lyttelton, Amkorweg 123, Centurion
0157, Suid-Afrika
Tel: +27 12 664 7460
Epos: info@medpharm.co.za
Webtuiste: <https://www.medpharm.co.za>

Joernaaltitel: Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie
Webtuiste: <http://www.satnt.ac.za>
Algemeen navrae: info@medpharm.co.za

ISSN: 0254-3486 (print)
ISSN: 2222-4173 (online)

Produksiespan

Ina du Toit
Robyn Marais

Drukkers

Uitleg, druk- en bindwerk deur V&R Drukkery (Edms) Bpk
Tel: +27 12 333 2462
Faks: +27 12 333 1624
Navrae: elzabe@vrprinting.co.za

Disclaimer

The title owner and publisher accepts no responsibility for any statement made or opinion expressed in this publication. Consequently, the publishers and copyright holder will not be liable for any loss or damage sustained by any reader as a result of his or her action upon any statement or opinion in this work. Links by third party websites are provided by Medpharm Publications in good faith and for information only. Medpharm Publications disclaims any responsibility for the materials contained in any third party website referenced in this work.

Copyright

Copyright on published articles is retained by the author(s). Licensee: Medpharm Publications (Pty) Ltd. This work is licensed under the Creative Commons Attribution License. Every effort has been made to protect the interest of copyright holders. Should any infringement have occurred inadvertently, the publisher apologises and undertakes to amend the omission in the event of a reprint.

Hoofredakteur

Hannes Rautenbach
Academia, Suid-Afrika

Nasionale Redaksie Raad

Nic Beukes
Universiteit van Johannesburg
Suid-Afrika

Paul Brink
Stellenbosch Universiteit
Suid-Afrika

Leslie Brown
Universiteit van Suid-Afrika
Suid-Afrika

Cassie Carstens
NECSA
Suid-Afrika

Eugene Cloete
Stellenbosch Universiteit
Suid-Afrika

Francois du Randt
Universiteit van Johannesburg
Suid-Afrika

Ian Dubery
Universiteit van Johannesburg
Suid-Afrika

Japie Engelbrecht
Nelson Mandela Universiteit
Suid-Afrika

Stephan Heyns
Universiteit van Pretoria
Suid-Afrika

Ewert Kleynhans
Noordwes-Universiteit
Suid-Afrika

Lise Korsten
Universiteit van Pretoria
Suid-Afrika

Annemarie Oldewage
Universiteit van Johannesburg
Suid-Afrika

Rudi Pretorius
Universiteit van Suid-Afrika
Suid-Afrika

Caroels Reinecke
Noordwes-Universiteit
Suid-Afrika

Frederick Roelofse
Universiteit van die Vrystaat
Suid-Afrika

Reinette Snyman
Cape Peninsula University of
Technology
Suid-Afrika

Antoinette Swart
Agricultural Research Council
Suid-Afrika

Kobus van der Walt
Noordwes-Universiteit
Suid-Afrika

Wouter van Hoven
Universiteit van Pretoria
Suid-Afrika

Inhoudsopgawe

Oorspronklike Navorsing

- 1 Ondersoek na energiekoste van die inkorporering van 'n latentehitte-termiese-energieopbergstelsel in 'n Suid-Afrikaanse koelkamer
BT Radebe, Z Huan
- 16 Struktureleveralgelyking-model om die kritieke veranderlikes wat verband hou met die aanvaarding van slimkaarttegnologie in Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg te ontleed
L Malungana, L Motsi
- 24 Gesondheidsevaluasie van stedelike eike (*Quercus robur* L.) met behulp van fisiologiese parameters: 'n Suid-Afrikaanse gevallestudie
Soané Ludick, Jacques M Berner, Roelof D Coertze, Sarel S Cilliers
- 43 Sirkoon as voerstof vir sirkoniumgebaseerde chemikalieë, keramieke, die metaal en sy legerings: 'n Oorsigartikel
SJ Lubbe, PL Crouse
- 64 Telepraktik en die behandeling van volwassenes met primêre en sekondêre spierspanningsdisfonie: 'n Omvangsbepaling
M Theron, D Klop, H Theron
- 77 Werking van surfaktante in waterige oplossings en by die lug-water-tussenvlak: 'n Oorsig
EH Wiese, D Venter, DP Otto, FJ Smit, HCM Vosloo
- 88 Waarnemings oor die infrarooi reflektansiespektra van Neutronbestraalde 3C-SiC
JAA Engelbrecht, SG Le Roux, EG Minnaar, WE Goosen

Referaat opsommings

- 94 Groot brande in die Wes-Kaap
D Boshoff, H Chikoore
- 95 Waterstofbindings tussen adenien en timien: Insig vanuit die perspektief van molekulewye en elektron-digtheid-gebaseerde chemiese binding (MOWED-CB)
L Cajada, J de Lange, I Cukrowski
- 97 Die ruimtelike denkvermoë van voorgraadse Geografie-studente by geselekteerde Suid-Afrikaanse universiteite
S Carow, R Pretorius
- 98 Toepassing van vloeïchemie vir die sintese van farmaseutiese boublokke in organiese chemie
BM Currie, NC Neyt, LS Dibokwane, AM Reinhardt, LT van Wyk, DL Riley, J Panayides
- 99 Die paddabloedparasiet-fauna van die Soutpansberge
J du Buisson, LH du Preez, EC Netherlands
- 100 Karakterisering van die effek van salisielsuurtoediening op Sclerotinia-stamvrot in sojabone
A Edwards, WJ Swart, M Nyoni
- 101 Karakterisering van plantgesondheidsbevorderende mikroörganismes (PGBMs) en potensiële biologiese beheermiddels (BBMs) in die sojaboonmikrobiom
A Edwards, LA Rothmann, WJ Swart

Linda van Ryneveld
Universiteit van Pretoria
Suid-Afrika

Alex Visser
Universiteit van Pretoria
Suid-Afrika

Internasionale Redaksie Raad

Herman Potgieter
Manchester Metropolitan
University
United Kingdom

Ronette Gehring
Utrecht Universiteit
Nederland

Ex Officio

Anne-Marie Beukes
SA Akademie van Wetenskap en
Kuns
Suid-Afrika

- 102 Klein organometaalverbindinge na proteïene – die geheime van molekules in fundamentele kristalruimtes
FJF Jacobs, A Brink
- 103 'n Raamwerk om digitale tweeling-funksionaliteite in webtoepassings te implementeer
WJ Kilian, SGJ van Niekerk, JC Vosloo
- 104 Integrasie van trofiese vlak met die nisvariasie-hipotese: 'n Vergelyking van individuele nisvariasie tussen soogdierherbivoor- en soogdierkarnivoorbevolkings
C Lewis, D Codron
- 105 Die sintese en evaluasie van 'n reeks amino-ouroonderivate en hulle renium(I) trikarbonielkomplekse as moontlike antikankermiddels
L Liebenberg, M Schutte-Smith, HG Visser
- 106 Die effek van varroa-mietinfestasies op die spermfunksionaliteit van die Suid-Afrikaanse Kaapse heuningby
JF Murray, G van der Horst, M Allsopp, RCM Kotze
- 107 Spektrale metodes en gebiedontbinding
EA Nel, N Hale
- 108 Insig in die morfologiese ongelykheid in die selde bewaarde sagteeweefselgedeelte van antiark-plakoderm vis, *Bothriolepis africana*
R Nel, RW Gess, K Trinajstić
- 109 Ontwrigtingsdigtheidmeting in AIS1316L vlekvrystaal met elektronkanalisering-kontrasbeelding (EKKB)
LC Pullen, JE Westraadt, D Ramasimong, RD Knutsen
- 110 'n Feromoon-ontdekkingsreis van die wattel-sakwurm
LM Scheepers, B Slippers, ER Rohwer, JD Allison
- 112 Het die ouderdom van beeste 'n invloed op die bosluislading?
E Terblans, EMS van Dalen
- 113 Ni-bevattende bimetaal-nanodeeltjies as katalisators vir elektrochemiese watersplying
M van den Berg, R Malgas-Enus, CGCE van Sittert
- 114 Tande: 'n Geheime argief
R van der Merwe, C Lewis, D Codron
- 115 Perowskiete van alkalimetaalhaliedhibriede: Strukture en eienskappe
HJ van der Poll, M Rademeyer
- 116 Die ontwikkeling van die T-hoek as 'n vastetoestand-parameter vir die meting van die steriese massa van N-substituenten in bis(difenilfosfen)amien digoud(I) komplekse
C van Staden, M Schutte-Smith, L Moskaleva, DV Kama, HG Visser
- 117 Gebruik van die Suid-Afrikaanse medisinale plant, *Gunnera perpensa*, in 'n soeke na potensiële SARS-CoV-2-behandelings
I Wessels, L Invernizzi, VJ Maharaj

118 Inligting vir Outeurs en Lesers

119 Erkenning aan Evalueerders

Onderzoek na energiekoste van die inkorporering van 'n latentehitte-termiese-energieopbergstelsel in 'n Suid-Afrikaanse koelkamer

BT Radebe, Z Huan

Tshwane-Universiteit van Tegnologie, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: BT Radebe **E-pos:** radebetb@tut.ac.za

Doel: Die opberging van energie is voordelig om ons lewens en die omgewing te verbeter. 'n Latentehitte-termiese-energieopbergstelsel (LHTEOS) het groot potensiaal om by te dra tot verbetering van dit wat tussen die vraag en aanbod van energie plaasvind. Dit maak stelsels doeltreffer en omgewingsvriendeliker wat energieverbruik betref.

Metodologie: Hierdie studie het die integrasie van 'n LHTEOS in 'n Suid-Afrikaanse koelkamer wat by -18°C werk, ondersoek om beide energie- en bedryfskoste te bespaar terwyl goedere bewaar word. 'n Hitteladingsanalise is gedoen om die aantal eutektiese plate te bepaal wat nodig is om die verlangde temperatuur te handhaaf, en het ook die aanvanklike koste van die LHTEOS beraam. Eskom se tariefplanne is gebruik om die daaglikse bedryfskoste van 'n koelkamer met en sonder 'n LHTEOS op te teken en te vergelyk. Die tariefplanne is verder gebruik om die energiebesparingskoste van die jare 2021 tot 2022 te raam, en die terugbetalingstydperk vir die nuwe stelsel te projekteer.

Bevindinge: Deur 'n LHTEOS in te sluit wat vir 16 uur werk, sal die elektriese koste R2 260/jaar beloop, en sodoende die bedryfskoste met 50% verminder. Die studie het tot die gevolgtrekking gekom dat dit 'n goeie belegging is om 'n volopberging-LHTEOS te bedryf, aangesien hierdie stelsel R15 000 kos en die terugbetalingstydperk ongeveer 6 jaar sal wees.

Navorsingsimplikasies: Die studie beveel verder aan dat goedkoop eutektiese plate plaaslik ontwerp en vervaardig moet word vir die integrasie om 'n sukses te wees.

Oorspronklikheid: Gebaseer op die huidige ontleding word 'n gedeeltelike opbergstelsel egter aanbeveel om die spitsvraag van 'n koelkamer te verlig en goedere tydens kragonderbrekings binne 'n gespesifiseerde temperatuurbestek te bewaar.

Sleutelwoorde: termiese-energieopberging, faseveranderingsmateriaal, eutektiese plaat

Investigation of energy costs for incorporating a latent heat thermal energy storage system into a South African cold room:

Purpose: Storing energy has been beneficial in improving our life and the environment. A Latent Heat Thermal Energy Storage System (LHTESS) has great potential to contribute to ameliorating what occurs between the supply and demand of energy. It makes systems more efficient and environmentally friendly in terms of energy consumption.

Methodology: This study investigated the integration of an LHTESS into a South African cold room operating at -18°C to save both energy and operational cost while preserving goods. A heat load analysis was done to determine the number of eutectic plates needed to maintain the desired temperature, and also estimated the initial cost of the LHTESS. Eskom's tariff plans were used to capture and compare the daily operational costs of a cold room with and without an LHTESS. The tariff plans were further used to estimate the energy-saving costs from years 2021 to 2022, and project the payback period for the new system.

Findings: By incorporating an LHTESS operating for 16 hours, the electrical costs would amount to R2 260/year, thereby reducing the running costs by 50%. The study concluded that it is a good investment to run a full storage LHTESS as it costs R15 000 for this system and the payback period will be approximately 6 years.

Research implications: The study further recommends that inexpensive eutectic plates should be designed and manufactured locally for the integration to be a success.

Originality: However, based on the current analysis, a partial storage system is recommended to mitigate the peak demand of a cold room and preserve goods in a specified temperature range during power outages.

Keywords: thermal energy storage, phase change material, eutectic plate

Inleiding

Die opberging van energie is voordelig om ons lewens en die omgewing te verbeter. Energieopberging het 'n beduidende rol gespeel in die aanvulling van ongereelde energievoorsiening om suksesvol in die stygende vraag te voorsien. Energieopberging dra aansienlik by tot die gebruik van doeltreffende en omgewingsvriendelike energie in ons samelewings. Twee voordelige faktore ontstaan dikwels wanneer energie gestoor word – 'n vermindering in energieverbruik en verlaagde energiekoste. Hierdie voordele van doeltreffende stelsels verminder verder (a) die aanvanklike en instandhoudingskoste, (b) toerustinggrootte, en (c) besoedelstofvrystellings deur 'n vermindering in die gebruik van fossielbrandstowwe (Dincer & Rosen 2011).

Figuur 1 klassifiseer die verskillende metodes van energieopberging wat beskikbaar is. Lande soos China is van die wêreld se belangrikste landboulande en het 'n groot vraag na verkoelingstoerusting. Groot hoeveelhede elektriese energie word jaarliks deur verkoelde toerusting verbruik. Daar is deur Evans et al. (2015) opgemerk dat 60% tot 70% van elektriese energie in koelbewaringsfasiliteite vir verkoeling gebruik word. Deur latentehitte-koelbewaring by konveksieverkoelingstelsels te voeg, is die land se elektriese koste verminder. Tydens spitslading stel die latentehitte-termiese-energieopbergstelsel (LHTEOS) energie vry en gedurende normale ure word dit gelaai deur 'n verkoelingstelsel wat parallel daaraan gekoppel is (Yang et al. 2017).

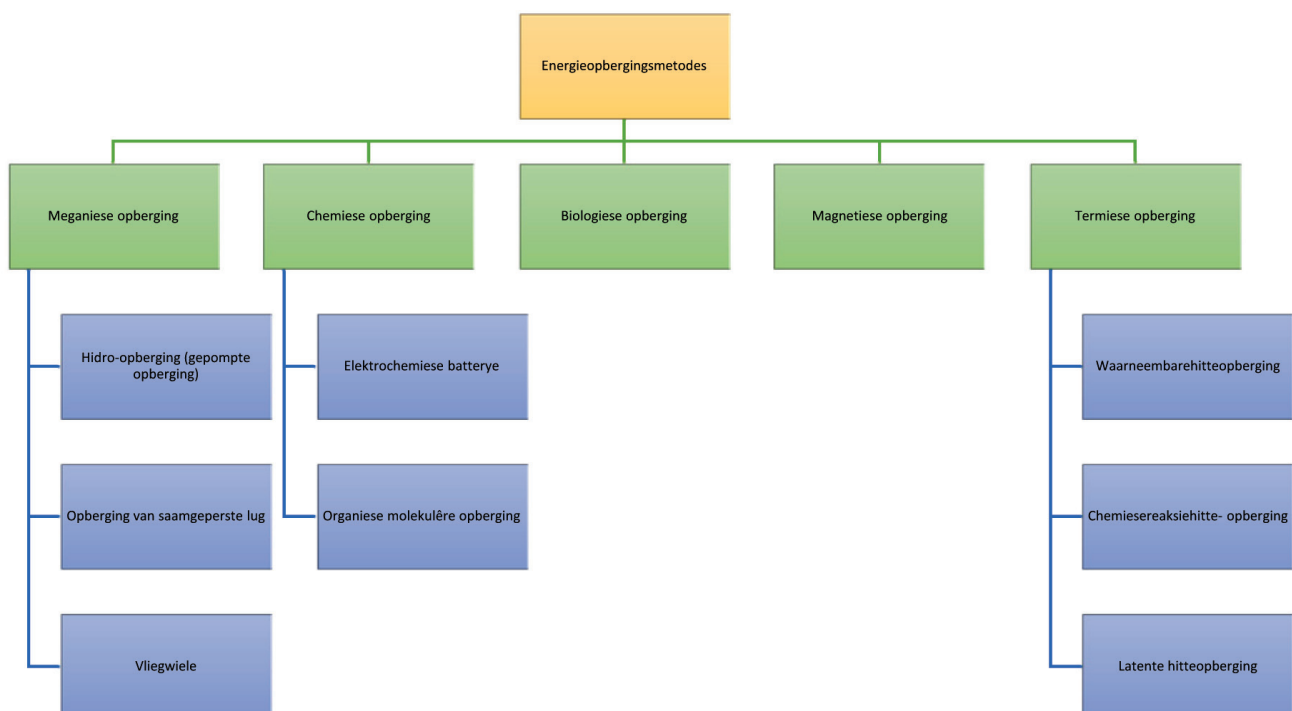
Die LHTEOS benodig gewoonlik 'n koelmiddelstelsel om die eutektiese faseveranderingsmateriaal (FVM) te vries. Ten spyte

van die beperkings daarvan speel hierdie stelsel 'n beduidende rol in die verkoelingsbedryf. Die toepassing daarvan op klein bakkies, toegewyde vrag- en ander toepassings maak dit 'n potensiele oplossing vir die uitfasering van skadelike koelmiddels uit die omgewing. LHTEOS is ook ideaal in ontwikkelende lande, waar die akkuraatheid van temperatuurbeheer minder relevant is vergeleke met die algehele brandstof- en stelselkoste (Lambert & Roberto 2014).

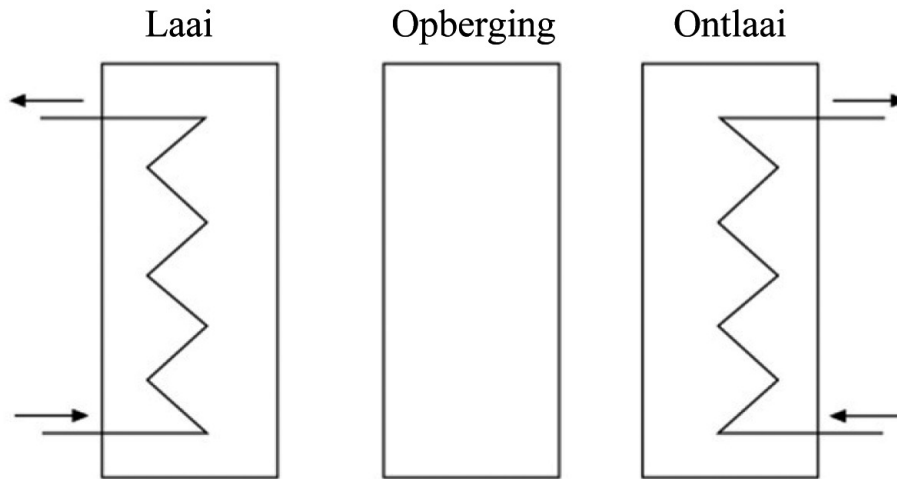
Hierdie artikel bied 'n energiekosteontleding van die integrasie van 'n LHTEOS in 'n Suid-Afrikaanse koelkamer wat by 'n temperatuur van -18°C werk. Eskom se tariefplanne word gebruik om die energiebesparingskoste van 'n koelkamer wat daagliks in bedryf is te raam en die terugbetalingstydperk van die nuwe stelsel te projekteer.

Termiese-energieopberging

Termiese-energieopberging (TEO) is 'n metode wat oor groot potensiaal beskik om die wanverhouding tussen die vraag en aanbod van energie reg te stel, en ook oor groot potensiaal beskik om energiebestuur te verbeter deur as 'n periodieke energiebron op te tree. Veral vloeibare vaste FVM's word as sleutelkomponente vir die integrasie van hernubare energiebronne beskou. Hierdie FVM's is nie net tot verkoelingstelsels beperk nie, aangesien dit in hoëtemperatuurtoepassings soos kernkragsentrales gebruik kan word. Hierdie veld alleen het baie navorsing gelok, aangesien dit wil voorkom of FVM's oor die vermoë beskik om stelsels wat betref energieverbruik doeltreffender en omgewingsvriendeliker te maak (Dincer & Rosen 2011; Gibb et al. 2018; Lazaro et al. 2020).



Figuur 1: Klassifikasie van energieopbergingsmetodes (Dincer & Rosen 2011; Raam Dheep en Sreekumar 2014)



Figuur 2: TEO volledige opbergingsiklus (Cabeza et al. 2011)

TEO-stelsels werk op die beginsel van laai en ontlaai. Hierdie opbergingsiklus word duidelik in Figuur 2. Hulle kan energie op verskillende plekke, kragvlakke en temperatuur opberg en vrystel (Cabeza et al. 2021).

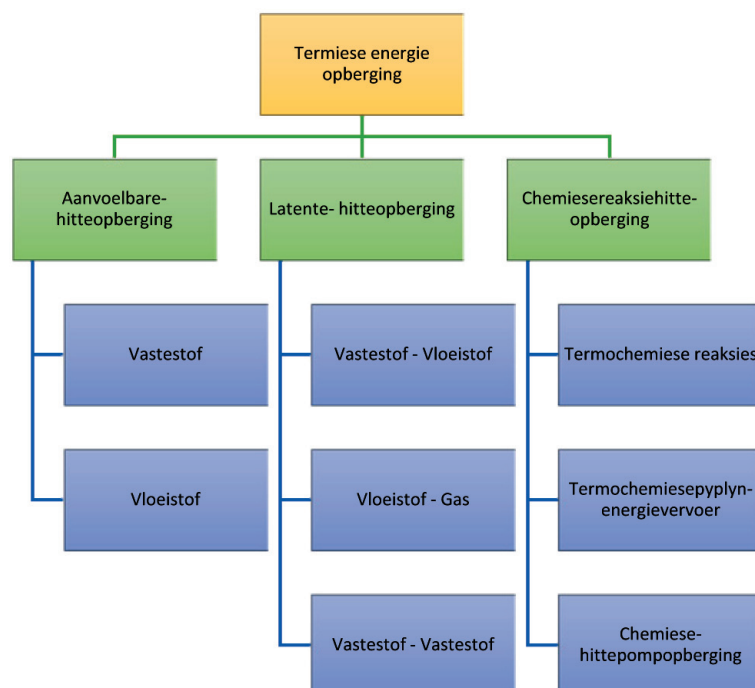
Klassifikasie van termiese-energieopberging

TEO-stelsels bestaan uit drie tipes groepe, naamlik waarneembarehitte-TEO-stelsels, chemiesereaksiehitte-TEO-stelsels en latentehitte-TEO-stelsels, soos in Figuur 3 word. TEO-stelsels behels drie prosesse, naamlik laai, opberging en ontlaai. Prosesse kan in 'n praktiese toepassing gelyktydig plaasvind, waar dit laai, opberg en ontlaai. Elke proses kan meer as een keer in elke opbergingsiklus plaasvind (Vadhera et al. 2018).

a) In waarneembarehitte-TEO-stelsels verander die temperatuur van die opbergingsmedium om energie op te berg,

gebaseer op die hittekapasiteit van die materiaal in die vorm van water, grond, rots, pekelwater of enige ander opbergingsmedium. Die temperatuur van die materiaal verander maar die materiaal ondergaan geen faseformasie tydens die laai- of ontlaaisiklusse nie (Veerakumar & Sreekumar 2016).

b) Chemiesereaksiehitte-TEO-stelsels werk deur molekulêre bindings deur omkeerbare chemiese reaksies te breek en weer te vorm. Omkeerbare reaksies, termochemiesepyplyn-energievervoer en chemiese hittepomp-opberging is die drie maniere van opberging waarop die chemiesereaksiehitte-TEO-stelsel energie opberg. Hierdie metode is voordeliger vergeleke met waarneembarehitte- en latentehittestelsels (Raam Dheep & Sreekumar 2014).



Figuur 3: Klassifikasie van termiese-energieopberging (Raam Dheep & Sreekumar 2014).

c) Latentehitte-TEO-stelsels ondergaan latentehitteversmelting. Wanneer 'n opbergingsmedium 'n fase-transformasie ondergaan, voltooi dit die proses van opberging en herwinning van die termiese energie (d.w.s. latente hitte).

Latentehitte-TEO-stelsels word in drie groepe geklassifiseer, vastestof-vastestof, vastestof-vloeistof en vloeistof-gas, soos in Figuur 3 geïllustreer word. Vastestof-vastestof is 'n fase-transformasie van 'n kristalaard. Vastestof-vloeistof en vloeistof-tot-gas maak gebruik van FVM soos koue stoorwater of ys, paraffienwasse of ander FVM wat van vastestof na vloeistof of van vloeistof na gas kan verander, en omgekeerd. Terwyl die materiaal 'n faseverandering ondergaan, breek die chemiese bindings in die materiaal op en lei tot transformasie van een fase na 'n ander met min temperatuurswaai en bly dit op 'n byna konstante temperatuur (Raam Dheep & Sreekumar 2014; Vadhera et al. 2018).

Latentehitte-TEO

Latentehitte-TEO-stelsels word verder in drie groepe verdeel, naamlik anorganies, organies en eutekties. Dit word in Figuur 4.

a) Anorganiese FVM's

Anorganiese FVM's is hoogs korroderende materiale en reageer dikwels met die konstruksiemateriaal van die omhulsel. Dit is laekostemateriale wat dit geredelik beskikbaar maak; hulle ondergaan egter superverkoeling en segregasie. Hulle het goeie termiese geleidingsvermoë, 'n skerp smeltingspunt, 'n lae volumeverandering, 'n lae spesifieke warmte en 'n hoë versmeltingshitte, wat na 'n paar siklusse afneem as gevolg van die ongelykmatige smelting. Hierdie materiale is gemaak van

metaal en gehidreerde soute (Veerakumar & Sreekumar 2016), en kan ook uit nitrate bestaan. Anorganiese FVM's is stabiel vir 'n wye verskeidenheid temperature tot 1 500 °C (Raam Dheep & Sreekumar 2014; Veerakumar & Sreekumar 2016).

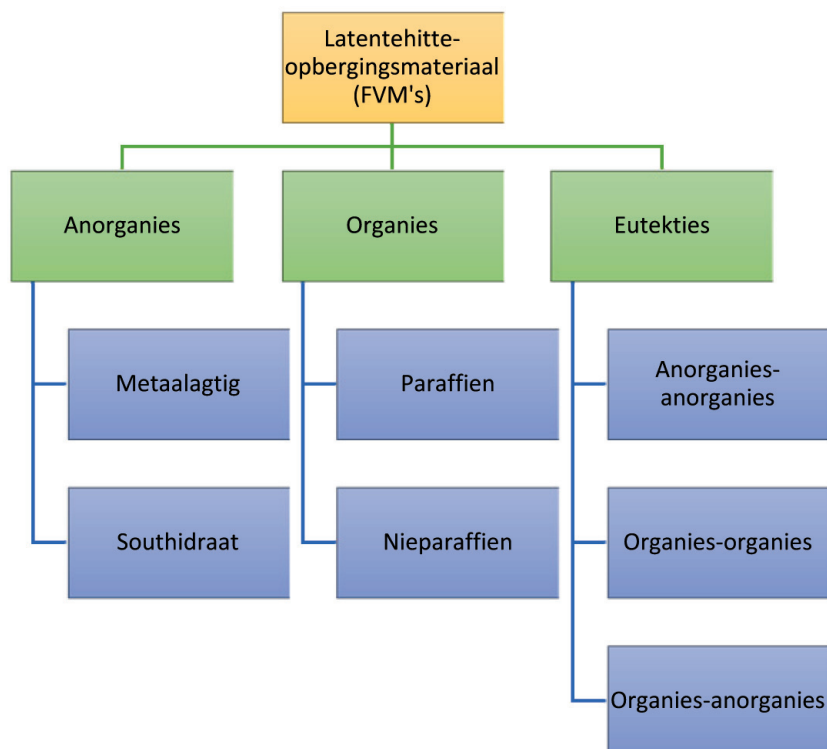
b) Organiese FVM's

Organiese FVM's word geklassifiseer as paraffien en nieparaffien. Hierdie materiale is koolstofgebaseerde verbindings, en na die getal koolstofatome toeneem, neem die latente hitte van versmelting van die materiaal en die smeltpunt toe. Organiese FVM's het 'n hoë latente versmeltingshitte en is chemies stabiel, maar het 'n lae termiese geleidingsvermoë (Veerakumar & Sreekumar 2016).

Organiese FVM's is duur en vlambaar. Organiese FVM's is ook effens korroderend, wat hulle saambruikbaar maak met alle soorte houers behalwe plastiek. Wanneer hulle by hoë temperature werk, is hulle nie geneig om te superverkoel of te skei nie. Organiese FVM's is stabiel by 'n wye verskeidenheid temperature onder 300 °C (Raam Dheep & Sreekumar 2014). Ten spyte van die nadele wat genoem is, is organiese materiale met eutektiese mengsels in die lugversorgingsbedryf reeds gebruik om voedsel te preserveer, elektronika af te koel en geboutemperature te handhaaf (Ndanduleni & Huan 2019; Xu et al. 2015). 'n Studie deur Kaygusuz et al. (2003) het getoon dat hierdie materiale ook vir sonverhitting gebruik kan word.

c) Eutektiese FVM's

Die smeltpunt van 'n FVM is 'n belangrike faktor om in ag te neem wanneer 'n FVM vir koelopbergingstoepassings gekies word. Om die gewenste smeltpunt te bereik, bestaan eutektiese FVM's



Figuur 4: Klassifikasie van FVM vir kouetermiese-energieopberging (Raam Dheep & Sreekumar 2014; Veerakumar & Sreekumar 2016)

uit twee of meer FVM's wat teen 'n spesifieke persentasie van die samestelling gemeng is. Eutektiese FVM's word gekategoriseer in organiese en anorganiese eutektiese FVM's. Dit maak dit vir hulle moontlik om bruikbaar te wees in beide hoë- en lae-temperatuurverkoelingsstelsels (Veerakumar & Sreekumar 2016). Aangesien hulle tot 'n intieme mengsel van kristalle vries, maak dit hulle minder vatbaar vir segregasie (Raam Dheep & Sreekumar 2014).

Kouetermiese-energieopberging (KTEO)

Kouetermiese-energieopberging (KTEO) verteenwoordig koel- en koue-TEO. Materiale soos glikol, eutektiese soute en suiwer water kan as verkoelingsopberging vir TEO-stelsels gebruik word (Dincer & Rosen 2011). Hierdie materiale kan in die koueketting gebruik word vir die vries van produkte of vir verkoeling.

Hoewel hierdie tegnologie al meer as 'n halfeeu bestaan, het dit eers onlangs meer aandag begin geniet weens groot veranderinge in elektrisiteitsariefstrukture, toenames in maksimum kragbehoefte en aansporingsprogramme wat deur nutsmaatskappye geborg is. Nutsmaatskappye hef hoër tariewe vir aanvraag in spitsstye om energieverbruik gedurende hierdie spitsstye te ontmoedig. KTEO-stelsels kan dan gebruik word om spitsverkoelingsladings na buitespitsstye te verskuif deur gedurende die dagspitsstye van hulle opgegaarde kapasiteit af te werk en dan gedurende die nag in die buitespitsstye weer volgelaai te word (Dincer & Rosen 2011). Dit lei tot 'n besparing in elektrisiteitskoste.

Laai van KTEO in bedryf

In Figuur 5, Dincer & Rosen (2011) KTEO in drie kategorieë gekarakteriseer, volopberging, gedeeltelikeopberging-ladinggelykmaking en gedeeltelikeopberging-vraagbeperking. Hierdie strategieë word geïmplementeer om in die verkoelingsvraag gedurende spitsstye te voorsien.

a) Volopberging-KTEO

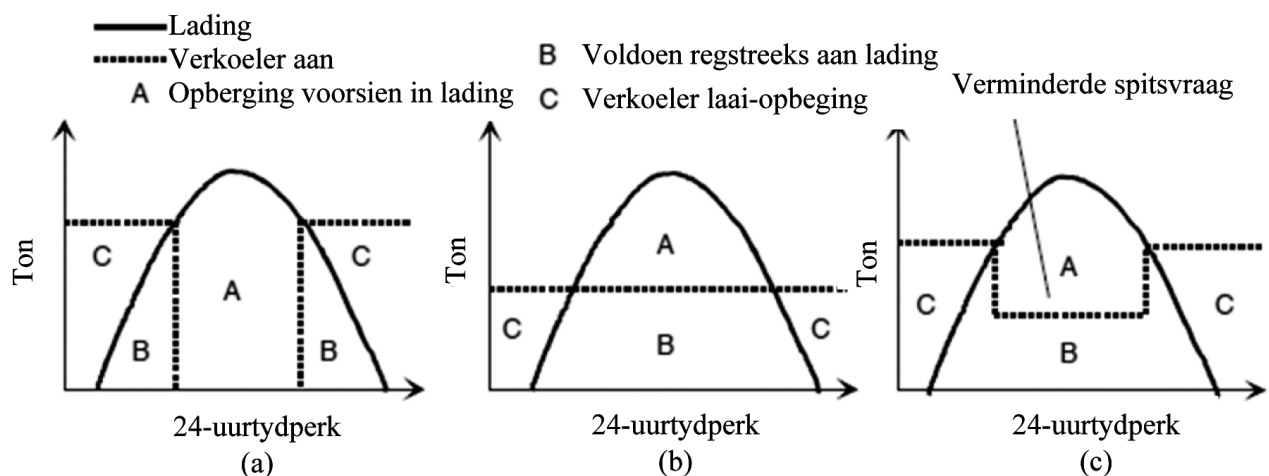
Soos in Figuur 5(a) geïllustreer word, word die KTEO-stelsel gedurende buitespitsstydure herlaai en gedurende spitsstydure is die KTEO-stelsel ten volle in werking. Dit verskuif die hele spitsverkoelingslading na buitespitsstydure deur die werking of die verkoelingsgenererende toerusting van die spitsverkoelingslading te ontkoppel. Die KTEO-stelsel ontlai die verkoelingslading terwyl die opwekkingstoerusting nie in werking is nie, wat hierdie strategie ideaal maak wanneer spitsvraagheffings hoog of die spitsstyd kort is (Dincer & Rosen 2011).

Dincer & Rosen (2011) het verder uiteengesit dat hierdie strategie ekonomies voordelig is indien:

- Spits in die spitsladingskromme van korte duur is
- Tyd-van-gebruik-energietariewe op spitsstye van korte duur gebaseer word
- Daar kort oorgelings tussens spitsladings en spitsenergietyperke is
- Groot kontantaansporings vir die gebruik van TEO aangebied word
- Hoë spitsvraagheffings van toepassing is

b) Gedeeltelikeopberging-ladinggelykmaking

Hierdie strategie is ontwerp om vir 24 uur in die bedryfsvraag te voorsien, soos in Figuur 5(b) geïllustreer word. Wanneer die spitsverkoelingslading baie hoër as die gemiddelde lading is, is die opbergingstelsel in gebruik om die spitslading te verlig. Die verkoeler het 'n kleiner kapasiteit as die ontwerpplading, sodat die res van die lading uit die opgebergte kapasiteit getrek kan word. Dit is ook die goedkoopste stelsel om te gebruik vergeleke met die volopberging- en gedeeltelikeopberging-vraagbeperkingstelsel, wat dit die mees ekonomiese opsie maak (Dincer & Rosen 2011).



Figuur 5: Bedryfstrategieë: (a) volopberging, (b) gedeeltelikeopberging-ladinggelykmaking, en (c) gedeeltelikeopberging-vraagbeperking (Dincer & Rosen 2011; Selvnies et al. 2021)

c) Gedeeltelikeopberging-vraagbeperking

Met die gedeeltelikeopberging-vraagbeperkingstrategie word die verkoeler se kapasiteit gedurende die spitsstye wanneer die energievraag hoog is, verminder, wat dit vir die opgebergde energie moontlik maak om in die ladingsvraag te voorsien. Hierdie strategie is goedkoper as dié van 'n volopbergingstelsel (Dincer & Rosen 2011).

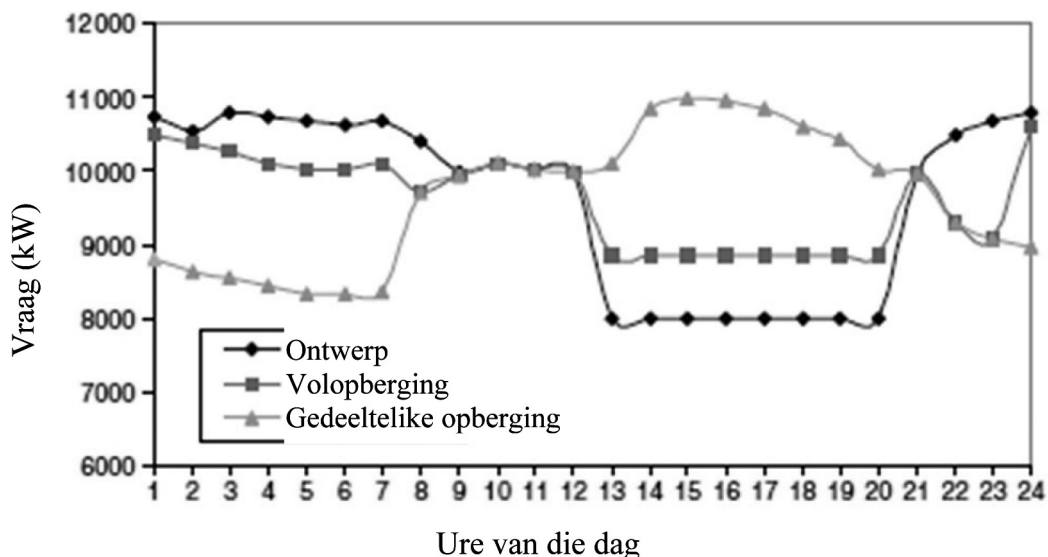
In Figuur 6 Dincer & Rosen (2011) geïllustreer dat wanneer KTEO-stelsels vir volopberging- en gedeeltelikeopberging-toepassings ontwerp word, sekere parameters in ag geneem moes word. Dincer & Rosen (2011) het verder verduidelik dat vir die ontwerp van deelladingstelsels al die komponente en pype in staat moet wees om by verskillende ladings beheer oor die stelsel te behou. In deelladingbedryf word die drukval, snelhede en vloeitempo's van die koelmiddel egter tydens die

aanvanklike stadiums verlaag of verminder. Vir temperatuurverminderingstelsels moet die komponente spesifiek ontwerp word om hoër ladings by aanvanklike aansakeling te hanteer.

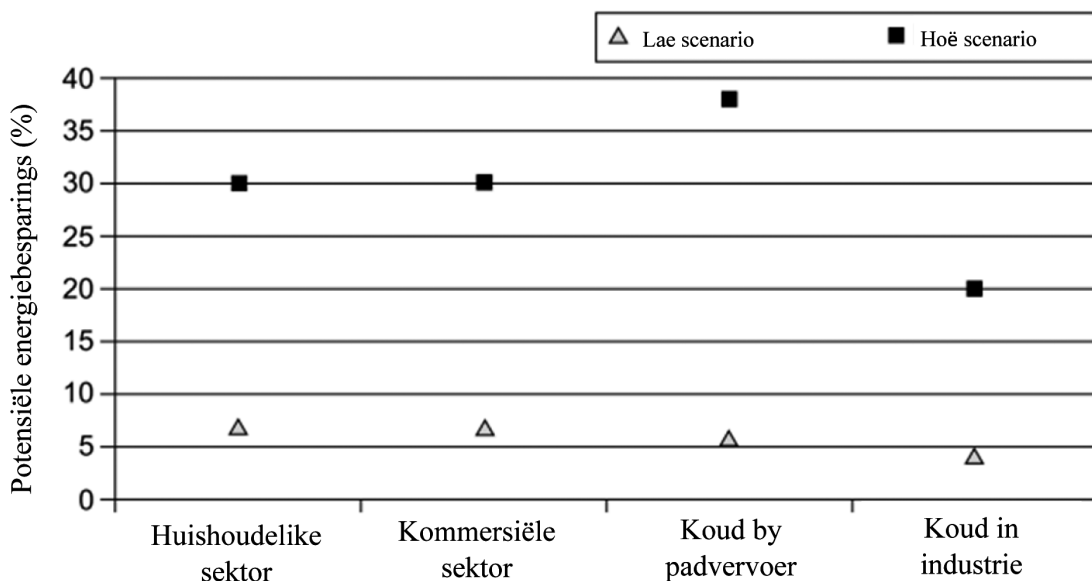
Selvnes et al. (2021) het gesê dat om 'n suksesvolle KTEO-stelsel te ontwerp en te implementeer, die spits/buitespits-vraagstruktuur geïdentifiseer moet word. Dan kan die stelsel pasgemaak word om die lading te hanteer.

Energiebesparing

Figuur 7 toon die slotresultate van 'n model wat deur Oró et al. (2014) ontwikkel is om die potensiële impak van TEO-stelsels in Spanje en Europa te raam. Die model is gebaseer op energieverbruik en die vermindering van CO₂-vrystellings. Die studie is uitgevoer om die potensiële besparing in verskillende sektore te bepaal deur volle implementering van TEO-stelsels in



Figuur 6: Voorbeeldvraagprofiel vir die ontwerp-, volopberging- en gedeeltelikeopberging-stelsels (Dincer & Rosen 2011).



Figuur 7: Potensiële energievermindering in koue toepassings met gebruik van verskillende scenario's (Cabeza et al. 2021; Oró et al. 2014).

verskillende toepassingsscenario's te veronderstel. Die toepassingsscenario's was bestaande gepubliseerde navorsingswerk van ander outeurs. Oró et al. (2014) het op grond van die resultate die energiebesparingsfaktore van die laagste na die hoogste gerangskik. Die skrywers het egter aangedui dat hierdie syfers nie die koste van die implementering van TEO-stelsels in bestaande stelsels ingesluit het nie, maar hulle het steeds die energiebesparingspotensiaal vir elke bedryf beraam (Oró et al. 2014).

Eutektiese plate

In 'n vorige studie (Radebe et al. 2020) is 'n gedetailleerde beskrywing van FIC se eutektiese plate bespreek. In hierdie artikel is slegs die plate van FIC ontleed om die totale koste van 'n TEOS te raam. Eutektiese plate het 'n paar voordele bo ander verkoelingstelsels wat hulle onderskei, maar 'n paar nadele is ook met hierdie stelsels ondervind.

Voordele

Eutektiese plate bevat geen bewegende dele terwyl hulle in werking is nie; dus maak dit hulle meganies betroubaarder as ander verkoelingsseenhede, wat geneig kan wees tot meganiese falings. Eutektiese plate maak geen geraas nie, wat hulle ideaal maak vir gebruik in situasies wat stilte vereis (FIC 2019).

As gevolg van die faseveranderingsmateriaal-oplossing wat binne-in die plate geplaas word, kan hulle 'n konstante temperatuur binne 'n verkoelde kompartement handhaaf. Hierdie temperatuur word gehandhaaf selfs wanneer die plate aan die omringende lug blootgestel word terwyl goedere op die vragmotor gelaai en afgelaai word. Eutektiese plate kan gebruik word op plekke waar daar geen elektriese netkrag is nie, aangesien dit vooraf gelaai kan word (FIC 2019).

In die geval van koue oppervlakke is ryp as gevolg van die humiditeit in die omliggende atmosfeer geneig om op hierdie oppervlakke op te bou, wat die hitteoordrag tussen die komponent en die atmosfeer aansienlik verminder. Met eutektiese plate beïnvloed die rypopbou nie die hitteoordrag noemenswaardig soos wat met afkoelvinne die geval is nie. Wanneer die duursaamheid van eutektiese plate oorweeg word, het hulle 'n groter duursaamheid en laer instandhoudingskoste as geventileerde stelsels (FIC 2019).

Nadele

Verskillende FVM-verbindings wat binne eutektiese plate gebruik word, kan baie korroderend wees. Om dit te vermy, moet die staal wat vir die verdampers-poele sowel as die plaat gebruik word, volgens die mengseleienskappe van die FVM geselekteer word. Korrosie wat tussen die FVM en die omhulsel voorkom, is een van die oorsake van onvoldoende langtermynstabiliteit by eutektiese plate (Zalba et al. 2003).

Wanneer die FVM van vloeistof na vaste stof verander wanneer dit vries, sit dit uit. As gevolg van uitsetting

tydens die vriesproses kan sommige van die plate lekkasies ontwikkel. Om dit te voorkom, is die spoel van die verdamper só ontwerp dat dit die oplossing toelaat om van die buiterande na die middel van die plaat te vries. Die vervaardiger maak ook al die rande rond en skakel enige skerp dele uit om 'n hoë weerstand te ontwikkel teen kragte wat tydens die uitsettingsproses ontwikkel (FIC 2019).

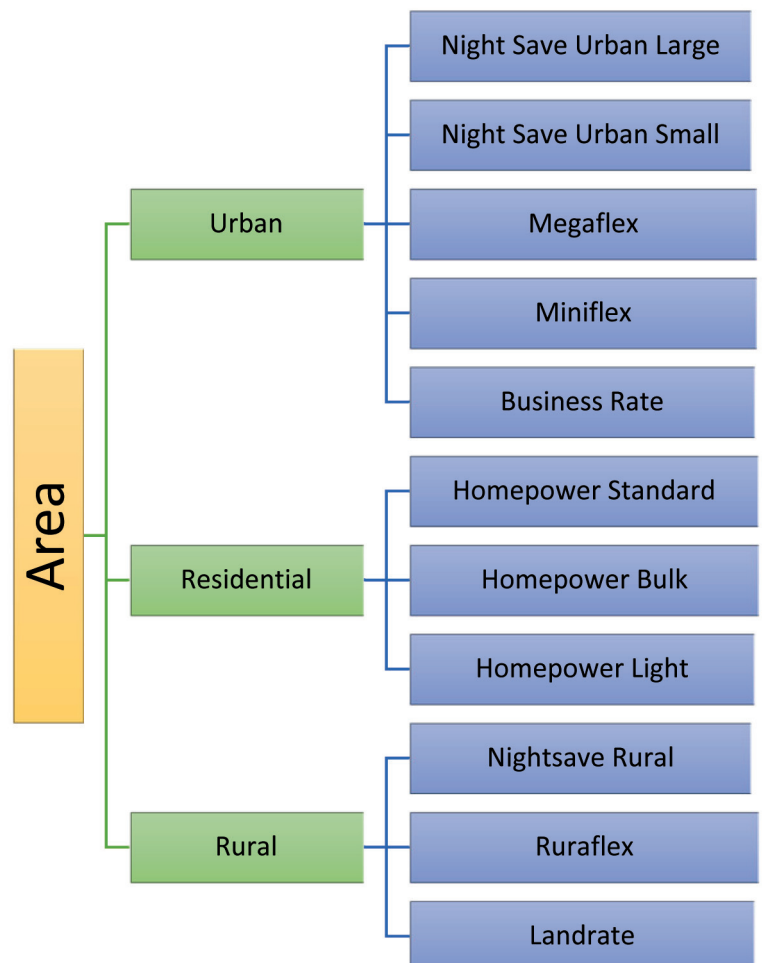
Nog 'n nadeel van FVM's is dat hul werkverrigting geneig is om te verswak, of dat hulle geneig is om af te breek ná verskeie siklusse van verandering van vastestof na vloeistof en dan weer van vloeistof na vastestof. Hierdie onstabiliteit hang daarvan af of die tipe FVM-groep wat gebruik word, organies of anorganies is (Liu et al. 2012; Zalba et al. 2003).

In die meeste studies is getoon dat die FVM-opbergingskoste hoër as die tradisionele opbergingsopsies was (Du et al. 2018).

Eskom-tariefkategorieë

Eskom het verskillende tariefplanne, wat afhanklik is van die tipe gebied, soos in Figuur 8.

- Night Save Urban Large – hierdie tariefplan is geskik vir kliënte met 'n hoë ladingsfaktor en met 'n gerapporteerde



Figuur 8: Eskom-tariefplan volgens streek (Eskom Bpk. 2021; National Cleaner Production Centre gd)

maksimum vraag ("NMD" (notified maximum demand)) van > 1 MVA.

- Night Save Urban Small – hierdie tariefplan is geskik vir kliënte met 'n hoë ladingsfaktor en met 'n NMD van > 25 kVA maar < 1 MVA.
- Megaflex – hierdie tarief is geskik vir kliënte wat lading kan verskuif en 'n NMD van > 1 MVA het.
- Miniflex – hierdie tariefplan is geskik vir kliënte wat lading kan verskuif en 'n NMD van > 25 kVA maar < 5 MVA het.
- Business Rate – hierdie tariefplan is geskik vir kliënte met kommersiële gebruik en niekommersiële voorsiening met 'n NMD van < 100 kVA. Dit is klein ondernemings, staatsinstellings, kerke, skole, sale, klinieke, ouetehuse, openbare beligting, ens.
- Homepower Standard – hierdie tariefplan is geskik vir residensiële kliënte (kerke, skole, sale, klinieke, ouetehuse) met 'n NMD van < 100 kVA.
- Homepower Bulk – hierdie tariefplan is geskik vir deeltitel-ontwikkelings.
- Homepower Light – hierdie tariefplan is geskik vir enkelfase-residensiële gebiede wat in stedelike gebiede gesubsidieer word.
- Night Save Rural – hierdie tariefplan is geskik vir landelike kliënte met 'n hoë ladingsfaktor, 'n NMD van > 25 kVA en 'n toevoerspanning van < 22 kV.
- Ruraflex – hierdie tariefplan is geskik vir kliënte met twee- en driefasetoevoer, 'n NMD > 25 kVA en 'n toevoerspanning van < 22 kV.
- Landrate – hierdie tariefplan is geskik vir kliënte met twee- en driefasetoevoer en 'n NMD van < 100 kVA en toevoerspanning van < 500 V.
- Land Light – hierdie tariefplan is geskik vir enkelfase-residensiële gebiede wat gesubsidieer word in landelike gebiede wat tot 20 A en 60 A beperk is.

Metodologie

Koelkamerspesifikasies

Die koelkamer wat in hierdie studie gebruik is, word in Figuur 9 geïllustreer. Tydens die werking van die koelkamer met 'n interne temperatuur van -20 °C en 'n omgewingstemperatuur

van ongeveer -24 °C was die gemete kragverbruik ongeveer 4,5 kW by 'n 3kg-koelmiddellading, by 'n gemete massavloei-tempo van 0,06 kg/s. Die verkoelingskapasiteit is toe bereken as ≈10 kW, met die laagste temperatuurlesing van -26 °C by die verdamer. Die spesifikasies word in Tabel I uiteengesit.

Vir hierdie studie is die gemiddelde koelkamerbedryfstyd van 17 uur met 'n volle lading gebruik. Die verkoelingstelsel se bedryfstye was daagliks van 06:00 tot 23:00 geskeduleer.

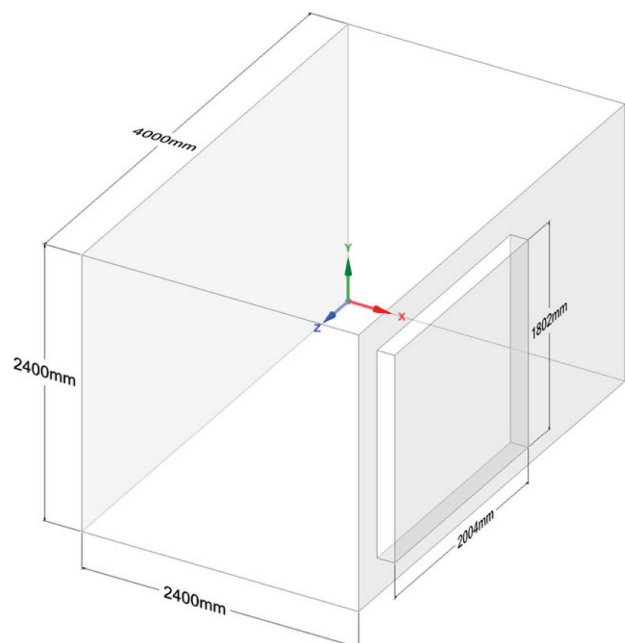
Hittelading

Transmissielading

Die aanvoelbare hittetoename deur die mure, vloer en plafon word bereken teen 'n ewewigstoestand soos uitgedruk in Vergelyking 1 (Huan 2016)

$$q = UA \cdot \Delta T$$

Vergelyking 1



Figuur 10: Afmetings van koelkamer



Figuur 9: Koelkamer

Tabel I: Tshwane-Universiteit van Tegnologie se koelkamerspesifikasies

Afmetings (m) (lxbxh)	4 x 2,4 x 2,4 met 150 mm polistireenpanele en aluminiumplate en 'n deur van 2 x 1,8
Elektriese motor	3-fase Spanning: 380 V Drywing: 5,5 kW RPM: 1 435
Kompressor	V: 20,3 m ³ /h N: 1 450 r/min Slag: 325 cm ³ Pmaks = ND(LP)/HP(HP) = 19/28 bar
Kondensor	Getal buise in die dwarsrigting: 11 Getal rye in die lengterigting: 5 Buislengte (wyd) = 0,83 m verspring Deursnee (ID/ED) 6,25 mm
Verdamper	Getal buise in die dwarsrigting: 11 Getal rye in die lengterigting: 5 Buislengte (breed) = 1,07 m verspring Deursnee (ID/ED) = 8,75 mm
Uitsettingstoestel	Model: elektriese GS 12V PQM 1000 / 140 / 14 / 2 Deursnee (ID/ED) = 3,75 mm
Koelmiddel	HFC R404A, 3 kg-lading

Waar

- U die algehele hitte-oordragkoeffisiënt is van die muur, vloer en plafon [W/m² · K]
- A die buiteoppervlakte van die gedeelte is [m²]
- ΔT die verskil is tussen die buitelugtemperatuur en lugtemperatuur van die verkoelde ruimte [K]

Infiltrasie deur lugwisseling

Die infiltrasie vind meestal plaas as gevolg van die lugdigtheidsverskille tussen kamers. Die gemiddelde hittetoe-name vir die 24 uur deur die deuropening as gevolg van luguitruiling word in Vergelyking 2 (Huan 2016)

$$q_t = qD_t D_f (1 - E) \quad \text{Vergelyking 2}$$

Waar

- q die aanvoelbare en latente verkoelingslading vir ten volle gevestigde vloei is [kW]
- D_t die deuropening-oopstaantyd faktor is
- D_f die deuropening-vloefaktor is, wat as 1,0 bepaal is
- E die doeltreffendheid van die deuropeningbeskermings-toestel is

$$q = 0.221A(h_i - h_r)\rho_r \left(1 - \frac{\rho_i}{\rho_r}\right)^{0.5} (gH)^{0.5} F_m$$

Waar

- h_i die entalpie van infiltrasielug is [kJ/kg]
- h_r die entalpie van verkoelde lug is [kJ/kg]

- ρ_i die digtheid van infiltrasielug is [kg/m³]
- ρ_r die digtheid van verkoelde lug is [kg/m³]
- g die gravitasiekonstante is = 9,81 m/s²
- H die deurhoogte is [m]
- F_m die digtheidsfaktor is, uitgedruk in Vergelyking 3

$$F_m = \left[\frac{2}{1 + (\rho_r/\rho_i)^{1/3}} \right]^{1.5} \quad \text{Vergelyking 3}$$

Vir sikliese, onreëlmatige en konstante deurgebruik, alleen of in kombinasie, is die deuropening-oopstaantyd faktor bepaal as Vergelyking 4.

$$D_t = \frac{(P\theta_p + 60\theta_o)}{3600\theta_d} \quad \text{Vergelyking 4}$$

Waar

- P die getal deurgange deur die deur is
- θ_p is die deur se oop-toe-tyd is, sekondes per deurgang
- θ_o die tyd is wat die deur eenvoudig oopstaan [min]
- θ_d die daaglikse tydperk is [h]

Eutektiese plate

In 'n studie deur Yang et al. (2017) was die geraamde tyd om 'n eutektiese plaat te laai agt uur.

Elektrisiteitsariewe

Die pryse wat in hierdie studie in aanmerking geneem is, was geldende energietariewe slegs met transmissiesones oor

Tabel II: Eutektieseplaat-spesifikasies (FIC SpA 2018).

Model		Afmetings				Plaatoppervlak	Verdamper		Oplossing -23°C		Oplossing -33°C	
		A × B × S (mm)				(m ²)	Lengte (m)	Vol (dm ³)	Akkm. (Wh)	Gewig (kg)	Akkm. (Wh)	Gewig (kg)
EFR	1 757	1 740	690	53	2,73	20,7	4,14	3 510	83	3 300	88	
Prys per plaat, uitgesluit BTW, versending en installeringsgelde									≈ R13 250		≈ R14 217	

afstande korter as 300 km, en 'n spanning van minder as 500 V. Slegs seisoenale, TVG en behandeling van openbare vakansiedae is by die prys ingesluit. Business Rate 1 is gekies, met 'n driefasetoewoer van 25 kVA en 40 A per fase. Vir Homepower Light is die toewoer van 20 A gekies as die kragtoewoer wat voldoende is om die koelkamer van krag te voorsien. Die Land Light-tarief is uitgesluit, aangesien dit slegs enkele fase gebied het. Die tariefpryse is saamgegroepeer ten einde die prysstruktuur in Eskom Bpk. (2021) te vereenvoudig. Tariefplanne is van 1 April 2021 tot 1 April 2022 bereken. Al hierdie data is beskikbaar in die Eskom Bpk. (2021)-dokument.

Resultate en bespreking

Koelkamerkonfigurasie

Die eutektiese plaat wat in hierdie studie gebruik is, was die EFR 1757 plaat van FIC SpA, waarvan die oplossing by -23°C en -33°C 'n faseverandering ondergaan. Die vervaardiger het 'n verkoelingstelsel aanbeveel wat 10°C onder die faseveranderingstemperatuur werk om die FVM-oplossing ten volle te vries. Die EFR 1757 met die faseveranderingsoplossing van -33°C is meer geskik vir vleisopbergingskoelkamers. Die EFR 1757 met die faseveranderingsoplossing van -23°C is geskik vir die bewaring van goedere wat van -13°C af wissel. Die gebruik van 'n verkoelingsaanleg met 'n laer bedryfstemperatuur sal die COP van die aanleg verlaag en sodoende die laaityd van die eutektiese plaat verminder. Die tegnikus of ontwerper vir hierdie stelsel moet dit in die ontwerp in berekening neem, aangesien die verdamperspoellengte van die eutektiese plaat 'n vaste faktor is.

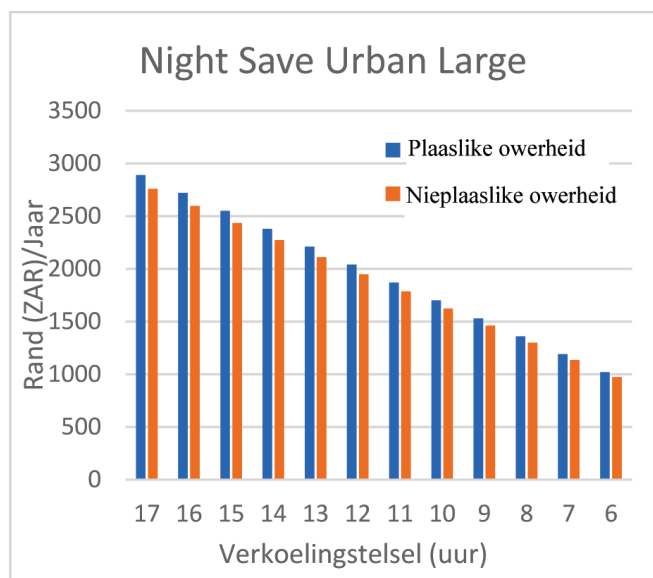
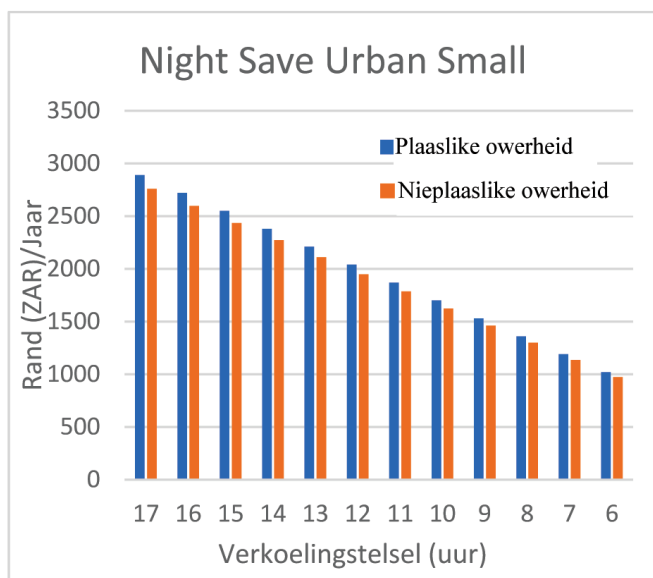
Met die huidige koelkamerskema is die werkstemperatuur van die verdamper -26°C , dus word die EFR 1757 met 'n faseveranderingsoplossing van -11°C aanbeveel. Dit beperk die toepassing van die huidige koelkamer tot 'n yskastoepassing wat by 'n temperatuur onder 4°C werk en nie meer dié van 'n vrieskas wat by -18°C werk nie.

Wat die konfigurasie-opstelling betref, is daar in 'n vorige studie (Radebe et al. 2020) tot die gevolgtrekking gekom dat die plasing van die eutektiese plaat aan die bokant hoë lugsirkulasie binne die kompartement bevorder het. Dit vermy temperatuur-opbou aan die bokant, wat die stapelhoogte van die goedere in die koelkamer beperk. Vir vinnige temperatuurherstel word druklugkonveksie aanbeveel. In hierdie studie is die koste vir druklugkonveksie egter nie ingesluit nie. Die waaiers wat binne die koelkamer gebruik word, dra nie net by tot die hittelading nie, maar dra ook by tot die totale energieverbruik van die verkoelingsaanleg. Die ontwerper moet die hittelading van die waaiermotor by die transmissieladings insluit, wat sodoende bydra tot die volumetoename van die eutektiese plaat wat in die koelkamer benodig word. Die ontwerper moet ook die koste inreken om die waaiers te laat werk gedurende die tyd wat die kompressor af is.

Tariefpryse

Daar is opgemerk dat vir lokaliteite met die tariefpryse in plaaslike en nieplaaslike owerhede, die pryse nie veel van mekaar verskil het nie. Wanneer pryse dus vir langer termyne bereken word, verskil die totale koste nie beduidend nie. Vir elke tariefplan word die berekende maksimum van 17 uur en die minimum van 6 uur weergegee. Dit is die gemiddelde tydsbestek per dag wat die verkoelingstelsel in werking is, soos in Figuur 11 gesien kan word.

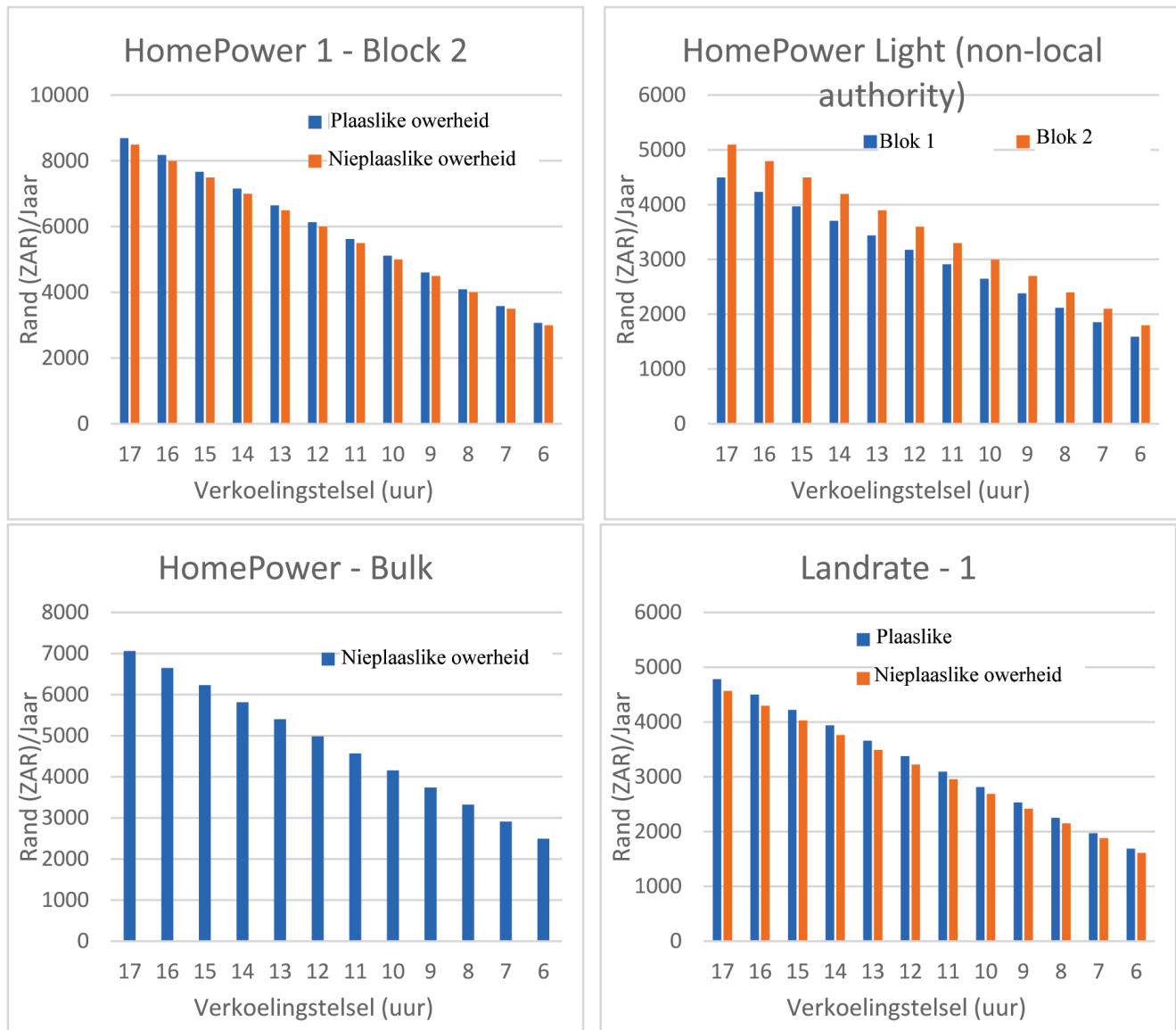
Met die huidige koelkamerkonfigurasie met die verkoelingsaanleg wat gemiddeld 17 uur per dag werk, kos dit byna ZAR3 000/jaar vir koelkamers wat in Night Save-tariefplan se streke geleë is, en byna ZAR4 000/jaar vir Megaflex, Miniflex en Ruraflex. Die koste was bykans ZAR5 000/jaar vir Business Rate, byna ZAR5 500/jaar vir Homepower 1, byna ZAR9 000/jaar vir Homepower 2, byna ZAR4 500/jaar vir Homepower Light, byna ZAR7 000/jaar vir Huispower Bulk en byna ZAR500/jaar vir Landrate.



Figuur 11: Tariefplanpryse vir koelkamerbedryf/jaar



Figuur 11: Tariefplanpryse vir koelkamerbedryf/jaar (vervolg)



Figuur 11: Tariefplanpryse vir koelkamerbedryf/jaar (vervolg)

Die grafieke in Figuur 11 beeld die pryse uit (in rand) as 'n funksie van tyd (vir die bestek van 17 tot 6 uur) – 'n lineêre afhanklikheid. Dit is ideaal om die verkoelingstelsels vir agt uur te gebruik om die helfte van die prys van 'n 17-uur-operasie te gebruik. Dit sou die tyd wees om die LHTEOS volledig te laai soos geïllustreer deur Yang et al. (2017). Die vervaardiger van die eutektiese plate het egter nie genoem hoe lank dit sal neem om die plate te laai nie. Uit bekende literatuur sal 'n groot temperatuurverskil tussen die faseveranderingspunttemperatuur van die eutektiese plate en die verdamperspoel die hitteoordragtempo verhoog, en daarmee saam ook die laaityd. Faktore soos die massa-vloeiempo van die koelmiddel sal ook 'n beduidende rol speel.

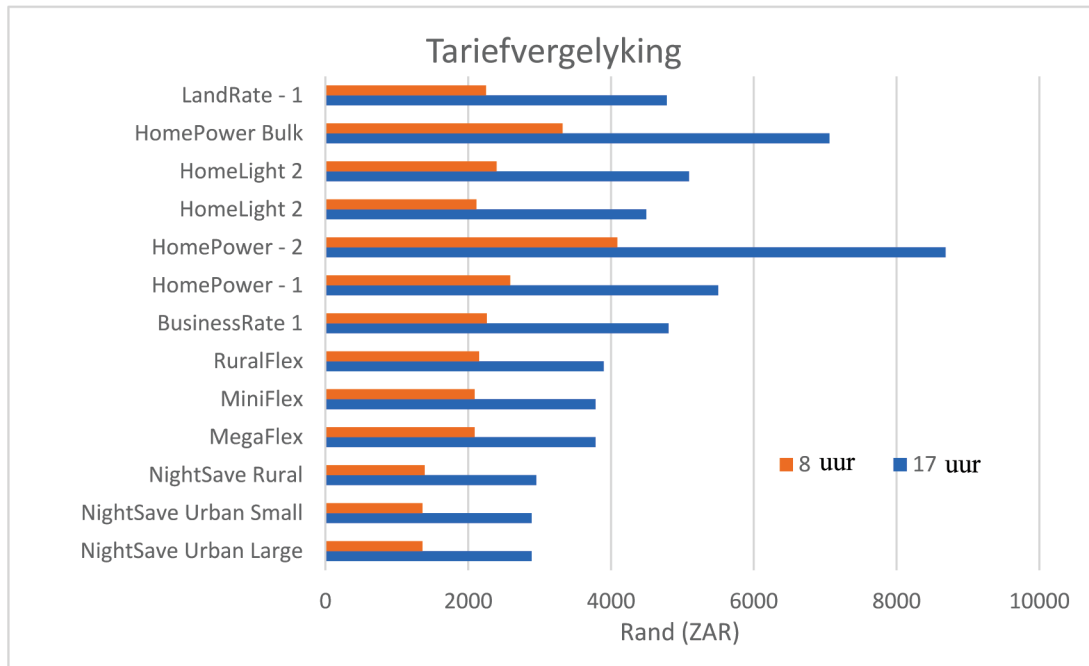
Opbergingsstelsel geïntegreer in 'n koelkamer

Dit blyk dus uit Figuur 12 dat vir 'n koelkamer waarin die verkoelingstelsel gemiddeld 17 uur per dag werk, Homelight die duurste tariefstreek is vir die koelkamer wat in dié streek geleë is. Deur 'n LHTEOS te integreer, sal die verkoeling net vir agt uur loop om die LHTEOS te laai. Dit verminder die koste met

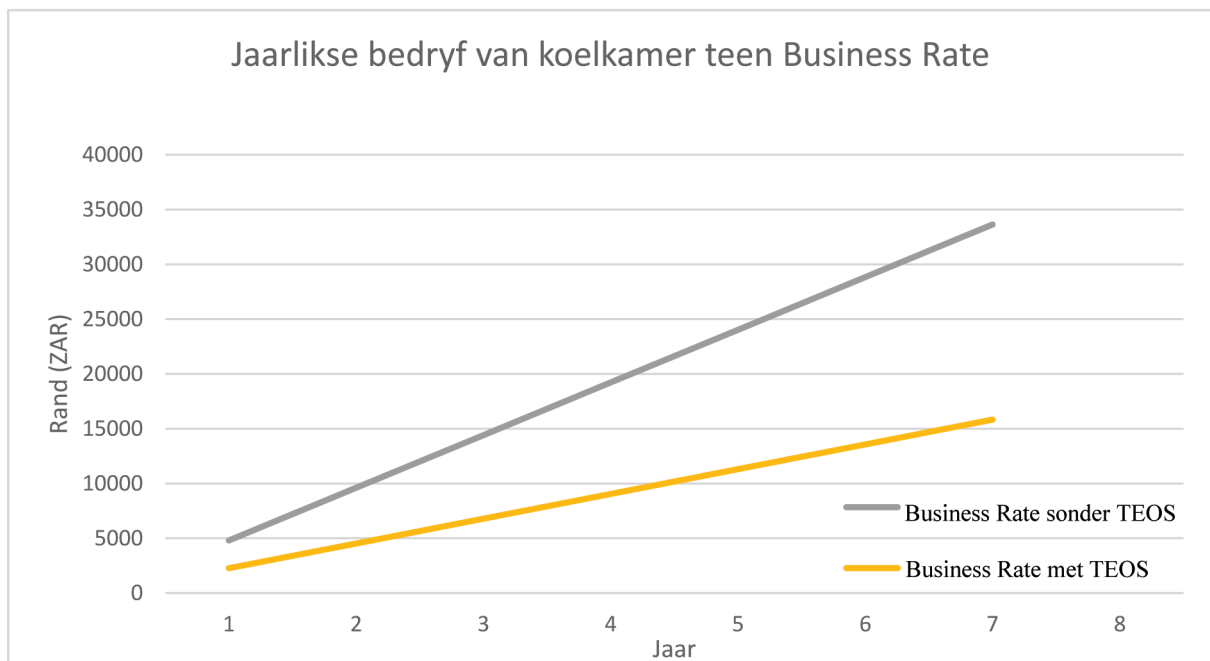
meer as 50% van die prys wat dit sou kos vir 'n verkoelingstelsel wat vir 17 uur aanmekeer werk. Sou die koelkamer in 'n Night Save Urban Large- of Urban Small-streek geleë wees, sal dit die mees koste-effektiewe tarief vir die koelkamer wees, aangesien TOU-skedules gebruik word. Dit bevoordeel dus hierdie tipe tariefplanne, aangesien die koelkamer wat in hierdie streke geleë is, snags bedryf kan word om die eutektiese plaat teen lae koste te laai, en dan gedurende die dag die koelkamer by die verlangde temperatuur te hou deur van die ontlaisiklus van die eutektiese plate gebruik te maak, soos in die studie van Yang et al. (2017). Ongelukkig, in teenstelling met China, verskaf Suid-Afrika se kragvoorsiener slegs 'n vaste tarief in die geval van Business Rate.

Kostebesparing

Die Business Rate-tarief is in 'n ontleding gebruik om die opbrengs op beleggingskapitaal, wat 16,6%/jaar beloop het, te bepaal. Die berekening is gebaseer op jaar 1 tot jaar 7 van die installasie. 'n Enkele plaat beloop ZAR15 000, wat as 'n konstante



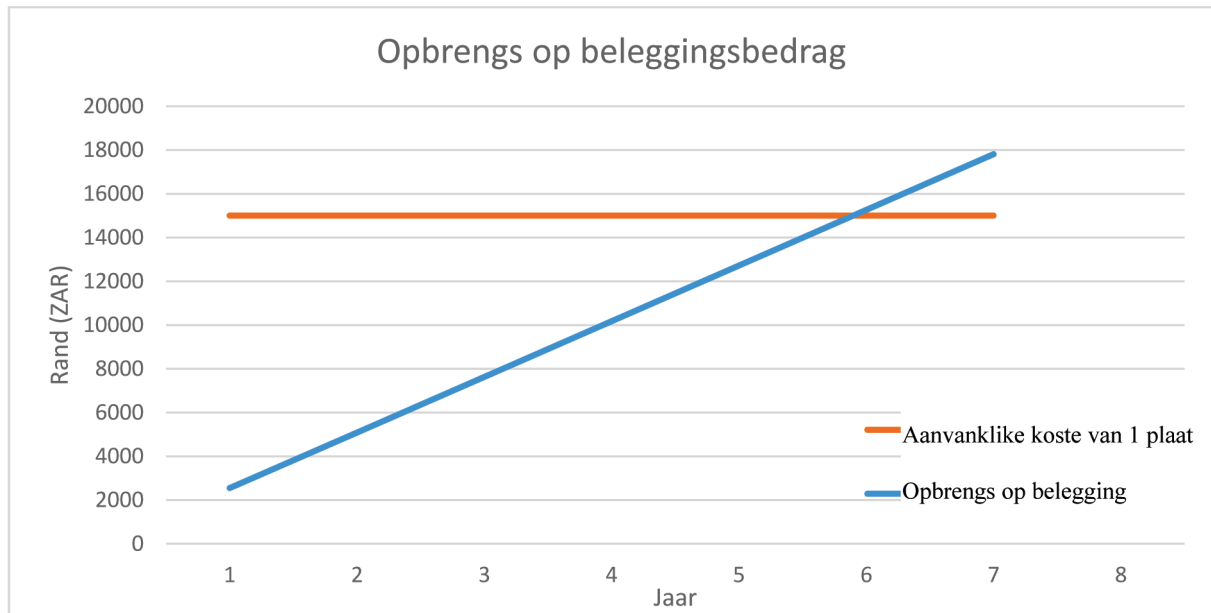
Figuur 12: Tariefvergeelyking na die integrasie van LHTEOS



Figuur 13: Jaarlikse werking van koelkamer teen Business Rate

lyn in Figuur 13 getoon word. Die koste om 'n koelkamer te bedryf teen Business Rate sonder 'n LHTEOS beloop dubbel die koste wat dit beloop om 'n koelkamer met 'n LHTEOS te bedryf. 'n Koelkamer wat sonder 'n LHTEOS werk, verbruik meer energie en kos ZAR30 000 oor ses jaar, vergeleke met een wat 'n LHTEOS gebruik wat 16 uur bedags werk, waarvan die koste ZAR15 000 beloop.

Die huidige pryse van die eutektiese plate maak dit moeilik om die aanvanklike koste van die skema te verhaal. Deur die elektrisiteitskoste van 'n koelkamer wat met 'n LHTEOS werk af te trek van die elektrisiteitskoste van 'n koelkamer wat sonder 'n LHTEOS werk, kan die kostebesparing bepaal word. Hierdie berekende pryse neem aan dat faktore soos inflasie, oliepryse, ens. konstant bly. Figuur 14 toon dat dit ses jaar sal neem om die aanvanklike koste van R15 000 te verhaal. Die kostebe-



Figuur 14: Opbrengs op beleggingsbedrag

sparingstydperk is lank, en eutektiese oplossings het 'n beperkte lewensiklus. Al is eutektiese plate dus herbruikbaar, moet hierdie bykomende instandhoudingskoste by die koste ingereken word. Die aanvanklike koste word oor ses jaar verhaal. Daar word dus tot die gevolgtrekking gekom dat die opbrengs op die beleggingskapitaal 16,6%/jaar sal wees. Hierdie koste sluit nie belasting op toegevoegde waarde (BTW), aflewering en installasie in nie. Deur die koste van die plate te verminder, sal die skema meer aantreklik vir kliënte wees, aangesien LHTEOS die potensiële negatiewe impak van beurtkrag op verkoelingstelsels verminder, en indien veranderlike tariewe gebruik word, dit ook kostebesparings vir die gebruiker kan meebring.

Ten slotte

'n LHTSS kan bydra tot die vermindering van die potensiële negatiewe impak van beurtkrag op verkoelingstelsels, met opberging van oortollige energie gedurende 'n tyd wanneer dit beskikbaar is, om gebruik te word wanneer 'n energietekort ervaar word; en indien veranderlike tariewe benut word, kan dit kostebesparings vir die gebruiker oplewer. LHTEOS dra daartoe by dat koelkamers doeltreffender is en sodoende voordele vir die omgewing tot gevolg het. Uit hierdie studie word die gevolgtrekking gemaak dat dit duur is om 'n LHTEOS in 'n bestaande koelkamer te integreer weens die hoë aanvanklike koste en die lang terugbetalingstydperk. As hierdie aanvanklike koste verminder sou kon word, sou die skema aantrekliker vir kliënte wees. Nuwe metodes moet gebruik word om die vervaardigingskoste van eutektiese plate te verminder ten einde die stelsel aantrekliker te maak. Hierdie studie het daarop gefokus om die hittelading wat benodig word tydens die werking van die koelkamer te oorkom. Die fokus was nie op die temperatuurverspreiding binne die koelkamer nie. Meer plate is nodig om die temperatuurskommelings binne 'n koelkamer te verminder.

Die tariefplanne van die Suid-Afrikaanse kragvoorsiener, Eskom, verskil drasties, met Night Save Urban Large en Urban Small wat die goedkoopste tariefplanne is en Homepower Light die duurste. Wanneer die LHTEOS in bestaande koelkamers geïntegreer word, moet die getal uur wat die verkoelingstelsel loop, beraam word om koste te verminder. 'n Temperatuurverskil van tussen die verdamer en die FVM moet egter in die ontwerp ingewerk word, hoewel dit die doel en toepassing van die koelkamer beperk. Vir nuwe koelkamers met LHTEOS moet die getal plate bereken word wat benodig word om die verlangde temperatuur te handhaaf. Dit sal ook help om die aanvanklike koste van die skema te bepaal. Die ontwerper moet ook die temperatuurverlagingstyd in ag neem, aangesien dit sal bepaal of die stelsel 'n druklug- of 'n natuurlikekonveksiestelsel moet wees.

ORCID

BT Radebe <https://orcid.org/0000-0003-2796-9084>

Datums

Ontvang: 13/05/2022
Aanvaar: 24/11/2022
Gepubliseer: 01/06/2023

Bronnelys

- Cabeza, L.F., Castell, A., Barreneche, C., et al., 2011, Materials used as PCM in thermal energy storage in buildings: A review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 15(3), 1675-1695. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2010.11.018>.
- Cabeza, L.F., Martorell, I., Miró, L., et al., 2021, Introduction to thermal energy storage systems, *Advances in Thermal Energy Storage Systems*, 1-33. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819885-8.00001-2>.
- Dincer, I. & Rosen, M.A., 2011, *Thermal Energy Storage*, John Wiley & Sons, Inc., Britain.
- Du, K., Calautit, J., Wang, Z., et al., 2018, A review of the applications of phase change materials in cooling, heating and power generation in different temperature ranges, *Applied Energy* 220, 42-273. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2018.03.005>.

- Eskom, 2021, Eskom schedule of standard prices 2020/21, SC0207(202).
- Eskom Ltd., 2021, Tariffs & charges booklet 2021/2022, 20. Available from: http://www.eskom.co.za/CustomerCare/TariffsAndCharges/Documents/ESKOM_TC_BOOKLET_2012-13_FINAL_3.pdf.
- Evans, J., Foster, A., Huet, J.M., et al., 2014, Specific energy consumption values for various refrigerated food cold stores, *Refrigeration Science and Technology*, 74, 141-151. <https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2013.11.075>.
- FIC, 2019, Eutectic Plates – Accumulation systems for transport refrigeration, Italy.
- FIC S.p.A. 2018, Eutectic Plates, Via Trivulzia, Available from: <https://www.fic.com/en/product/eutectic-plates>.
- Gibb, D., Seitz, A., Johnson, M., et al., 2018, Applications of thermal energy storage in the energy transition - benchmarks and developments. Available from: <https://www.eces-a30.org/publications/>.
- Huan, Z., 2016, Heat load calculation in refrigeration and air conditioning, first edit, pp. 134-152.
- Kaygusuz, K., 2003, Phase change energy storage for solar heating systems, *Energy Sources* 25(8), 791-807. <https://doi.org/10.1080/00908310390207837>.
- Lambert, K. & Roberto, P., 2014, 2014 Report of the refrigeration, air conditional and heat pumps technical options committee.
- Lazaro, A., Delgado, M., König-Haagen, A., et al., 2020, Technical performance assessment of phase change material components, *Proceedings of the ISES Solar World Congress 2019 and IEA SHC International Conference on Solar Heating and Cooling for Buildings and Industry* 2018, 1236-1247. <https://doi.org/10.18086/swc.2019.22.05.s>.
- Liu, M., Saman, W., Bruno, F., 2012, Development of a novel refrigeration system for refrigerated trucks incorporating phase change material, *Applied Energy* 92, 336-342. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2011.10.015>.
- Maphatsoe, K., 2021, Solar viable amid power outages, *Creamer Media - Engineering News* 78.
- National Cleaner Production Centre n.d., Resource efficiency and cleaner production: A guide to understanding your industrial electricity bill, Available from: <http://ncpc.co.za/files/Guides/How to Read Your Electricity guide Book.pdf>.
- Ndanduleni, A.U.C. & Huan, Z., 2019, Review on phase change materials for sub-zero temperature application in transport refrigeration, 1-10.
- Oró, E., Miró, L., Farid, M.M., et al., 2014, Energy management and CO2 mitigation using phase change materials (PCM) for thermal energy storage (TES) in cold storage and transport, *International Journal of Refrigeration* 42, 26-35. <https://doi.org/10.1016/j.ijrefrig.2014.03.002>.
- Raam Dheep, G. & Sreekumar, A., 2014, Influence of nanomaterials on properties of latent heat solar thermal energy storage materials - A review, *Energy Conversion and Management* 83, 133-148. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2014.03.058>.
- Radebe, T.B., Huan, Z., Baloyi, J., 2020, A simulation study of natural convection airflow pattern for a phase change material chamber, *SSRN Electronic Journal*. <https://doi.org/10.2139/ssrn.3637981>.
- Radebe, T.B., Huan, Z., Baloyi, J., 2020, Simulation of eutectic plates in medium refrigerated transport, *Journal of Engineering, Design and Technology*. <https://doi.org/10.1108/JEDT-02-2020-0065>.
- Selvnnes, H., Allouche, Y., Manescu, R.I., et al., 2021, Review on cold thermal energy storage applied to refrigeration systems using phase change materials, *Thermal Science and Engineering Progress* 22, 100807. <https://doi.org/10.1016/j.tsep.2020.100807>.
- Vadhera, J., Sura, A., Nandan, G., et al., 2018, Study of phase change materials and its domestic application, *Materials Today: Proceeding* 5(2), 3411-3417. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2017.11.586>.
- Veerakumar, C. & Sreekumar, A., 2016, Phase change material based cold thermal energy storage: Materials, techniques and applications - A review, *International Journal of Refrigeration* 67, 271-289. <https://doi.org/10.1016/j.ijrefrig.2015.12.005>.
- Xu, B., Li, P., Chan, C., 2015, Application of phase change materials for thermal energy storage in concentrated solar thermal power plants: A review to recent developments, *Applied Energy* 160, 286-307. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.09.016>.
- Yang, T., Wang, C., Sun, Q., et al., 2017, Study on the application of latent heat cold storage in a refrigerated warehouse, *Energy Procedia* 142, 3546-3552. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.12.243>.
- Zalba, B., Marin, J.M., Cabeza, L.F., et al., 2003, Review on thermal energy storage with phase change: Materials, heat transfer analysis and applications, *Applied Thermal Engineering* 23(3), 251-283. [https://doi.org/10.1016/S1359-4311\(02\)00192-8](https://doi.org/10.1016/S1359-4311(02)00192-8).

Strukturele vergelyking-model om die kritieke veranderlikes wat verband hou met die aanvaarding van slimkaarttegnologie in Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg te ontleed

L Malungana, L Motsi

Kollege vir Wetenskap, Ingenieurswese en Tegnologie, Universiteit van Suid-Afrika, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: L Malungana **E-pos:** Lario.lalie@gmail.com

Implementering van gesondheidsorginligtingstelsels is een van vele tegnologiese verbeterings in openbare gesondheidsorg. In hierdie studie word die belangrike faktore wat verband hou met die aanvaarding van slimkaarttegnologie (SKT) in openbare gesondheidsorg ontleed. Die studie het strukturele vergelyking-modellering (SVM) gebruik om modelleringsmetodes en die verskeidenheid potensiële toepassings in die veld van gesondheidsorg te beraam. Hierdie studie het ten doel gehad om 'n model van strukturele vergelykings te ontwikkel wat die kritieke suksesfaktore opsom wat met die aanvaarding van slimkaarttegnologie in Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg verband hou. Die studie het begin deur die literatuur waarvan 'n oorsig gedoen is aan te bied en te demonstreer watter daarvan gebaseer was op veranderlikes wat uit die vasgestelde onderliggende idees geneem is. Die vraelyste is aan gesondheidsorgberoepslui by die Steve Biko- Akademiese Hospitaal, Kalafong- Tersiêre Hospitaal en die Pretoria-Wes- en die Tshwane-distrikshospitaal versprei. Volgens die voorgestelde model sluit kritieke faktore gedragsvoorneme, stelselgebruik, inligtingskwaliteit, dienskwaliteit, kommunikasie, versoenbaarheid en beproefbaarheid in. Inspanningsverwagting, sosiale invloed, fasiliterende toestande, gebruikershouding en gebruikerstevredenheid is egter nie deur die studie ondersteun nie. Bevestigende faktoranalise is geskep deur die metings wat ingesamel is as die resultate te gebruik. Die uitkomst is dat die noodsaaklike rol van gesondheidsorgberoepslui in hospitale ondersteun ten einde SKT ten volle te implementeer. Dit sal aan pasiënte die geleentheid bied om toegang tot beter gesondheidsorgdienste te verkry. Op grond van die inligting wat uit steekproewe versamel is, het die studie die aanname gemaak dat die bevindinge in 'n verskeidenheid velde bevestig kan word, waaronder ook velde buite gesondheidsorg. Hierdie studie sal bydra tot die aanvaarding van slimkaarttegnologie in die Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg-konteks deur gebruik te maak van die bevindinge van strukturele vergelyking-modellering.

Sleutelwoorde: Aanvaarding, openbare gesondheidsorg, gesondheidsorgberoepslui, slimkaarttegnologie, hospitale

Structural equations model to analyse the critical variables related to smart card technology adoption in South African public healthcare:

Implementation of healthcare information systems is one of many public healthcare technological improvements. In this study, the important factors relating to the adoption of smart card technology (SCT) in public healthcare are analysed. The study used structural equation modelling (SEM) to estimate modelling methods and the range of potential applications in the field of healthcare. This study aimed to develop a model of structural equations that summarises the critical success factors which are related to the adoption of smart card technology in South African public healthcare. The study began by presenting the reviewed literature and demonstrating which of it was based on variables taken from the determined underlying ideas. The questionnaires were distributed to healthcare professionals at Steve Biko Academic Hospital, Kalafong Tertiary Hospital, Pretoria West and Tshwane District Hospitals. According to the suggested model, critical factors included behavioural intention, system use, information quality, service quality, communication, compatibility and trialability. However, effort expectancy, social influence, facilitating conditions, user attitude and user satisfaction were not supported by the study. Confirmatory factor analysis was created using the measurements collected as the results. The outcomes supported the essential role of healthcare professionals in hospitals in order to fully implement SCT. This would afford patients the opportunity to access better healthcare services. Based on the information gathered from samples, the study made the assumption that the findings may be confirmed in a variety of fields, including those outside of healthcare. This study will contribute towards the adoption of smart card technology in the South African public healthcare context using the findings obtained from structural equation modelling.

Keywords: Adoption, public healthcare, healthcare professionals, smart card technology, hospitals

Inleiding

Die mediese en die gesondheidsorgsektor dra aansienlik by tot die verhoging van lewenstandaarde en lewensgehalte (Mardani et al., 2019). Die meerderheid pasiëntsorgdienste word tans deur gesondheidsinligtingtegnologieë (GIT's) verskaf, soos elektroniese mediese rekordstelsels (EMR-stelsels), pasiënt-gesondheidsrekordstelsels (PGR's) en tegniese toerusting. Daar is geen teorie wat verduidelik hoe GIT-sukses beïnvloed hoe pasiënte die kwaliteit van hul sorg ervaar nie, ten spyte van die deurlopende verspreiding van GIT's binne die gesondheidsorgbedryf. Beduidende vordering is gemaak om die doeltreffendheid van GIT's en die invloed daarvan op pasiëntsorguitkomst soos kwaliteit van sorg, die geluk van die pasiënt, pasiëntbemagtiging en 'n verhoogde kans op geneesmiddelnakoming te verstaan (Callen, Paoloni, Li, Stewart, Gibson, Georgiou, Braithwaite & Westbrook, 2013; Sherifali, Nerenberg, Wilson, Semeniuk, Ali MU, Redman & Adamo, 2017).

Die meeste ontwikkelde lande soos Slowenië, Hongarye, Spanje en Frankryk het gerapporteer dat positiewe gebruik van IKT in gesondheidsorgfasiliteite tot beter voorsiening van gesondheidsorg gelei het (Stanimirović, 2015). Die gebruik van gesondheidsfasiliteitdata op alle vlakke is van kardinale belang, maar dit word nie algemeen in ontwikkelende lande soos Ethiopië, Zimbabwe, Suid-Afrika, Botswana en vele ander gebruik nie (Asemahagn, 2017). As gevolg van die talle probleme wat ondervind word, neem die implementering van gesondheidsinligtingstelsels in gesondheidsorg in arm lande tyd, en die feit dat projekte onvoltooid gelaat word, is 'n probleem wat die voorsiening van openbare gesondheidsorg belemmer. Verder veroorsaak swak rekordhouding steeds onnodige vertraging vir pasiënte. Pasiënte se lêers raak van tyd tot tyd weg of word verloor, en in plaas daarvan om die pasiënt daaromtrent in te lig, laat gesondheidsorgberoepslui bloot die pasiënt wag. In die ergste situasies gaan die pasiënt se mediese geskiedenis heeltemal verlore, wat kan lei tot verdere uitdaginge, soos verkeerde diagnoses en, in uiterste gevalle, die dood (Sethia, Gupta & Saran, 2019).

Suid-Afrika het die potensiaal om die lewering van gesondheidsorgdienste te verbeter en tegelykertyd ook doeltreffendheid te bevorder en die koste van die handstelsels wat tans in gebruik is te verlaag. Die Departement van Gesondheid in Suid-Afrika benodig egter meer gevorderde navorsing om pasiënte se gesondheid te verbeter deur aan al die kwessies aandag te gee. Slimkaarttegnologie hou 'n aantal voordele in, waaronder vinnige en akkurate pasiënt-identifikasie, sowel as eenvoudige toegang tot pasiënte se mediese rekords. Daarom voorsien hierdie tegnologie akkurate kliniese inligting vinnig en doeltreffend, terwyl die veiligheid en sekuriteit van pasiëntidentiteit gemaksimeer word (Kahn, Aulakh & Bosworth, 2009). Dit maak dit ook makliker vir nasionale registers om geskep te word, wat uiteindelik tot beter gesondheidsdienslewering kan lei (Noori, Ghazisaeei, Aliabad, Mehdi pour, Mehraeen, Conte, Safdari, 2019; Niakan, Mehraeen, Noori & Gozali, 2017). Hierdie navorsing het die strukturelvergelyking-model gebruik om die kritieke veranderlikes wat verband hou met die aanvaarding van slimkaarttegnologie in Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg te ontleed.

Literatuuroorsig

'n Fisiese kaart met 'n ingeboude geïntegreerde skyfie wat as 'n sekuriteitsbewys dien, staan bekend as 'n slimkaart. Slimkaarte kan uit metaal of plastiek bestaan en is gewoonlik dieselfde grootte as 'n bestuurderslisensie of kredietkaart. Ray, Dash & Kumar (2020) sê slimkaarttegnologie is 'n ingebedde geïntegreerde stroombaan, 'n veilige mikrobeheerder of vergelykbare intelligensie en interne geheue of 'n enkele geheueskyfie met geen ander funksies nie, wat gesamentlik 'n slimkaart uitmaak. Furusa & Coleman (2018) noem dat vir eGesondheid om in Zimbabwe geïmplementeer te word, dokters hul vermoë moes demonstreer om die tegnologie te gebruik. Om hierdie rede is daar van dokters vereis om te leer hoe om eGesondheid-tegnologieë in openbare hospitale te gebruik, wat hardeware en sagteware benodig wat nie tydens behandeling vermy kan word nie. Gevolglik is dit vergelykbaar met die implementering van slimkaarttegnologie in Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg. Die aanvaarding en gebruik van SKT deur gesondheidsorgberoepslui vergemaklik onder andere die take van rekordhouding van pasiënte se inligting, wat insluit die liassering, bewaring en inligting oor die volgorde van medikasie (Sahay, Nielsen & Latifov, 2018; Malungana & Motsi, 2023). Om die gebruik van SKT onder gesondheidswerkers te vestig, het die eGesondheid-strategie een van 'n aantal belowende platforms geword (Cheng & Huang, 2013).

Tegnologie-aanvaarding kan nie van implementeringswetenskap geskei word nie; dis twee aspekte wat ten nouste verwant is. Tegnologie-aanvaarding fokus op hoe eindgebruikers tegnologie aanvaar, terwyl implementering die ingrepe en veranderlikes beskryf wat bewysgebaseerde praktyk help bevorder (Schoville & Titler, 2015).

'n eGesondheid-kaart is in Nigerië bekendgestel. Die kaart ontvang insette van 'n toepassing af en lewer 'n uitset. As gevolg van groot bevolkings in hospitale gaan gesondheidsorgberoepslui egter voort om die papiergebaseerde metode van gesondheidsorgvoorsiening te gebruik, wat baie uitdaginge vir die implementering van die slim identiteitskaart veroorsaak (Adebayo & Ofoegbu, 2014). Die slimkaart vereis veral van alle pasiënte om hulself te verifieer om 'n beter gesondheidsorgdiens te ontvang (Alam & Ali, 2016).

Op grond van die literatuuroorsig was hierdie studie daarop gemik om die kritieke veranderlikes wat verband hou met SKT-aanvaarding in Suid-Afrikaanse gesondheidsorg te analiseer deur toegang tot verskeie veranderlikes uit drie verskillende modelle/teorieë te verkry, naamlik die model vir die verenigde teorie van aanvaarding van gebruikerstegnologie in gesondheidsorg ("healthcare unified theory of acceptance of user technology model" (HUTAUT)) (2018), die DeLone en McLean ISsuksesmodel (2003), en die Diffusie van Innovasie-teorie ("Diffusion of Innovation" theory (DOI)). In hierdie studie het sewe geïdentifiseerde hipoteses wat in tabel 3 verskyn 'n direkte effek gehad op die ontleding van die kritieke veranderlikes wat verband hou met slimkaarttegnologie-aanvaarding in Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg (Malungana & Motsi, 2023).

Navorsingsmetodologie

Hierdie studie het kwantitatiewe navorsing behels. Sekondêre inligting is versamel uit verwante teorieë en konsepte van hierdie studie. Primêre inligting is egter verkry deur gebruik te maak van die geslotevraelys wat ingevul is deur die gesondheidsorgberoepslui wat die steekproef uitgemaak het. SPSS weergawe 26 en Amos-sagteware is gebruik om data in te samel. Hierdie studie het afhanklike en onafhanklike veranderlikes gebruik, asook bemiddelende veranderlikes. Daar was altesaam 12 studie faktorveranderlikes: vir die HUTAUT-teorie was daar inspanningsverwagting, prestasieverwagting, sosiale invloed, fasiliterende toestande en gedragsvoorneme, vir die D&M IS-suksesmodel was daar vier (dienskwaliteit, stelselkwaliteit, inligtingskwaliteit, gebruikersaanvaarding) en vir die DOI-teorie was daar drie (versoenbaarheid, kommunikasie en beproefbaarheid). Doelgerigte steekproefneming is vir hierdie studie toegepas om data van gesondheidsorgberoepslui in te samel. Die populasie van hierdie studie was by die Steve Biko- Akademiese Hospitaal, Tshwane-Distrikshospitaal, Kalafong- Tersiêre Hospitaal en Pretoria-Wes-Hospitaal in die Stad Tshwane- Metropolitaanse Distrik, en die steekproewe is daar geneem.

Evaluerings van navorsingsinstrumente

Die geldigheid van die vraelys is onder 460 gesondheidsorgberoepslui ondersoek. In hierdie studie was die vraelys beperk tot response van gesondheidsorgberoepslui, terwyl 50

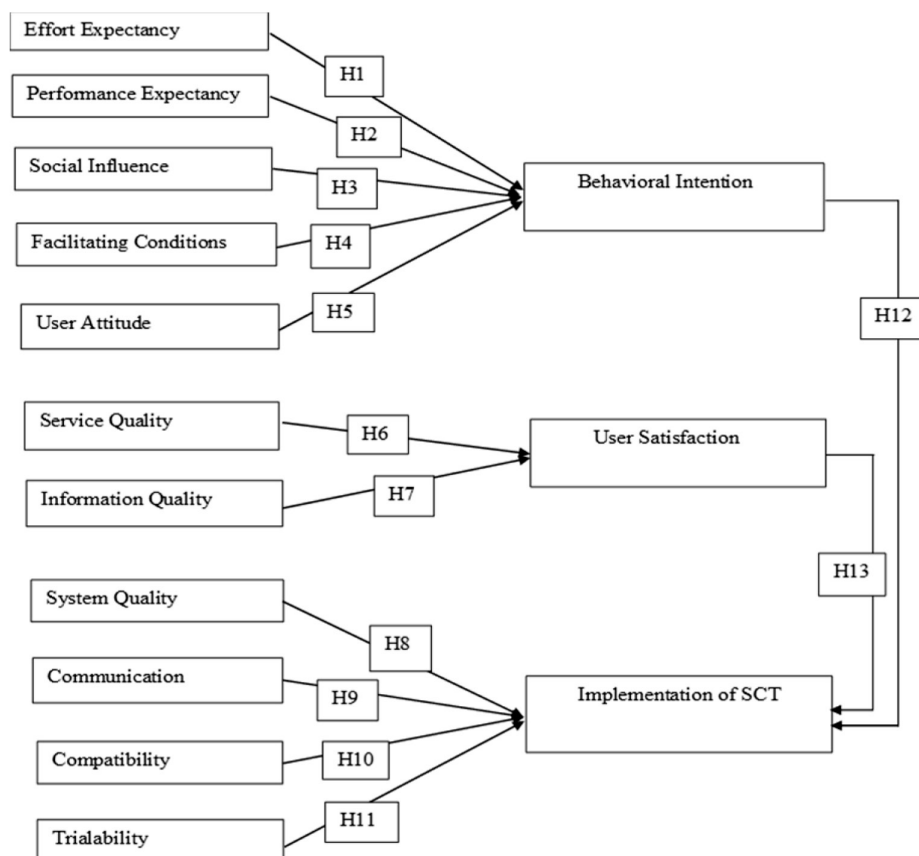
van die 460 gesondheidsorgberoepslui uit die loodsstudie verkry is om die geldigheid van die vraelys te bepaal. Volgens Ahmad, Ibrahim en Bakar (2018) is 'n aanvaarbare betroubaarheidskoëffisiënt bo 0,700. Die Cronbach-alfawaarde was meer as 0,7 ná betroubaarheids- en geldigheidstoetsing, wat daarop gedui het dat al die data wat verkry en ontleed is, betroubaar was.

Data-analise

In hierdie studie is die data-analises in drie verdeel: (1) analises gebaseer op inligting van die verteenwoordigende steekproewe uit die verspreidingsfrekwensie en -persentasie; (2) analises gebaseer op inligting van die 12 onafhanklike veranderlikes; en (3) analises gebaseer op drie moderatorveranderlikes vir die aanvaarding van SKT in openbare gesondheid. Bevestigende faktoranalise (BFA) is in die studie gebruik om die hipoteses te toets en te ondersoek hoe goed die model by die data pas. Gevolglik is die strukturelvergelyking-model (SVM), wat roete-analise gegenereer het vir die toets van die model en hipoteses, gebruik om die hipotesemodel te toets.

Resultate

Altesaam 486 vraelyste is versprei, en 406 is terugontvang en vir die studie ontleed. Daarom is die totale resultate van die analise gebaseer op getoetste hipoteses, wat in tabel 3 van die studie weergegee word.



Figuur 1: Raamwerk van die kritieke veranderlikes in slimkaarttegnologie

Data-analise

In hierdie studie is 406 datastelle van gesondheidsorgberoepslui vir data-analise ingesamel. Hierdie steekproewe het manlike en vroulike werkgroepe van die geïdentifiseerde hospitale ingesluit, en hulle het hul opvoedkundige vlak, die saal waarin hulle werk, en hul ervaring en kennis van slimkaarttegnologie-aanvaarding by openbare hospitale aangedui.

Tabel 1: Data-analise vir die studie

Beskrywing	Persentasie
Geslag:	
Manlik	37%
Vroulik	63%
Ouderdom:	
Onder 25	3%
25–30	33%
31–40	53%
41–50	8%
50 plus	3%
Afdeling:	
Noodgevalle	20,2%
Verloskunde	31,5%
Pediatrics	10,6%
Neonataal	4,9%
Chirurgies	32,5%
Ander	0,2%
Hoogste kwalifikasie:	
Graad 12 of laer	4,7%
Diploma	32,5%
Graad	52,5%
Nagraads	9,4%
Ander	1,0%
Werksondervinding	4,7%

Hipotesetoetsing

In hierdie studie word die BFA en analise in figuur 2 getoon. Hierdie resultate het 'n goeie passingsmodel met empiriese data binne die verwagte vlak van die studie getoon. Samevattend bevestig die model se doeltreffendheid wat betref die krities noodsaaklike aanvaarding van SKT in Suid-Afrikaanse openbare gesondheid die hipoteses. Gevolglik is die model gebruik om die toegepaste SVM-meting te doen ten einde die toekomstige invloed daarvan op die aanvaarding te ontleed.

Bevestigende faktoranalise is in AMOS 23.0 met gebruik van die maksimumaanneemlikheidsberaming uitgevoer. Dit is gedoen om die komponente of veranderlikes te bevestig waarby daar ná die verkennende faktoranalise uitgekome is. Volgens Arbuckle (2014) is faktorladings met kritieke verhoudings (KV) bo 1,96 beduidend op die 0,5-vlak en toon 'n redelike passing by die data. Die BFA het aangedui dat die kritieke verhoudings betekenisvol is omdat dit almal bo 1,96 was. Resultate van die BFA gee die faktorladings en hul ooreenstemmende verhoudings weer. Nadat die verwydering gedoen is, is die finale BFA-model toegepas. Die model het aanvaarbare indekse getoon: $\chi^2 = 4,490$, $df = 3$; $\chi^2/df = 1,63$; $P = 0,122$; $GFI = 0,955$; $AGFI = 0,905$; $CFI = 0,976$; $RMSEA = 0,43$; $PCLOSE =$

0,316. Die finale BFA-model het 47 items en 13 veranderlikes gebied. Dit demonstreer die deeglikheid van die iteratiewe proses. Dit is belangrik om daarop te let dat die Inspanningsverwagtingveranderlike met twee items gelaat is; vanweë die teoretiese betekenis daarvan en die inhoudsgeldigheid van die twee items is daar egter besluit om dié veranderlike te behou.

Ná die ontwikkeling van die strukturele model is die verwantskappe ondersoek wat daar tussen konstruksie bestaan het. Die opsommende uittreksel uit die AMOS-uitset vir die gestandaardiseerde betekenisvolheidsvlakke wat verkry is nadat die strukturele model toegepas is, word in tabel 2 weergegee. Hierdie vlakke beeld die gehipteseerde verwantskappe uit tussen die latente veranderlikes wat die onderliggende oorsaaklike struktuur van SKT-implementering uitmaak. Wahab, Kadir & Tomari (2014) het aanbeveel dat 'n drempel van 1,96 vir die waardes van die kritieke verhouding (KV) verkry word om die betekenisvolheid van die gehipteseerde verwantskap te bepaal. Dit beteken dat vir 'n hipotese om betekenisvol te wees of ondersteun te word, die konstruksie daarvan 'n kritiekeverhoudingswaarde groter as 1,96 moes hê, anders is die hipotese verwerp. Die resultate van die hipotesetoets word in tabel 3 van die Strukturelvergelyking-model getoon.

Bespreking

Die studie verskaf unieke bevindinge in 'n wye verskeidenheid velde. Aanvanklik is die belangrikheid van die tradisionele aanvaardingsfaktore ondersoek, en die deurslaggewende belang van verskeie van hierdie aspekte het na vore gekom. Die gebruik van slimkaarttegnologie in Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg word deur die strukturelvergelyking-modelering van die navorsingsveranderlikes beïnvloed (Malungana & Motsi, 2022). Daarbenewens word strukturelvergelyking-modellering as 'n meer betekenisvolle tweedegenerasie- meer veranderlike statistiese tegniek (faktoranalise en regressie) beskou. Indien die data abnormaal is, word SVM tipies gebruik. SVM is meer prakties as konvensionele meer veranderlike statistiese metodes (Zahid & Din, 2019). Om dit te kon uitvoer, is die SVM-analise uitgevoer deur gebruik te maak van wyd gevestigde kenmerke soos gedragsvoorneme, stelselgebruik, inligtingskwaliteit, dienskwaliteit, kommunikasie, versoenbaarheid en beproefbaarheid.

Latente veranderlike

Die hoofdoelwit van hierdie studie was om die kritieke veranderlikes wat verband hou met die aanvaarding van slimkaarttegnologie in Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg te ontleed deur gebruik te maak van die strukturelvergelyking-model. Die toets van Sallehudin, Bakar, Ismail, Razak, Baker en Md Fadzi (2020) het 'n begrip gebring van die sterkte van die verband tussen afhanklike en onafhanklike veranderlikes en het elk van die hipoteses hetsy bevestig of nie bevestig nie. Hierbenewens is hipoteses gebruik om die strukturele model te beraam wat daarop gemik is om hierdie studie se navorsingshipotese te toets (Kruszyńska-Fischbach et al., 2022). Die studie het die kwantitatiewe benadering gevolg,

gebaseer op statistiese en wiskundige tegnieke wat feite en oorsaaklike verwantskappe identifiseer. Verskeie datapatrone is by die insameling van data in ag geneem. Dit het ook die skep van hipoteses en die generering van teorieë behels wat deur studies bevestig kon word. Hierdie bevestigingsbenadering het begin met 'n hipotese aangaande die voorkoms van 'n spesifieke verskynsel en het dan 'n voorspellingsmodel gebou wat op die teorie gebaseer is.

In hierdie studie het die navorser empiriese navorsing en ondersoek uitgevoer om die argument op die proef te stel en te bepaal of die bewyse dit ondersteun het, om sodoende die oorsaaklike teorie te bepaal. Volgens Addai en Arthur (2020) het baie skrywers en navorsers bewys dat prestasieverwagting die sleuteloortuigingsfaktor is wat die besluit om nuwe tegnologie te gebruik of te aanvaar positief beïnvloed het. Hierdie studie het egter uitgelig dat prestasieverwagtingsvlak nie as die kritieke veranderlike vir SKT-aanvaarding in Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg beskou kan word nie. Daar is bevind dat prestasieverwagting 'n hoë positiewe skeefheidswaarde van 0,308 het, wat beteken dat die meeste respondente nie saamgestem het nie of glad nie saamgestem het nie met die vrae wat verband hou met die rol daarvan in die aanvaarding van SKT in openbare gesondheidsorg.

Ter wille van betroubaarheid is die prestasieverwagtingskaal verwyder omdat gevind is dat geeneen van die items goed by enige ander items inpas nie. Lae korrelasies (almal onder 0,100) het getoon dat die skaal nie intern konsekwent was nie. Dit is dus gepas geag om die skaal in hierdie stadium van die analise te verwyder. Die prestasieverwagtinghipotese (H2) is laat vaar weens die lae betroubaarheid daarvan (sien Tabel 2). Vyf van die studie se hipoteses is nie ondersteun nie, naamlik inspanningsverwagting (H1), sosiale invloed (H3), fasiliterende toestande (H4), gebruikershouding (H6) en gebruikerstevredenheid (H7). As dryfkragte van die navorsing oor die aanvaarding van SKT in gesondheidsorg was negatiewe skeefheid die hoogste vir inspanningsverwagting (-0,54), gevolg deur gebruikershouding, sosiale invloed, inligtingskwaliteit, gedragsvoorneme en SKT-implementering (-0,477, -0,282, -0,250, -0,222 en 0,213 onderskeidelik). Die mins negatiewe skeefheidwaardes was -0,015 en -0,056 onderskeidelik vir stelselkwaliteit en beproefbaarheid. Samevattend het respondente *saamgestem* of *heeltemal*

saamgestem dat die faktore wat in hierdie studie ondersoek is, 'n rol gespeel het in die implementering van SKT in gesondheidsorginstellings.

'n Strukturelvergelyking-model om die kritieke veranderlikes wat verband hou met die aanvaarding van slimkaarttegnologie in Suid-Afrikaanse openbare gesondheidsorg te ontleed (Figuur 2 en Tabel 3) is vervolgens ontwikkel deur al die aanvaarde hipoteses te kombineer: gedragsvoorneme (H5), stelselgebruik (H8), inligtingskwaliteit (H9), dienskwaliteit (H10), kommunikasie (H11), versoenbaarheid (H12) en beproefbaarheid (H13).

Hipotese H5, wat daarop gedui het dat gedragsvoorneme 'n beduidende impak op SKT-implementering gehad het, is ondersteun ($\beta = -0,209$, $p < 0,001$, $R^2 = 0,75$). Verder, wat bykomend impliseer dat die twee veranderlikes 'n omgekeerde verwantskap gehad het, is hipotese H6 en H7 (gebruikershouding en gebruikerstevredenheidseffek op implementering van SKT) nie ondersteun nie ($\beta = 0,480$, $p = 0,741$, $R^2 = 0,75$ en $\beta = -0,317$, $p = 0,937$, $R^2 = 0,75$ onderskeidelik). Hipotese H8 tot H13 is almal ondersteun. Daar is gevind dat die veranderlikes van stelselgebruik ($\beta = 0,209$, $p < 0,001$, $R^2 = 0,75$), inligtingskwaliteit ($\beta = 0,557$, $p < 0,001$, $R^2 = 0,75$), dienskwaliteit ($\beta = 0,562$, $p < 0,001$, $R^2 = 0,75$), kommunikasie ($\beta = 0,211$, $p < 0,001$, $R^2 = 0,75$), versoenbaarheid ($\beta = 0,419$, $p < 0,001$, $R^2 = 0,75$) en beproefbaarheid ($\beta = -0,020$, $p < 0,001$, $R^2 = 0,75$) 'n beduidende impak op die implementering van SKT gehad het.

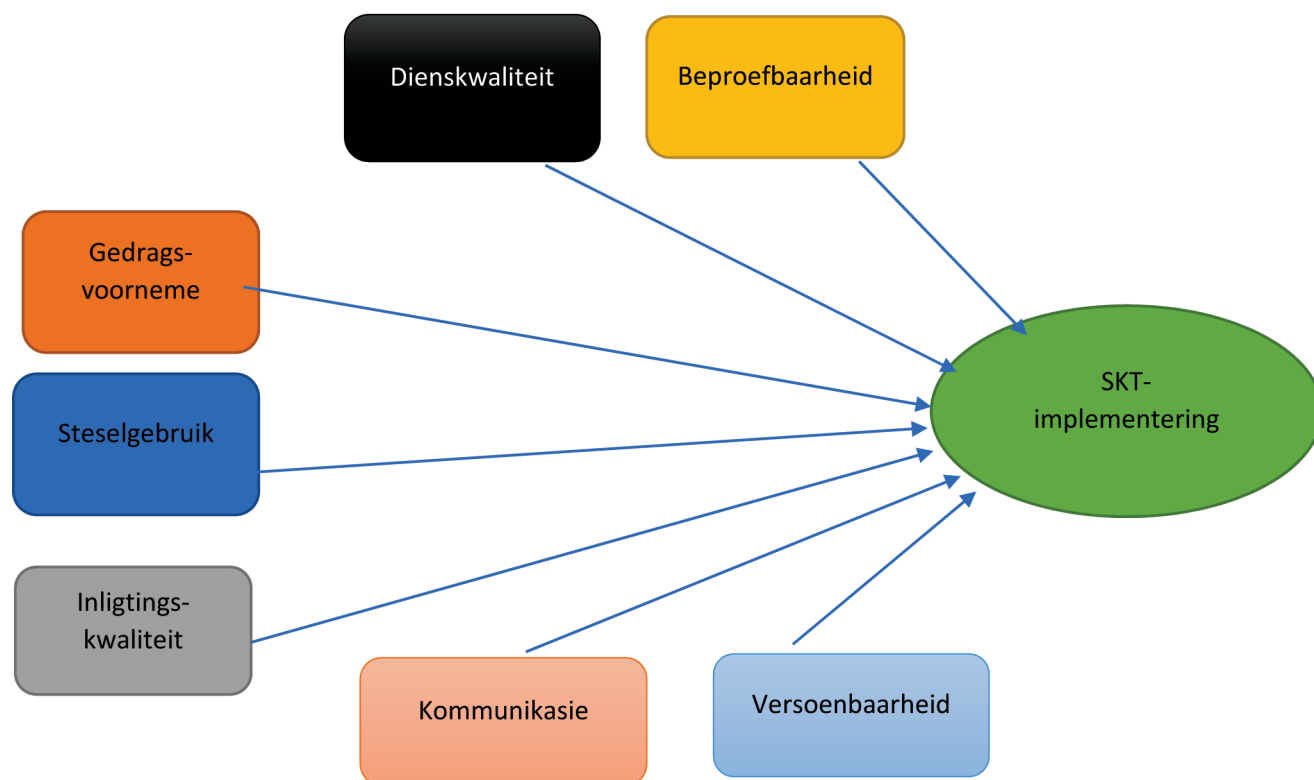
Volgens die bevindinge van hierdie studie beïnvloed beproefbaarheid die implementering van SKT negatief. Daarbenewens is faktore wat die implementering van SKT in openbare gesondheidsorg beïnvloed, deeglik ondersoek; daarom het die gebruik van strukturelvergelyking-modellering (SVM) vir studie-analise ekstra belangstelling gelok. Verder het die navorsingsmodel die toepassing van SVM oorweeg om robuustheid aan die statistiese tegniek te verleen. Hierdie studie het verder ook ander gebiede verken waar SVM toegepas is. Daar is bevind dat SVM nie slegs meer beperk is tot die hantering van komplekse navorsingsuitdagings in tradisionele navorsingsonderwerpe nie; dit kan ook 'n nuttige hulpmiddel wees vir konstruksie-akademici en tegnici om die aanvaarding, gebruik en sukses van nuutontwikkelde tegnologieë te evalueer (Xiong, Skitmore & Xia, 2015).

Tabel 2: Prestasieverwagting

	Skaalgemiddelde indien item gekrap	Skaalafwyking indien item gekrap	Gekorrigeerde Item – Totale Korrelasie	Cronbach-alfa indien item gekrap
PV2	125542	1 295	0,079	-0,249a
PV3	12 8350	1 936	-0,279	0,389
PV4	12 6034	1 302	0,090	-0,265a
PV5	12 8596	1 326	0,093	-0,262a

Huidige betroubaarheid (α) = -0,061

Besluit: om die veranderlike heeltemal te verwyder



Figuur 2: Finale SKT-implementeringsraamwerk

Tabel 3: Hipotesetoetsing

Hipotese	Roete	Gestandaardiseerde Beraming	SV	KV	P	Besluit
H1	IM ← IV	-0,575	0,025	0,174	0,862	Ongesteun
H2	IM ← PV	<i>Hipotese het gedaal as gevolg van lae betroubaarheid</i>				Ongesteun
H3	IM ← SI	-0,054	0,032	0,148	0,882	Ongesteun
H4	IM ← FT	-0,208	0,023	0,203	0,840	Ongesteun
H5	IM ← GV	-0,209	0,063	-5 287	***	Ondersteun
H6	IM ← GH	0,480	0,019	0,331	0,741	Ongesteun
H7	IM ← DK	-0,317	0,028	0,078	0,937	Ongesteun
H8	IM ← SU	0,209	0,029	5 363	***	Ondersteun
H9	IM ← IK	0,557	0,047	8 883	***	Ondersteun
H10	IM ← SK	0,562	0,032	6 436	***	Ondersteun
H11	IM ← K	0,211	0,046	7 538	***	Ondersteun
H12	IM ← V	0,419	0,081	6 021	***	Ondersteun
H13	IM ← B	-0,020	0,090	7 437	***	Ondersteun

*** = $p < 0,001$

36 response is verwyder omdat dit onbetrokke response was. Om vir onbetrokke response te kontroleer, is die standaardafwyking van die response volgens die rye nagegaan. Alle rye waarvan die standaardafwykings onder 0,5 was, is verwyder (Belayneh et al., 2017). Die normaliteit van die data is gekontroleer met behulp van skeefheids- en kurtosemetodes soos voorgestel deur Anwar, Noorman Masrek en Johari Abdullah Sani (2017). Die veranderlikes se normaliteit was aanvaarbaar indien die skeefheid en kurtose tussen -2 en +2 geval het. Items wat die beginsels van aanname van normaliteit verbreek het, is verwyder (IV1, IV3, PVE1, PV6, SI2, SI6, FT5, GV5, SK1, V5, B2 en IM3).

Die mate waarin herhaalde metings onder dieselfde toestande by benadering ooreenkom, word skaalbetroubaarheid genoem. Dit word gebruik om skaalkonsekwentheid en -stabiliteit te evalueer, en dit kan met verloop van tyd asook by respondente verander. Eksterne en interne betroubaarheid word albei by die term betroubaarheid ingesluit. Eersgenoemde verwys na die konsekwentheid van die samestellende dele van die skaal se items, terwyl laasgenoemde betrekking het op interbeoordelaarsbetroubaarheid. In daardie stadium is die interne konsekwentheid van die skaalitems toe geëvalueer. Daar is gevind dat die aanvaarbare betroubaarheidskoëffisiënt bo 0,700 is. In hierdie afdeling is die betroubaarheid van al die skale

aangebied om chronologies die rede vir die verwydering van sommige skale en selfs van 'n veranderlike te demonstreer. In hierdie afdeling is die Item-Totaal-statistiektafel aangebied, met inbegrip van die heersende en finale betroubaarheidskoëffisiënt nadat sommige items verwyder is.

Faktoranalise is gebruik vir die bepaling van die aard van die latente konstruksie wat die veranderlikes van belang ondersteun (Bandalos & Finney, 2019). Volgens (Mukherjee, Sinha & Chattopadhyay (2018) poog faktoranalise om onderliggende veranderlikes, of faktore, te identifiseer wat die patroon van korrelasies binne 'n stel waargenome veranderlikes of konstruksies verklaar. Een algemene doelwit van faktoranalise is om 'n klein getal faktore te produseer wat gebruik kan word om 'n veel groter getal veranderlikes te vervang (Amaral et al., 2013). Faktoranalise is 'n dataverminderingstegniek wat poog om slegs 'n klein getal veranderlikes te identifiseer (Chattopadhyay, 2018). Dit beteken dat aan die einde van faktoranalise die navorser met veranderlikes gelaat word wat die meeste van die variansie verklaar, terwyl dié wat die minste variansie verklaar, verwerp word.

Die studie het faktore onttrek deur die hoofkomponentanalise-metode (HKA-metode) te gebruik met die doel om die volgorde van ortogonale faktore te vind wat die rigtings van die grootste variansie verteenwoordig (Ejaz, Islam & Sarker, 2019). Daarbenewens is HKA gebruik omdat dit ongekorreleerde lineêre kombinasies van die waargenome veranderlikes kan vorm. Dit word ook gebruik om die aanvanklike faktoroplossing te verkry en kan gebruik word wanneer 'n korrelasiematriks enkelvoudig is. As 'n faktorrotasiemethode is 'n direkte Oblimin-metode gebruik omdat die literatuur gedui het op 'n paar teoretiese gronde wat geïmpliceer het dat die faktore in hierdie studie tydens teorie-ontwikkeling verwant was of gekorreleer het. Die navorsers in hierdie studie het gekies om die koëffisiënte in orde van grootte te vertoon en om koëffisiënte met absolute waardes van minder as 0,4 te onderdruk (Nicol et al., 2021). Die volgende uitsette is onttrek en verduidelik: korrelasiematriks, Kaiser-Meyer-Olkin en Bartlett se toets.

Verkennde faktoranalise (VFA) is uitgevoer deur maksimum waarskynlikheid met Promax-rotasie te gebruik om te bepaal of die items goed ten opsigte van die veranderlikes gelaai en voldoende gekorreleer het. Maksimumaanneemlikheidsberaming is gekies om die unieke variansie tussen items en die korrelasie tussen faktore te bepaal. Pallant (2020) beklemtoon dat 'n maksimumaanneemlikheidsberaming ook 'n pasgehaltetoets vir die faktoroplossing bied. Promax is gekies as gevolg van die Bartlett-sferisiteitstoets en die Kaiser-Meyer-Olkin-steekproefnemings-toereikendheidsmaatstaf (KMO) is geëvalueer. Die resultate het 'n KMO van 0,949 getoon en die Bartlett-toets was betekenisvol op $\alpha=0,000$, met 'n chikwadraat van 20 225,791, wat die geskiktheid van die uitvoering van verkennde faktoranalise aangedui het (Samuels, 2016). Items wat nie hoë beladings getoon het nie, is verwyder (IV4, IK6, SK4 en SK5).

Gevolgtrekking en Aanbeveling

Hierdie studie het tot die gevolgtrekking gekom dat slimkaarttegnologie 'n direkte impak op aanvaarding in openbare gesondheidsorg het. Die strukturelvergelyking-model het aan die lig gebring dat sewe veranderlikes van SKT die aanvaarding direk beïnvloed. Daar is egter gevind dat prestasieverwagting geen direkte effek op die aanvaarding van SKT het nie. Gebaseer op die resultate van hierdie studie, moet daar by die aanvaarding van SKT sewe faktore as kritieke faktore in ag geneem word, naamlik gedragsvoorneme, stelselgebruik, inligtingskwaliteit, dienskwaliteit, kommunikasie, versoenbaarheid en beproefbaarheid. Hierdie studie het op kwantitatiewe navorsing gefokus, en dit beveel aan dat veranderingsbestuursaktiwiteite wat op opleiding fokus, gebruik kan word om meer diepgaande inligting vir gesondheidsorgberoepslui te bekom. Gevolglik moet opleidingsfaktore vir toekomstige studies oorweeg word.

Datums

Ontvang: 03/10/2022
Aanvaar: 30/03/2023
Gepubliseer: 01/06/2023

Bronnelys

- Addai, E.B. & Arthur, B., 2020, Ghana's road to cashless economy: the e-zwich experience o caminho de gana para uma economia sem dinheiro: a experiência e-zwich Ghana's road to cashless economy: the E-Zwich experience, *RISUS – Journal on Innovation and Sustainability*, 11(1), 52-67. <https://doi.org/10.23925/2179-3565.2020v11i1p52-67>.
- Adebayo, J. K. & O. Ofoegbu, E., 2014, Issues on E-health adoption in Nigeria, *International Journal of Modern Education and Computer Science* 6(9), 36-46. <https://doi.org/10.5815/ijmecs.2014.09.06>.
- Ahmad, U., Ibrahim, Y., Bakar, A.A., 2018, Risk management in the Malaysian public private partnership projects, *Jurnal Pengurusan* 54, 101-114. <https://doi.org/10.17576/pengurusan-2018-54-09>.
- Alam, M.T. & Ali, M.L., 2016, A model of a secured smart e-health system. Proceedings of the International Conference on Industrial Engineering and Operations Management. 8-10 March: 2174-2181.
- Amaral, G., Bushee, J., Cordani, U.G., et al., 2013, The philosophy of quantitative methods, *Cambridge University Press*. <https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004>.
- Anwar, N., Noorman Masrek, M., Johari Abdullah Sani, M.K., et al., 2017, A systematic review on the strategic utilization of information systems and IT infrastructure flexibility, *Communications of the IBIMA* 2017, 1-13. <https://doi.org/10.5171/2017.518818>.
- Arbuckle, J.L., 2014, Amos 23.0 Users Guide, *IBM Corporation* 1-702.
- Asemahagn, M.A., 2017, Determinants of routine health information utilization at primary healthcare facilities in Western Amhara, Ethiopia, *Cogent Medicine* 4(1), 1-11. <https://doi.org/10.1080/2331205X.2017.1387971>.
- Awiagah, R., Kang, J., Lim, J.L., 2016, Factors affecting e-commerce adoption among SMEs in Ghana, *Information Development* 32(4), 815-836. <https://doi.org/10.1177/0266666915571427>.
- Baird, A. & Raghu, T.S., 2013, Associating consumer perceived value with business models for digital services, *Eur J Inf Syst* 24(1), 4-22.
- Bandalos, D.L. & Finney, S.J. 2019. Factor Analysis: Exploratory and Confirmatory. In *Quantitative Methods in the Social Sciences*. Second Ed ed. Routledge. 98-122. <https://doi.org/10.4324/9781315755649-8>.
- Belayneh, M., Woldie, M., Berhanu, N., et al., 2017, The determinants of patient waiting time in the general outpatient department of Debre Markos and Felege Hiwot hospitals in Amhara regional state, North West Ethiopia, *Global Journal of Medicine and Public Health* 6(5), 1-17.
- Callen, J., Paoloni, R., Li, J., Stewart, M., et al., 2013, Perceptions of the effect of information and communication technology on the quality of care delivered in emergency departments: a cross-site qualitative study, *Ann Emerg Med* 61(2), 131-44.

- Cheng, H.H. & Huang, S.W., 2013, Exploring antecedents and consequence of online group-buying intention: An extended perspective on theory of planned behavior, *International Journal of Information Management* 33(1), 185-198. <https://doi.org/10.1016/j.ijinfomgt.2012.09.003>.
- Ejaz, S., Islam, R., Sarker, A., 2019, Implementation of principal component analysis on masked and non-masked face recognition, *2019 1st International Conference on Advances in Science, Engineering and Robotics Technology (ICASERT)*. <https://doi.org/10.1109/ICASERT.2019.8934543>.
- Furusa, S.S. & Coleman, A., 2018, Factors influencing e-health implementation by medical doctors in public hospitals in Zimbabwe, *SA Journal of Information Management* 20(1), 1-9. <https://doi.org/10.4102/sajim.v20i1.928>.
- Kahn, J.S., Aulakh, V., Bosworth, A., 2009, What it takes: Characteristics of the ideal personal health record, *Health Aff* 28, 369-376. <https://doi.org/10.1377/hlthaff>.
- Kruszyńska-Fischbach, A., Sysko-Romańczuk, S., Napiórkowski, T.M., et al., 2022, Organizational e-health readiness: How to prepare the primary healthcare providers' services for digital transformation, *International Journal of Environmental Research and Public Health* 19(7), 3973. <https://doi.org/10.3390/ijerph19073973>.
- Malungana, L. & Motsi, L., 2022, Adoption for the implementation of smart card technology in public healthcare, *The Journal for Transdisciplinary Research in Southern Africa* 18(1), 1-11. <https://doi.org/10.4102/td.v18i1.1261>.
- Malungana, L. & Motsi, L., 2023, Critical success factors of smart card technology in South African public hospitals research model, *South African Journal of Information Management* 25(1). <https://doi.org/10.4102/sajim.v25i1.1613>.
- Mardani, A., Hooker, R.E., Ozkul, S., et al., 2019, Application of decision making and fuzzy sets theory to evaluate the healthcare and medical problems: A review of three decades of research with recent developments, *Expert Systems with Applications* 137, 202-231. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2019.07.002>.
- Mukherjee, S.P., Sinha, B.K., Chattopadhyay, A.K., 2018, Statistical methods in social science research, *Springer Singapore*. <https://doi.org/10.1007/978-981-13-2146-7>.
- Niakan, S., Mehraeen E., Noori, T., et al., 2017, Web and mobile based HIV prevention and intervention programs pros and cons - A review, *Stud Health Technol Inf*, 319-327.
- Nicol, E., Hanmer, L.A., Mukumbang, F.C., et al., 2021, Is the routine health information system ready to support the planned national health insurance scheme in South Africa? *Health Policy and Planning* 36(5), 639-650. <https://doi.org/10.1093/heapol/czab008>.
- Noori, T., Ghazisaedi, M., Aliabad G.M., et al., 2019, International comparison of Thalassemia registries: Challenges and opportunities, *Acta Inform Med* 27, 58-63. <https://doi.org/10.5455/aim>.
- Pallant, J., 2020, SPSS survival manual: A step by step guide to data analysis using IBM SPSS. Routledge, Taylor and Francis Group. <https://doi.org/10.4324/9781003117452>.
- Ray, P.P., Dash, D., Kumar, N., 2020, Sensors for internet of medical things: State-of-the-art, security and privacy issues, challenges and future directions, *Computer Communications* 160, 111-131. <https://doi.org/10.1016/j.comcom.2020.05.029>.
- Sahay, S., Nielsen, P., Latifov, M., 2018, Grand challenges of public health: How can health information systems support facing them? *Health Policy and Technology* 7(1), 81-87. <https://doi.org/10.1016/j.hlpt.2018.01.009>.
- Sallehudin, H., Bakar, N.A.A., Ismail, M., et al., 2020, The utilization of military lifetime health record, *2019 International Conference on Electrical Engineering and Informatics (ICEEI)* 506-513. <https://doi.org/10.1109/ICEEI47359.2019.8988792>.
- Samuels, P., 2016, Advice on exploratory factor analysis, *Centre for Academic Success, Birmingham City University* 2. <https://doi.org/10.13140/RG.2.1.5013.9766>.
- Schoville, R.R. & Titler, M.G., 2015, Guiding healthcare technology implementation: A new integrated technology implementation model, *CIN - Computers Informatics Nursing* 33(3), 99-107. <https://doi.org/10.1097/CIN.0000000000000130>.
- Sethia, D., Gupta, D., Saran, H., 2019, Smart health smart health record management with secure NFC-enabled mobile devices, *Smart Health* 13, 100063. <https://doi.org/10.1016/j.smhl.2018.11.001>.
- Sherifali, D., Nerenberg, K.A., Wilson, S., et al., 2017, The effectiveness of eHealth technologies on weight management in pregnant and postpartum women: systematic review and meta-analysis, *J Med Internet Res* 19(10), e337. <https://doi.org/10.2196/jmir.8006>.
- Stanimirović, D., 2015, Modelling the health information system in Slovenia - Operative, construction and implementation aspects, *International Journal of Engineering Business Management*. <https://doi.org/10.5772/60992>.
- Wahab, M.H.A., Kadir, A.A., Tomari, M.R., et al., 2014, Smart recycle bin: A conceptual approach of smart waste management with integrated web based system, *2014 International Conference on IT Convergence and Security, ICITCS 2014* 14-17. <https://doi.org/10.1109/ICITCS.2014.7021812>.
- Xiong, B., Skitmore, M., Xia, B., 2015, A critical review of structural equation modeling applications in construction research, *Automation in Construction* 49(Part A), 59-70. <https://doi.org/10.1016/j.autcon.2014.09.006>.
- Zahid, H. & Din, B.H., 2019, Determinants of intention to adopt E-government services in Pakistan: An imperative for, *Resources* 8, 128. <https://doi.org/10.3390/resources8030128>.

Gesondheidsevaluasie van stedelike eike (*Quercus robur* L.) met behulp van fisiologiese parameters: 'n Suid-Afrikaanse gevallestudie

Soané Ludick,¹ Jacques M Berner,¹ Roelof D Coertze,² Sarel S Cilliers¹

¹Eenheid vir Omgewingswetenskappe en -bestuur, Noordwes-Universiteit, Suid-Afrika

²Department of Infectious Diseases, Institute of Biomedicine, Sahlgrenska Academy, University of Gothenburg, Sweden

Korresponderende outeur: Soané Ludick **E-pos:** soaneludick@gmail.com

Bome in 'n stedelike omgewing, soos die eksotiese eikebome (*Quercus robur* L.) in Potchefstroom (Noordwesprovinsie, Suid-Afrika), verskaf verskeie ekosisteedienste op straat- en stadsvlak. Aangesien bome baie gunstig is vir stedelike inwoning, is dit noodsaaklik om hul gesondheid te bestudeer en hierdie bome so lank moontlik te bewaar. *Quercus robur*-bome in die historiese Eikelaan in Potchefstroom toon sedert 1980 visuele gesondheidsagteruitgang, waarvoor die oorsaak steeds grootliks 'n vraagstuk is. Die doelwit van hierdie studie was om die vitaliteit van verteenwoordigende bome in die laning wat deur verskillende tipes grondbedekking omring word, vas te stel deur visuele boomtoestand, blaarwaterpotensiaal, voedingstofanalise, en chlorofil *a*-fluoresensie te meet. Die data wat ingesamel is, het aangedui dat die parameters en aanwysers waarmee boomvitaliteit vasgestel is, van waarde was by die vasstelling van plantgesondheid; hierdie data verklaar egter nie op sigself die bome se verlies van gesondheid nie. Hoewel bome met ondeurdringbare oppervlakke as onderliggende grondbedekking, dus 'verseelde grond', laer waterpotensiale getoon het, dui dit nogtans nie op 'n watertekort nie. Ander faktore moet as die oorsaak van vitaliteitsverlies in hierdie straatbome oorweeg word. Eikebome in die laning in Potchefstroom moet fyn gemonitor word om suksesvolle bewaring deur wetenskaplikes, stadsinwoners en munisipale owerhede te verseker.

Sleuteltermes: Potchefstroom, eikebome, waterstres, fotosintese, chlorofil *a*-fluoresensie, F_w/F_m , prestasie-indeks, PI_{TOTAAL} , stedelike ekologie, visuele taksering, voedingstofanalise

Evaluating the health of urban oak (*Quercus robur* L.) trees using physiological parameters: a South-African case study:

Trees in an urban setting, such as the exotic Oak (*Quercus robur* L.) trees in Potchefstroom (North West Province, South Africa), provide several ecosystem services on tree, street and city level. Since urban trees are very favourable to urban life, it is pivotal to study their health and conserve these trees as long as possible. *Quercus robur* trees in the historic Oak Avenue in this city have been showing a visual decrease in vitality since 1980, the cause of which is still largely unknown. This study aimed to determine the vitality of a section of the trees in the avenue with different types of surrounding soil cover by determining visual tree conditions and measuring leaf water potential, nutrient analysis and chlorophyll *a* fluorescence. Data obtained indicated that the parameters and indicators used to determine tree vitality were of value in determining plant health; however, this data alone does not account for the decline in the health of the trees. Though trees with impenetrable surfaces as soil cover under the trees, i.e. "sealed soil", showed lower water potentials, this nevertheless is not indicative of a water deficit. Other factors should be considered as the cause of the decline in the vitality of these street trees. Oak trees in the avenue in Potchefstroom should be monitored carefully in future to ensure successful conservation by scientists, residents of the city and the municipal authorities.

Keywords: Potchefstroom, oak trees, water stress, photosynthesis, chlorophyll *a* fluorescence, F_w/F_m , performance index, PI_{TOTAAL} , urban ecology, visual assessment, nutrient analysis

Inleiding

Stadsbome lewer regulerende ekosisteedienste, soos die regulering van plaaslike klimaat en lugkwaliteit, koolstofisolering en -opgaring (Nowak, 1993; Nowak & Crane, 2002); en vervul ook 'n kulturele funksie kultuur, naamlik deur 'n bydrae tot die estetika van 'n stad te lewer deur vir talle stedelinge as die primêre kontak met die natuur te dien (Jim, 2005). 'n Ondersoek van bome se reaksie op stedelike toestande is daarom nodig vir 'n grondiger begrip van hul reaksie op onmiddellike omgewingstimuli, asook hul langdurige aanpassing by sekere toestande, soos versnelde klimaatsverandering (Burley *et al.*, 2019; Calfapietra *et al.*, 2015). Die onderwerp van die huidige studie is eikebome (*Q. robur*) wat in 1910 in Potchefstroom geplant is om 'n laning van 6,8 km te vorm, en wat sedertdien tot nasionale gedenkwaardigheid verklaar is (Anon., 2017). Stedelike bome word ook saam met grys- en stormwater-infrastruktuur aanbeveel om die afloop van stormwater in stede te beheer deur oortollige water uit die grond te onttrek, infiltrering te verbeter en neerslag met hul krone op te vang (Berland *et al.*, 2017).

Q. robur-bome in Potchefstroom is voorheen bestudeer, maar aan die hand van slegs 12 bome, met bome gegroepeer op grond van terugsterwingspersentasie en getal *Asterolecanium quercicola*-insekte wat op die bome teer. Die presiese ligging van hierdie bome is boonop nie bekend nie (Van Rensburg, *et al.*, 1997a; Van Rensburg, *et al.*, 1997b). Klem is gelê op seisoenale reaksies van bome soos bepaal deur blaarwaterpotensiaal, netto fotosintese en stomatale geleiding; gevolgtrekkings het aangedui dat 'n watertekort die hooforsaak is van die terugsterwing van hierdie bome. Sedert 1997 is geen navorsing gepubliseer oor die vitaliteit van die bome nie, en die invloed van die stedelike omgewing (soos grondverdigting en ondeurdringbare oppervlakke) is ook nog nie bestudeer nie. Hierdie kwessie moet aandag geniet sodat die bome vir toekomstige generasies bewaar kan word.

Verskeie faktore kan die gesondheid van bome beïnvloed, waaronder grondeienskappe, mikroklimaat, lug- en grond-besoedeling, patogene en stadsontwikkeling (Nitschke *et al.*, 2017; Petrova *et al.*, 2014). Hierdie faktore kan 'n ingrypende uitwerking op bome se fisiologie en produktiwiteit hê, soos in Melbourne in Australië bevind is met die aantekening van stadsboomafsterwe weens droogte (May *et al.*, 2013) en in Noord- Amerikaanse en Europese stede waar besonder baie bome jaarliks sterf weens omgewingstres (Petrova *et al.*, 2014).

Stedelike bome kan egter onderhewig wees aan verskeie omgewingstresfaktore wat nie in 'n natuurlike woudomgewing sou geld nie en wat verdigting van grond en grondverseëling, watertekorte, meganiese skade en lae grondvrugbaarheid kan meebring (Sæbø *et al.*, 2005; Sepúlveda & Johnstone, 2018). Grondverdigting word in stedelike gebiede hoofsaaklik deur bouwerk en swaar pad- en voetgangerverkeer veroorsaak. Gevolglik word die boomwortels se vermoë om in die grond in te dring versteur en kan bome weens verminderde omliggende vierkante grondoppervlakte nie genoegsame water, lug of minerale opneem nie. Gegewe dat bome kosbaar is vir stedelike

bewoning, is dit noodsaaklik om hul gesondheid te bestudeer, hulle so lank moontlik te bewaar en tot toekomstige studies op stadsbome by te dra. Daar is vantevore met die term "vitaliteit" verwys na die algehele gesondheid van bome, en die term word omskryf as 'n boom se vermoë om te groei in die sisteem se huidige toestand (Shigo, 1991). Johnstone *et al.* (2013) stel voor dat die vitaliteit van bome vasgestel moet word met verwysing na die stres waaronder die boom verkeer.

Chlorofil *a*-fluoressensie is 'n sensitiewe en betroubare nieversteurende manier om fotosintetiese effektiwiteit van hoofsaaklik Fotosisteem II (FSII) vas te stel (Kusaka *et al.*, 2014). FSII is van besondere belang omdat daar gevind is dat hierdie fotosisteem sensitief is vir omgewingstres (Baker, 2006). Boomvitaliteit kan ook aan die hand van basale blaarwaterpotensiaal (Ψ_{blaar}) gemeet word (Sepúlveda & Johnstone, 2018). In die algemeen dui basale Ψ_{blaar} -waardes laer as -3 MPa in verskeie boomspesies op ekstreme watertekortstres met 50% embolisisme (Hinckley *et al.*, 1978), terwyl gematigde waterstres by stedelike eike onder -2.2 MPa voorkom, waar holtevorming begin (Bréda *et al.*, 1995; Van Rensburg, *et al.*, 1997a). Lae voordagse Ψ_{blaar} kan dodelik wees vir boomvitaliteit, veral in kombinasie met ander stresfaktore. Visuele takserings van straatbome is 'n nuttige manier om die toestand en gesondheid van bome vas te stel en agteruitgang van gesondheid en vitaliteit aan te dui (Adesoye & Dondofema, 2021). Interne defekte soos stamverval is wel nie altyd van buite sigbaar nie (Allison & Wang, 2008). Visuele takserings kan, tesame met fisiologiese metings (van waterpotensiaal en chlorofil *a*-fluoressensie), die vitaliteit van bome bepaal deur eksterne simptome aan te dui en moontlik hierdie simptome aan interne tekorte te koppel (Mattheck & Breloer, 1994). Bekende visuele takseringsmetodes sluit in indekse opgestel deur Roloff (soos uitgevoer deur Skiadaresis *et al.* 2019), skade aan bome en boomrisikotaksering, sowel as vitaliteitsmetings soos eerste uitgevoer deur Callow *et al.* (2019).

Plante is van voeding afhanklik vir oorlewing. Van sommige (makro-) voedingstowwe word groot hoeveelhede vereis, terwyl mikrovoedingstowwe ewe kritiek is, maar minder daarvan nodig is (Kleiber *et al.*, 2019). Makrovoedingstowwe is onder meer stikstof, kalium, kalsium, magnesium, fosfor en swael; en mikrovoedingstowwe sluit in chloor, yster, mangaan, sink, koper, molibdeen en nikkel. Die uiteenlopendheid van hierdie stowwe, en dus hulle wyd verspreide oorsprong en bronne, kan meebring dat plante vatbaar is vir stresstoestande (Bal *et al.*, 2015). Die norme vir voedingswaardes binne plante is nie noodwendig dieselfde as vir *Quercus*-bome nie –Bylae A som die gemiddelde vlakke van hierdie stowwe in plante, stadsbome en sommige *Quercus*-spesies op, soos aangedui deur Hiron (2015). In hierdie studie is voedingstofkonsentrasies in *Q. robur*-blare as aanduidings van boomgesondheid gebruik.

Hierdie ondersoek het beoog om die gesondheidstatus van 'n verteenwoordigende gedeelte van die bome in die Eikelaning in Potchefstroom te bepaal deur middel van meting van blaarwaterpotensiaal, chlorofil *a*-fluoressensie sowel as blaarvoedingstofanalise, asook deur visuele taksering van die toestand van die bome met aanvullende metodes. Hierdie parameters is

met mekaar vergelyk op grond van areas met verskillende tipes grondbedekking onder die bome. Die gevolgtrekkings van die studie kan bydra tot die ontwikkeling van 'n bestuursplan wat kan verseker dat hierdie eikebome die optimale ekosisteedienste aan stadsinwoners kan bied. Die hipotese is dat die ondeurdringbare oppervlakke soos sypaadjies of teer, wat tipies van stedelike omgewings is, 'n negatiewe uitwerking op die vitaliteit van die bome in die Potchefstroomse Eikelaan het.

Materiaal en Metodes

Boomkeuse en studiegebied

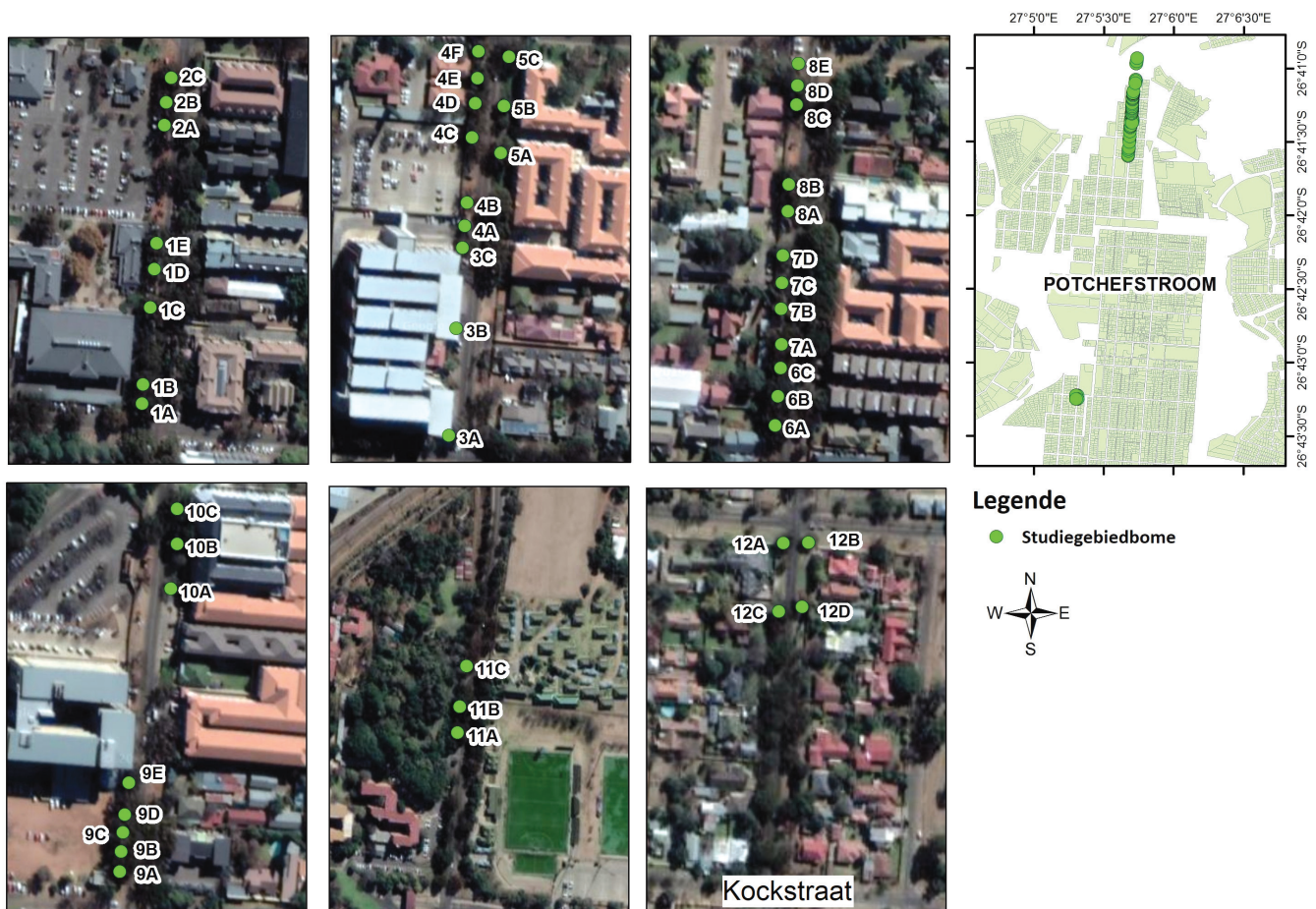
Vir hierdie studie is 50 volwasse bome in die Eikelaan in Potchefstroom, Suid-Afrika (26.7145° S, 27.0970° E) lukraak gekies (dit wil sê, sodat verskeie bome met verskillende bedekkings oor 'n groot gebied binne die Eikelaan verteenwoordig sou word) om die verskillende grondbedekkings onder die bome te verteenwoordig. 50 bome is lukraak gekies sodat statistiese verskille tussen verskillende bedekkings getoon sou kon word en die praktiese uitvoerbaarheid van die projek steeds verseker sou wees. 43 van hierdie bome grens aan die Potchefstroomkampus van die Noordwes-Universiteit en dien as skadu vir parking (Figuur 1). Vier bome in Kockstraat, ver van die universiteit geleë, is ter vergelyking gekies as bome wat nie as skadu vir parking (wat verdigting van grond behels) dien nie, maar hoofsaaklik grasperk as bedekking het (Figuur 1).

'n Addisionele drie bome groei langs 'n stroom op 'n plaas buite Potchefstroom om as kontrolebome vir niestedelike toestande te dien (Figuur 2).

Die grondbedekkingstipes binne 'n 10 m-radius vanaf elke boomstam is as 'n persentasie van die totale bedekking onder elke boom geraam. Bedekkingstipe kan insluit natuurlike grondbedekking, verdigte kaal grond en plaveisel (wat dien as parking), tuin- en grasperkbedekking, en ook klipgruis, 'n los aggregraat van klipfragmente, wat self ook dien as parkingareas maar 'n groter mate van deurlaatbaarheid kan toon. 'n Boom kan byvoorbeeld 'n grondbedekkingsamestelling hê bestaande uit 30% teerpad, 20% klipgruis en 50% tuin/grasperk wat 100% van die grondbedekking uitmaak.

Die bome is gemeet ten opsigte van die stamdeursnee op borshoogte (DBH) deur met 'n maatband op dieselfde hoogte die stamdeursnee van elke boom te meet. Verder is die boomhoogte ook geraam deur middel van vergelyking van elke boom met 'n meterstok.

Die bome is soos volg volgens die geraamde grondbedekking gegroepeer: die Kontrolegroep (bome langs 'n stroom met natuurlike grondbedekking, bome 13A–13C); Groep 1 met hoofsaaklik grondbedekking van verdigte kaal grond en plaveisel (bome 1A–1E, 2A–2C, 4A–4E, 6A–6C, 7A–7D, 8A–8E,



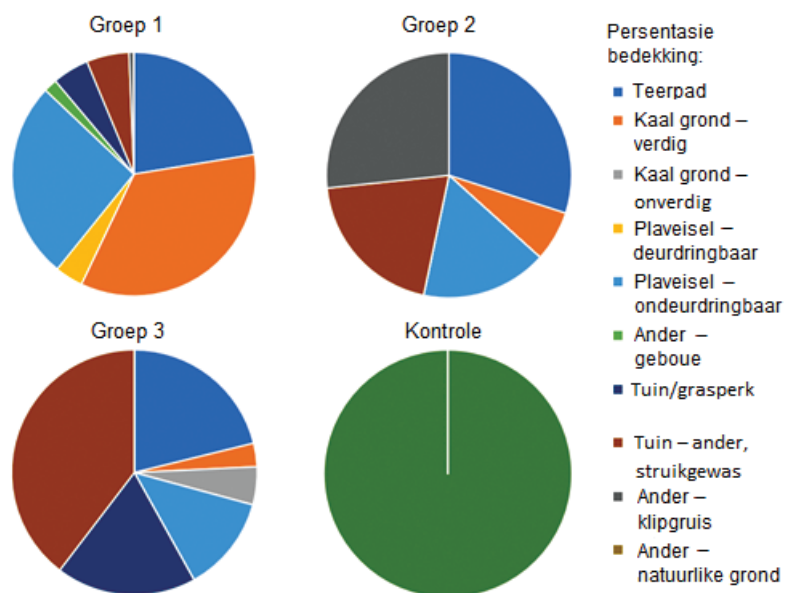
Figuur 1: Studiegebied met aanduiding van die posisie van die bome. Bome 1A–11C staan in Steve Bikolaan en bome 12A–12D staan in Kockstraat, soos aangedui op die figuur. Groep 1 het hoofsaaklik grondbedekking van verdigte kaal grond en plaveisel (boom 1A–1E, 2A–2C, 4A–4E, 6A–6C, 7A–7D, 8A–8E, 9A–9E); Groep 2 het opvallend klipgruis as grondbedekking (boom 3A–3C); en Groep 3 het hoofsaaklik tuin- en grasperkbedekking (boom 5A–5C, 10A–10C, 11A–11C, 12A–12D), waaronder bome in Kockstraat.

9A–9E); Groep 2 met opvallende klipgruisbedekking (bome 3A–3C) wat tot deurlaatbaarheid kan bydra, hoewel steeds verdig; en Groep 3 met hoofsaaklik tuin- en grasperkbedekking (bome 5A–5C, 10A–10C, 11A–11C, 12A–12D), waaronder bome in Kockstraat (Figuur 3). Die grondbedekking van al drie groepe

sluit 'n groot persentasie teerpad in, wat aandui dat dit straatbome is. Die grondbedekking onder die kontrolebome was natuurlike grond waarin inheemse plantspesies gegroei het.



Figuur 2: Kontrolebome met hoofsaaklik natuurlike grondbedekking (13A–13C) langs 'n avontuurroete buite Potchefstroom.



Figuur 3: Voorstelling van die gemiddelde persentasie grondbedekking onder die *Q. robur*-bome in 'n 10 m-radius van die boomstam af: Groep 1 hoofsaaklik met grondbedekking van verdigte kaal grond en plaveisel (boom 1A–1E, 2A–2C, 4A–4E, 6A–6C, 7A–7D, 8A–8E, 9A–9E); Groep 2 opvallend met klipgruis as grondbedekking (boom 3A–3C); en Groep 3 hoofsaaklik tuin- en grasperkbedekking (boom 5A–5C, 10A–10C, 11A–11C, 12A–12D), waaronder bome in Kockstraat; en kontrolebome met hoofsaaklik natuurlike grondbedekking (13A–13C).

Verwerking van visuele taksering het getoon dat daar geen statisties beduidende verskille in die stamdeursnee op bors-hoogte (DBH) en hoogtewaardes van die bome in elke groep was nie. Bome in die kontrolegroep het beduidend groter ($p < 0,05$) kroonverspreiding as die ander groepe – te verwagte gegewe dat hierdie bome nie gesnoei is nie. Dit dui daarop dat die gekose bome in al die groepe vergelykbaar (homogeen) was wat betref grootte en ouderdom en gevolglik met mekaar vergelyk kon word aan die hand van visuele gesondheidstakserings en ekofisiologiese data (vitaliteitsaanwysers, boomrisiko, waterpotensiaal en chlorofil a -fluoresensie). Die gemiddelde kroonbedekking is bepaal met die metode wat Moyo en Chikuni (2016) volg. Dit behels die meting van die horisontale afstand van die twee uiterste punte van die kroon van noord na suid (N-S), en van oos na wes (O-W), en dan is die gemiddelde van hierdie waarde geneem om die gemiddelde kroonbedekking te bepaal.

Visuele taksering

Skade aan bome is vasgestel aan die hand van 'n aangepaste metode uit Adesoye en Dondofema (2021) deur die skade aan boomwortels, -takke, -stam en -loof aan te teken. Die skaal was soos volg: 0 – geen skade, 1 – ligte skade, 2 – erge skade. Vitaliteit is getakseer deur die kroongrootte (1–5), kroondigtheid (1–5) en kroon-epikormiese groei (1–5) vas te stel volgens 'n aangepaste weergawe van die metode van Callow *et al.* (2018). Die visuele gesondheid van bome is bepaal aan die hand van Roloff se vitaliteitsindeks, soos Skiadaresis *et al.* (2019) dit gebruik, waarvolgens aan elke boom 'n waarde van 0–3 toegeken is: 0 – lewenskragtig, 1 – verswak, 2 – beskadig en 3 – erg beskadig (Figuur 4). Ook is boomrisiko vasgestel met die metode van Matheny en Clark, soos deur Adesoye en Dondofema (2021) aangepas: die verbrokkelingspotensiaal, grootte van die aangetaste gedeelte en 'n teikenwaarde is aangeteken. Daar is aan hierdie drie komponente soos volg elk 'n waarde van 1–4 toegeken: verbrokkelingspotensiaal (1 – laag,

2 – gemiddeld, 3 – hoog, 4 – ernstig), grootte van die aangetaste gedeelte (1 – <150 mm, 2 – 150–450 mm, 3 – 450–750 mm, 4 – >750 mm) en teikenwaarde volgens gebruiksfrekwensie (1 – sporadiese gebruik, 2 – onderbroke gebruik, 3 – gereelde gebruik, 4 – volgehoue gebruik). Hierdie punte is bymekaargetel tot 'n waarde uit 12, wat die boom se risiko aan die omliggende gebied, inwoners of infrastruktuur bepaal, sou meganiese verbrokkeling plaasvind.

Blaarwaterpotensiaal

Fisiologiese studies op eikebome in Potchefstroom (Van Rensburg, *et al.*, 1997a) het vantevore sowel middag- as voordag- Ψ_{blaar} gemeet, terwyl die huidige studie op basale Ψ_{blaar} toegespits was, aangesien dit grondwaterbeskikbaarheid die beste verteenwoordig deur die ewilibrum van Ψ tussen blare en wortels aan te gee (Améglio *et al.*, 1999; Bauerle *et al.*, 2008; Martínez-Vilalta *et al.*, 2014). Volgens Klepper (1968) word grondvogtigheid die beste weerspieël deur waterpotensiaal wat snags gemeet word, omdat waterstand deur die dag aansienlik varieer. Daaglikse transpirasiekoerspatrone van *Q. robur*-bome toon soortgelyke koerse tussen 22:00 en 04:00 snags (Čermák *et al.*, 1982). Om dit te bevestig, is 'n 24-uurstudie van 01:00 tot 24:00 (Figuur 6 in resultate) op 'n eikeboom uitgevoer om enige verskille in waterspanning binne die boom tussen 21:00 en 05:00 te bepaal (Figuur 7 in resultate).

Nadat die Ψ_{blaar} bepaal is, het resultate getoon dat hierdie waardes enige tyd tussen 21:00 en 05:00 geneem kan word om akkurate basale Ψ_{blaar} (Ψ_{blaar} sonder die invloed van daaglikse transpirasie en verdamping) weer te gee. Basale Ψ_{blaar} is gevolglik in Desember 2018 (3–7 Desember) en Maart 2019 (25–29 Maart) tussen 21:00 en 24:00 met 'n Scholander-drukkamer gemeet. Drie blare per boom is gebruik en onmiddellik ná afsnyding gemeet, na aanleiding van die metodes van Besson *et al.* (2014), McCutchan en Shackel (1992), en Merchant *et al.* (2006). Blare is op 2–3 meterhoogte versamel. Die blaar is binne die drukkamer



Figuur 4: a) Voorbeeld van 'n boom met 'n Roloff-vitaliteitsindeks van 0 (lewenskragtig) en b) voorbeeld van 'n boom met 'n Roloff-vitaliteitsindeks van 3 (erg beskadig).

geplaas met die gesnyde blaarsteel na buite en 'n lugdigte seël is met 'n rubberdrukband gevorm (Scholander *et al.*, 1965). Na gelang die drukking binne die kamer verhoog is terwyl saamgeperste lug dit binnegevoel het, het die sap in die blaar na die oppervlak gevloei, waar dit geborrel en oorgeloop het. Sodra die vloeistof die oppervlak van die blaarsteel benat het, is die drukingsmeting (in Pascal en later omgeskakel na MPa) beëindig en die meting geneem.

Chlorofil *a*-fluoressensie

Chlorofil *a*-fluoressensiemetings is in Desember 2018 (3–7 Desember) en Maart 2019 (25–29 Maart) met 'n M-PEA-chlorofilfluorimeter (multi-function plant efficiency analyzer-chlorofilfluorimeter) (Hansatech Instruments, King's Lynn, Norfolk, VK) geneem. Fluoressensiemetings is aangeteken ná verligting met 'n rooi aktienlig ($3\,000\,\mu\text{mol fotone m}^{-2}\text{s}^{-1}$) – drie verliggende diodes is 1 s lank met 'n fokuskol van 5 mm in diameter en 12-bisresolusie verlig (Hansatech Instruments, King's Lynn, Norfolk, VK).

Drie blare is per boom versamel en voor metings 1 uur lank donkeraangepas – twee tot vier blare word tipies per plant gemeet om fluoressensie vas te stel (Gielen *et al.*, 2006; Perez-Priego *et al.*, 2005). Drie herhalings is per blaar uitgevoer; dus is nege metings per boom geneem. Die M-PEA-chlorofilfluorimeter meet gelyktydig verskeie parameters; die klem vir hierdie studie was op PI_{TOTAAL} en F_w/F_m . Die M-PEA Plus V1.10-sagteware is vir parameterberekeninge gebruik. Die PI_{TOTAAL} -parameter is op die prestasie-indeks van FSII en alle gedeeltelike parameters gegrond (Redillas *et al.*, 2011; Samborska *et al.*, 2019). Die PI_{TOTAAL} is die potensieel bewaarde energie van fotone wat deur FSII opgeneem word en wat na die reduksiestroom van FSI-eindontvangers beweeg (Pollastrini *et al.*, 2014).

PI_{TOTAAL} is 'n biofisiese parameter wat van fluoressensieparameters afgelei is (Strasser *et al.*, 2010). Soos Krüger *et al.* (2017) en Strasser *et al.* (2000) aandui, is PI_{TOTAAL} soos volg bereken:

$$PI_{\text{TOTAAL}} = \frac{Y_{RC}}{1 - Y_{RC}} + \frac{\phi_{Po}}{1 - \phi_{Po}} + \frac{\psi_{Eo}}{1 - \psi_{Eo}} + \frac{\delta_{Ro}}{1 - \delta_{Ro}}$$

Waar:

Y_{RC} die breukdeel chlorofil in die reaksiesentrum (Chl_{RC}) per totale aanwesige chlorofil is ($Chl_{RC}/Chl_{\text{Antenna}}$);

ϕ_{Po} die maksimum kwantumopbrengs van primêre fotochemie is;

ψ_{Eo} die effektiwiteit is waarmee 'n vasgevangde eksiton 'n elektron verder as Q_A^- die vervoerketting binne kan beweeg;

δ_{Ro} die effektiwiteit van elektronoordrag vanaf 'n verminderde plastokwinoon na die FSI-eindelektronontvangers is (Krüger *et al.*, 2017).

F_w/F_m is die parameter wat die maksimum kwantumopbrengs FSII beskryf (Zhuri *et al.*, 2015). F_w/F_m is soos volg bereken:

$$\frac{F_w}{F_m} = \frac{(F_m - F_o)}{F_m}$$

Waar:

F_w die wisselende fluoressensie is;

F_m die maksimum fluoressensie is;

F_o die minimum fluoressensie is sodra verligting plaasvind (Zhuri *et al.*, 2015).

Voedingstof-/elementalanalise

Voedingstofanalise van blare is volgens die EPA 30 51 A-metode uitgevoer. Voedingstowwe wat geanaliseer is, sluit in mikro-elemente (Al, B, Cl, Cr, Cu, Fe, Mn, Mo, Ni en Zn) sowel as makro-elemente (Ca, C, Mg, N, P, K, S). Blare is 2–3 meter bo die grond gedurende die dag van 10 November 2020 versamel en, sodat daar nie chemiese afbreking voor analise plaasvind nie (Abadia, 1993; Esteban *et al.*, 2009), vir vervoer na laboratoriumanalise snelbevries. 'n Totaal van 200 mg plantmateriaal is geweeg en op 'n Teflon-buis geplaas, waarna 3 ml 32%-soutsuur (HCl) en 9 ml 65%-salpetersuur (HNO_3) bygevoeg is. Die buis se deksel is opgesit en die buis is 20 minute lank in 'n mikrogolf-verteringsstelsel (Milestone, Ethos UP, Maxi 44) geplaas om 1 800 MW en 200 °C te bereik en dit is 15 minute lank volgehou. Die monster is verkoel en tot 'n eindvolume van 50 ml gevul en geanaliseer op 'n ICP-MS (Agilent 7500-reeks), met CRC-apparaat (Collision Reaction Cell-apparaat) gepas om steuring uit te skakel. Monsters is met behulp van 'n Micromist-newelsproeier bygebring, wat matrikssteuring verminder en 'n stewiger plasma as 'n standaard-kwartssproeikamer lewer. Die instrument is met 'n oplossing wat Li, Y, Ce en Tl (1 dpb) bevat, geoptimaliseer vir standaardoksiedlae/lae steuringsvlakke ($\leq 1,5\%$), terwyl hoë sensitiwiteit oor die massareeks heen behou is. Met die oog op kwantitatiewe resultate is yking uitgevoer met ULTRASPEC®-gewaarmerkte opbestelling-gemengde multi-elementvoorraadoplossing (De Bruyn Spectroscopic Solutions, South Africa), wat al die elemente van belang bevat het.

Statistiese ontledings

Alle statistiese ontledings is met behulp van die statistiese programmeringstaal R (weergawe 3.6.0) uitgevoer. Die normaliteit van elke gemete parameter is volgens die Shapiro-Wilk-toets vir normaliteit met die Shapiro-funksie van die R-grondslag-funksies bereken. Normaliteit is vir p -waardes $> 0,05$ oorweeg. Die meeste parameterwaardes was nie normaal versprei nie ($p < 0,05$) en nieparametriese toetse is daarom daarna oorweeg. Beduidendheid tussen twee onafhanklike groepe is aan die hand van die Mann-Whitney U-toets bereken, met die wilcox-test-funksie. Beduidendheid tussen meer as twee onafhanklike groepe is volgens die Kruskal-Wallis H-toets met die kruskal-toetsfunksie bereken. Beduidende resultate is vir p -waardes $< 0,05$ herken. Beduidendheid is tussen die groepe vir die volgende onafhanklike veranderlikes bereken: onderskeie bome, groepe en proefjare. Alle grafieke ter illustrasie van beskrywende statistiek is getrek met behulp van die ggplot-funksie in die ggplot2-pakket (weergawe 3.3.2).

Korrelasie tussen die Roloff-indeks, boomrisiko, PI_{TOTAAL} persentasie grondbedekking en Ψ -blaar (Desember 2018 en Maart 2019) is bereken met Spearman se korrelasie-analise, uitgevoer in R (weergawe 3.6.0) deur die Hmisc-pakket en die rcorr-funksie te benut. Sterk korrelasie is vir absolute R -waardes $\geq 0,6$ oorweeg en beduidende korrelasies vir p -waardes $< 0,05$.

Resultate

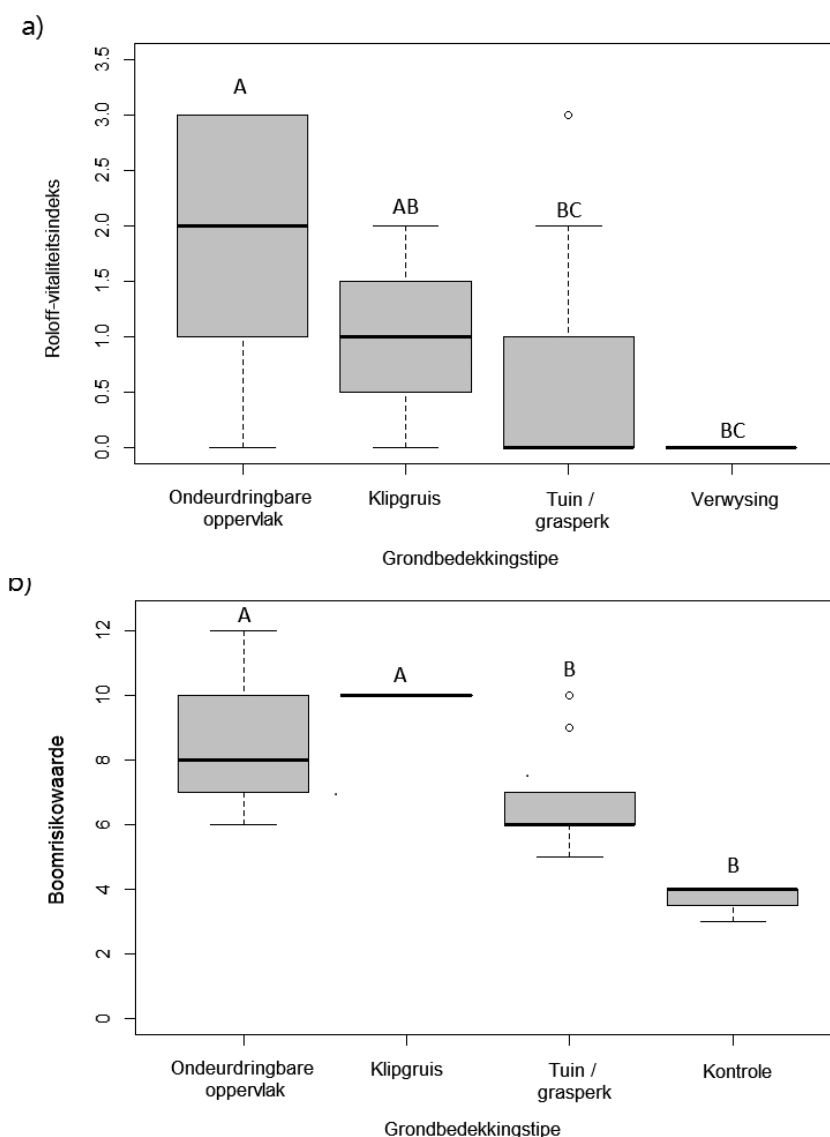
Visuele boomtaksering

Bome is visueel getakseer en waardes toegeken op grond van vitaliteitsindekse soos opgestel deur Roloff, gebaseer op waarnemings soos opgesom in Figuur 5. 11 bome was erg beskadig (boom 1D, 1E, 2A, 4A, 5B, 6B, 6C, 7C, 7D, 8C en 9D), 11 bome was beskadig (boom 1A, 1C, 2B, 2C, 3C, 8A, 8E, 9A, 9B, 9C, en 10B), nege bome was verswak (boom 1B, 3A, 4B, 4C, 6A, 7B, 8B, 12B en 12D) en 19 bome is steeds as lewenskragtig beskou (boom 3B, 4D, 4E, 4F, 5A, 5C, 7A, 8D, 9E, 10A, 10C, 11A, 11B, 11C, 12A, 12C, 13A, 13B, 13C). Statistiek toon dat daar aan bome in die ondeurdringbareoppervlak-groep 'n beduidend hoër skade-indeks toegeken is as aan bome in die tuin-/grasperkbedekking-groep ($p = 0,002$) en in die kontrolegroep ($p = 0,013$) (Figuur 5a), wat aandui daardie bome meer beskadig was.

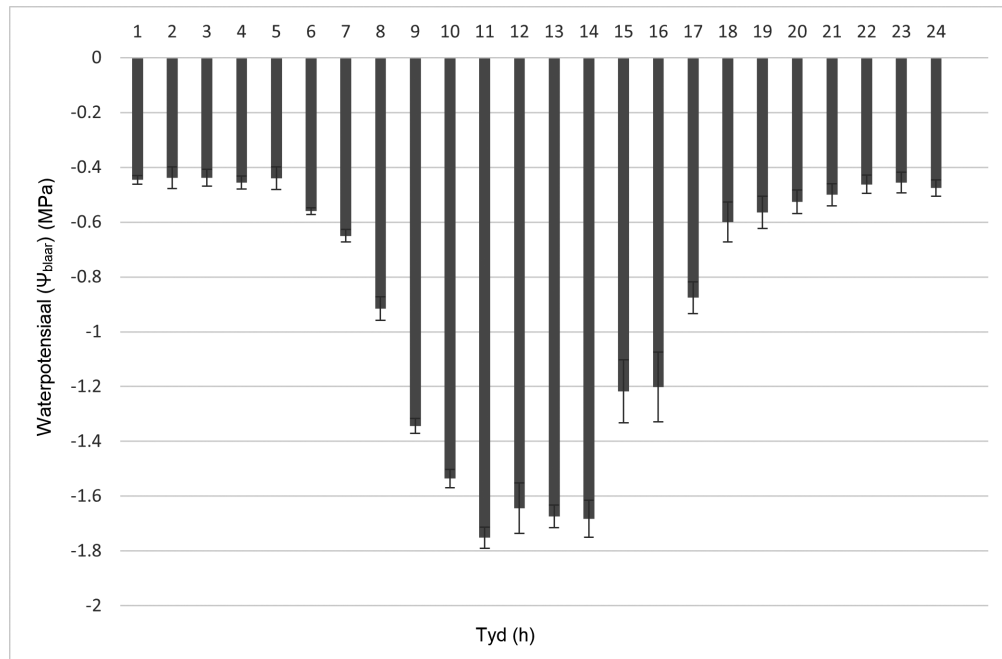
Wat betref individuele boomrisiko, is drie verskillende parameters gekies – verbrokkelingspotensiaal, grootte van die aangetaste gedeelte sowel as die teikenwaarde, wat dan 'n totaal van 12 opmaak. 'n Boomtotaal van 12 dui op maksimum

risiko van skade aan eiendom of inwoners, terwyl 'n totaal van 3 dui op minimum risiko van skade. 14 bome het baie hoë risikowaardes bo 10 getoon (boom 1D, 1E, 3A, 3B, 3C, 4A, 4C, 5B, 7C, 7D, 8C, 9A, 9D en 10B), 21 bome hoë risikowaardes van 7–9 (boom 1B, 1C, 2A, 2B, 2C, 4E, 4F, 5A, 6A, 6B, 6C, 7A, 7B, 8A, 8B, 8E, 9B, 9C, 9E, 10A en 12C), 13 bome middelmatige risiko (boom 1A, 4B, 4D, 5C, 8D, 10C, 11A, 11B, 11C, 12A, 12B, 12D, 13A, en 13B) en net een boom het minimum risiko getoon (boom 13C). Die data korrespondeer met die mate van afsterwe wat in boom 4A, 7D en 8C waargeneem is (soos hierbo genoem).

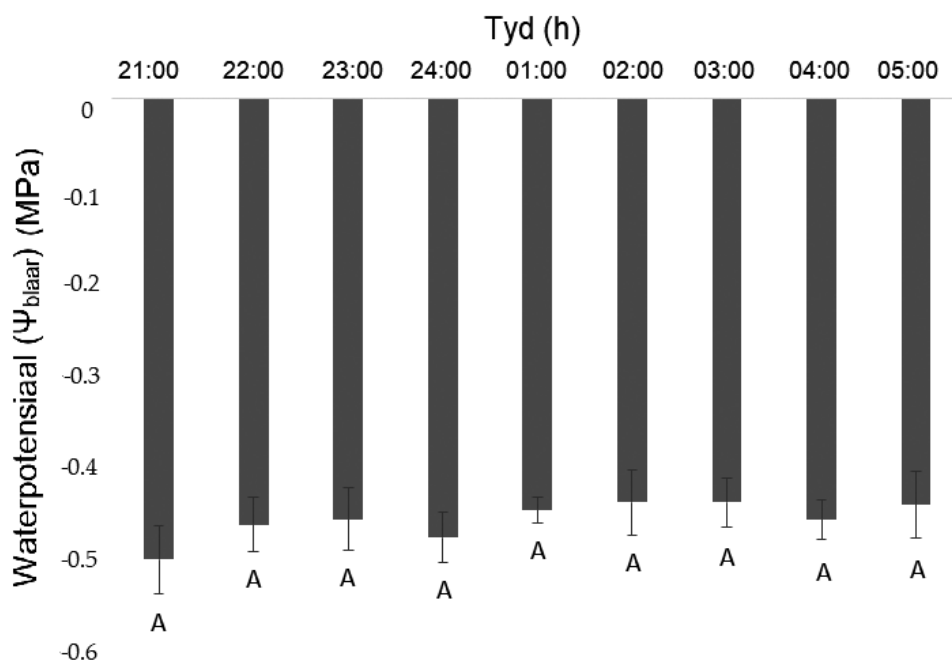
In groepsverband is daar aan die tuin-/grasperkbedekking-groep 'n beduidend laer risikowaarde toegeken as aan die ondeurdringbareoppervlak-groep ($p = 0,013$) en die klipgruisgroep ($p = 0,01$) (Figuur 5b). Voorts het die kontrolegroep ook 'n laer boomrisikowaarde as die ondeurdringbareoppervlak-groep ($p = 0,002$) en die klipgruisgroep ($p < 0,000$) gehad (Figuur 5b). Dit dui op 'n laer waarskynlikheid dat bome in die tuin-/grasperkbedekking-groep en die kontrolegroep eiendom of inwoners skade sal berokken.



Figuur 5: a) Roloff-vitaliteitsindeks (0-3) en b) boomrisikowaarde (0-12), bome gegroepeer. Verskillende letters dui op 'n statisties beduidende verskil.



Figuur 6: Waterpotensiaal (Ψ_{blaar}) in MPa soos gemeet vanaf 01:00 tot 24:00.



Figuur 7: Waterpotensiaal (Ψ_{blaar}) in MPa soos gemeet van 21:00 tot 05:00. Verskillende letters dui op statisties beduidende verskille.

Blaarwaterpotensiaal

'n 24-uurstudie is van 01:00 tot 24:00 op 'n eikeboom uitgevoer om enige verskille in waterspanning binne die boom tussen 21:00 en 05:00 aan te dui (Figuur 6 en 7 hieronder) soos in Afdeling 2. hierbo verduidelik.

Dit is vanuit hierdie figuur duidelik dat min variansie in Ψ_{blaar} -waardes tussen 21:00 en 05:00 aangeteken is. Statistiese analise toon geen statisties beduidende verskil ($p = 0,48$) tussen hierdie tydperke (ure) nie (Figuur 7). Dit dui daarop dat waterpotensiaalmetings enige tyd gedurende hierdie ure geneem

kan word, aangesien stomatale sluiting plaasvind en nagtelike transpirasie nie oor die algemeen in eike plaasvind nie (Daley & Phillips, 2006).

Die hoogste (mins negatiewe) basale Ψ_{blaar} in Desember 2018 en Maart 2019 is by bome in die kontrolegroep op 'n plaas langs 'n stroom aangeteken (Figuur 8). Die ondeurdringbareoppervlaktegroep het beduidend laer Ψ_{blaar} as al drie die ander groepe ($p > 0,05$) vir Desember 2018 en Maart 2019 getoon. Die Ψ_{blaar} het in Desember 2018 en Maart 2019 vir alle groepe gedaal. Hierteenoor was daar geen beduidende verskille ($p < 0,05$) tussen die tuin-/grasperkbedekking-groepe en die klipgruisgroep

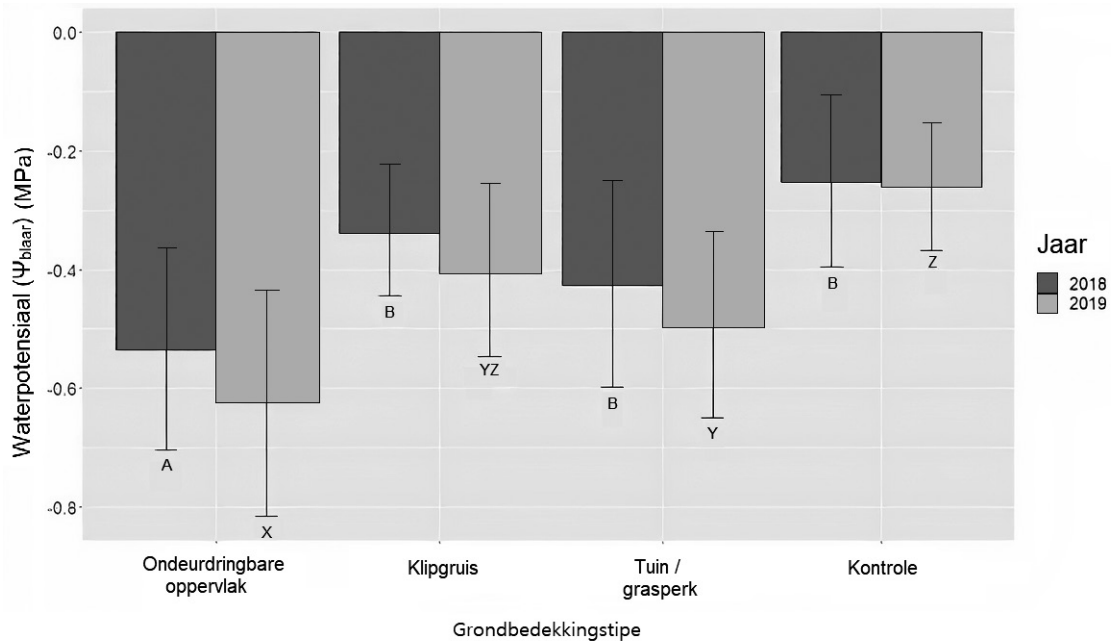
nie. Die tuin-/grasperkbedekking-groep het beduidend laer Ψ_{blaar} as die kontrolegroep gehad ($p > 0,05$) (Figuur 8).

Chlorofil a-fluoresensie

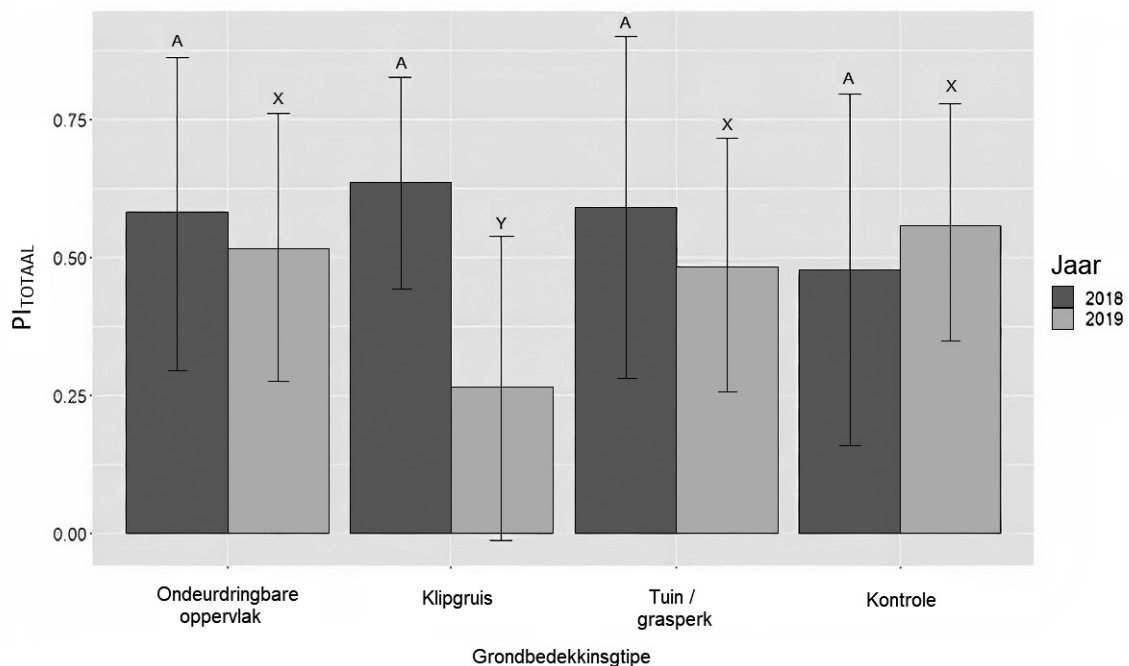
Die gemiddelde PI_{TOTAAL} van elke groep (ondeurdringbare oppervlak, klipgruis, tuin/grasperk en kontrole) word in Figuur 9 uitgebeeld. Die enigste beduidende verskil is in 2019 tussen die klipgruisgroep en die ander drie groepe aangeteken (Figuur 9), naamlik dat die bome met klipgruis as grondbedekking 'n laer PI_{TOTAAL} as die ander bome gehad het.

Die gemiddelde F_w/F_m van elke groep word in Figuur 10 uitgebeeld.

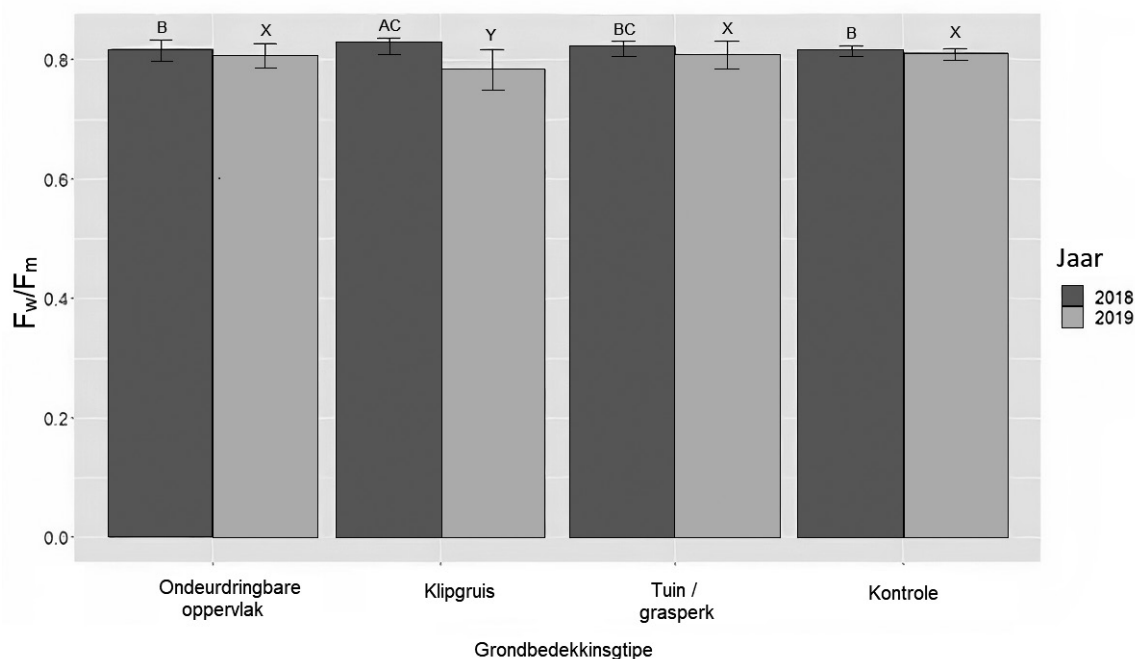
Die F_w/F_m was beduidend ($p < 0,05$) laer in die klipgruisgroep as in die ander drie groepe in sowel 2018 as 2019 (Figuur 10). Tipiese F_w/F_m -waardes, as geen stresfaktore by die plant van toepassing is nie, is naby aan 0,8 (Cavender-Bares, 2007). Wanneer 'n plant stres ervaar, val F_w/F_m -waardes onder 0,8, wat dit 'n nuttige parameter maak om plantstres te meet (Murchie & Lawson, 2013). Die beduidend laer waarde van bome in die klipgruisgroep dui op stres in hierdie bome.



Figuur 8: Gemiddelde blaarwaterpotensiaal (Ψ_{blaar}) in MPa vir Desember 2018 en Maart 2019 vir elke grondbedekkingstipe – ondeurdringbare oppervlak, klipgruis, tuin/grasperk en kontrole. Verskillende letters dui op statisties beduidende verskille ($p < 0,05$) vir groepe in Desember 2018 en in Maart 2019.



Figuur 9: Gemiddelde PI_{TOTAAL} -waardes vir Desember 2018 en Maart 2019 vir elke tipe grondbedekking – ondeurdringbare oppervlak, tuin/grasperk, klipgruis en kontrole. Verskillende letters dui op statisties beduidende verskille ($p < 0,05$) tussen groepe in Desember 2018 en dié in Maart 2019.



Figuur 10: Gemiddelde F_w/F_m -waardes vir Desember 2018 en Maart 2019 vir elke tipe grondbedekking – ondeurdringbare oppervlak, tuin/grasperk, klipgruis en kontrole. Verskillende letters dui op statisties beduidende verskille ($p < 0,05$) tussen groepe in Desember 2018 en in Maart 2019.

Voedingstof-/elementalanalise

Voedingstofanalise is uitgevoer op blaarmonsters van elke boom en geen beduidende ($p > 0,05$) verskille is tussen die individuele bome gevind nie. Die groepe is vergelyk en die bevindinge word in Bylae C opgesom. Bevindinge word vergelyk met die gemiddelde voedingstofinhoud by talle outeurs, soos in Bylae A opgesom is.

Die mees opvallende bevindinge vanuit die voedingstofanalise sluit die volgende in:

Van die makrovoedingstowwe het die klipgruisgroep die hoogste kalsiuminhoud van al die groepe getoon, met p -waardes van 0,017 (ondeurdringbare oppervlak), 0,009 (tuin/grasperk) en 0,013 (kontrole). Die mediaan van die klipgruisgroep was 10 470 mg.kg⁻¹, dus binne die ideale interval vir plante (kyk Bylae A). Die ander groepe se waardes was laer as dié wat tipies by *Quercus*-spesies aangetref word (onder 8 400 mg.kg⁻¹) en kan op 'n kalsiumtekort dui.

Die klipgruisgroep het 'n beduidend hoër magnesiuminhoud as die tuin-/grasperkbedekking- ($p = 0,008$) en die kontrolegroep ($p = 0,007$) gehad, met 'n mediaan van 4 749. Hoewel dit hoër as die algemeen aanvaarde vlak binne plante is (Bylae A), is dit baie naby aan die gemiddelde magnesiuminhoud by *Quercus*-spesies. Alle groepe het oor voldoende vlakke fosfor beskik (tussen 800 en 2 200 mg.kg⁻¹). Hoewel die kalsiumvlakke van al die groepe voldoende was (tussen 4 000 en 15 000 mg.kg⁻¹), is die gemiddelde vlak van kalsium by *Quercus*-spesies 3 642,674 (Bylae A), heelwat laer as wat die geval by die bome in hierdie studie was. Dit kan 'n aanduiding van kalsiumtoksisiteit wees.

Die ysterinhoud van die tuin-/grasperkgroep was wel laer as dié van die ondeurdringbare oppervlak- ($p = 0,004$) en die klipgruisgroepe ($p = 0,001$), met 'n mediaan van 55,75, maar dit is nogtans 'n aanvaarbare vlak vir plante (Bylae A). Dit is egter laer as die gemiddelde ysterinhoud by *Quercus*-spesies. Bome in die tuin-/grasperkbedekking-groep het beduidend laer mangaanvlakke getoon as in die ondeurdringbareoppervlakkegroep ($p < 0,000$) en die klipgruisgroep ($p = 0,031$), met 'n mediaan van 72,77; dit is wel binne die aanvaarbare interval vir plante, maar veel laer as die gemiddelde mangaanvlakke in *Quercus*-bome (Bylae A). Die mangaanvlakke van die kontrolegroep was veel hoër as die ondeurdringbareoppervlakkegroep ($p = 0,023$) en die tuin-/grasperkbedekking-groep ($p < 0,000$), met 'n mediaan van 635, maar dit is wel binne die normale interval van mangaanvlakke in plante en veel nader aan die gemiddelde vlak binne *Quercus*-bome (Bylae A) en dui dus nie op mangaantoksisiteit nie.

Hoewel daar by die tuin-/grasperkbedekking-groep 'n laer nikkelinhoud gevind is (mediaan = 1,973) as by die ondeurdringbareoppervlak-groep ($p < 0,000$) en die klipgruisgroep ($p = 0,041$), val dit steeds binne die aanvaarbare interval van nikkelinhoud in plante, sowel as in *Quercus*-bome (Bylae A). Sinkinhoud was laer by die tuin-/grasperkbedekking-groep as by die ondeurdringbareoppervlak- ($p < 0,000$) en die klipgruisgroep ($p = 0,004$), met 'n mediaan van 143,2 – steeds binne die aanvaarbare interval van sink in plante (Bylae A).

Die vlakke van die oorblywende elemente, naamlik boor, titaan, koper, seleen, stronsium, molibdeen, palladium, tin, platinum, goud, kwik, lood, torium en uraan, het nie beduidend tussen die groepe verskil nie ($p > 0,05$).

Korrelasieanalise

Korrelasieanalise tussen Roloff-indeks, boomrisiko, PI_{TOTAAL} persentasie grondbedekking en basale Ψ_{blaar} (Desember 2018 en Maart 2019) het geen beduidende bevindinge opgelewer nie ($p > 0,05$). Roloff-vitaliteitsindeks en boomrisikowaarde het spesifiek beduidend ($p < 0,001$) positief gekorreleer ($r = 0,669$). 'n Beduidende ($p < 0,05$) negatiewe korrelasie is tussen Roloff-vitaliteitsindeks en F_w/F_m -waardes vir Maart 2018 gevind.

Bespreking

Uit resultate blyk dit dat bome in die ondeurdringbare oppervlak-groep visueel 'n laer vitaliteit as die ander bome toon; hierdie bome het ook meer beskadigde takke as die tuin-/grasperk-bedekkinggroep ($p = 0,0013$) en 'n hoër Roloff-vitaliteitsindeks as die tuin-/grasperkbedekkinggroep ($p = 0,002$) en die kontrolegroep ($p = 0,0131$), wat op 'n hoër mate van skade dui. Die taksering van boomrisiko het boonop getoon dat die bome in die ondeurdringbare oppervlak-groep 'n hoër risikowaarde as die tuin-/grasperkbedekkinggroep ($p = 0,013$) en die kontrolegroep ($p = 0,002$) gehad het. Daar is 'n positiewe korrelasie tussen die Roloff-vitaliteitsindeks en die boomrisikowaarde gevind – hoe hoër die Roloff-waarde (groter mate van skade), hoe hoër is die boom se risiko en die waarskynlikheid van meganiese verbrokkeling en skade aan eiendom.

Volgens waterpotensiaalwaardes is die basale Ψ_{blaar} van bome met hoofsaaklik verdigte kaal grond of syaadje as grondbedekking (Groep 1) statisties beduidend laer (meer negatief) as dié van bome in die tuin-/grasperkbedekking, klipgruis- en kontrolegroep ($p < 0,05$) (Figuur 8).

Oor die algemeen dui basale Ψ_{blaar} -waardes laer as -3 MPa in verskeie boomspesies op ekstreme watertekortstres met 50% embolisme (Hinckley *et al.*, 1978), terwyl gematigde waterstres by stedelike eike plaasvind onder $-2,2$ MPa, waar holtevorming begin (Bréda *et al.*, 1995; Van Rensburg, *et al.*, 1997a). Hoewel geen van die bome betreklik lae basale Ψ -waardes gehad het nie, het bome in die ondeurdringbare oppervlak groep wel statisties laer waterpotensiaalwaardes getoon. Volgens die literatuur (Nawaz *et al.*, 2013; Raghavan *et al.*, 1990; Shah *et al.*, 2017) kan verwag word dat grondverdichting by ondeurdringbare oppervlakke poriegrootte in die grond verklein en waterbehoud en -geleiding verlaag. Grondbedekking wat die grond "verseël", kan waterbeweging, die uitruiling van hitte met die atmosfeer, gasdiffusie en grondbiota beïnvloed (Scalenghe & Ajmone Marsan, 2009). Hierdie stedelike gegewens dra by tot fisiologiese stres by stedelike bome, veral dié langs teerpaie. Daar is bevind dat hierdie faktore stedelike bome se lewensduur kan verkort, vergeleke met bome in landelike gebiede (Czaja *et al.*, 2020; Sæbø *et al.*, 2005).

Die data van Van Rensburg *et al.* (1997a) het aangedui dat stadsbome se waterpotensiaalwaardes in die somer (Desember 1992 tot Maart 1993) tussen $-0,9$ MPa en $-1,2$ MPa wissel. Die data van die huidige studie het 'n bestek van $-0,2$ MPa tot -1 MPa aangeteken. Die blaarwaterpotensiaalwaardes van

stedelike eike tydens die waarnemingstydperke in 1992 en 2018/2019 het dus meestal ooreengestem (dit is wel so dat verskillende bome gemeet is en dat die steekproef in hierdie studie groter was). Dieselfde bome as dié van vorige studies kon nie ingesluit word nie, aangesien hulle ligging nie bekend was nie. Die basale Ψ_{blaar} wat in hierdie studie aangeteken is, vergelyk goed met wat Bussotti *et al.* (2002) vir stedelike *Q. ilex*-bome aangeteken het, naamlik tussen 0 en $-1,5$ vir bome in 'n droë klimaat. Die gemiddelde basale Ψ_{blaar} van alle bome was ook vergelykbaar met die resultate van Bussotti *et al.* (2002) vir *Q. ilex*-bome, naamlik -1 MPa of hoër. Gevolglik is dit onwaarskynlik dat die straatbome in die huidige studie aan waterstres ly, in teenstelling met die gangbare aanname dat die bome in droër gebiede aan 'n erge watertekort ly. Hierdie bevinding word verder ondersteun deur data van Sancho-Knapik *et al.* (2018), waarvolgens goed benatte *Q. ilex* voordagse waterpotensiaalwaardes tussen $-0,1$ MPa en $-3,0$ MPa het. Dit weerspreek die bevindinge van Van Rensburg, *et al.* (1997a), waarvolgens bome met waterpotensiale tussen $-0,9$ MPa en $-1,2$ MPa aan watertekortstres ly. Die 1997studie het op die beskikbare navorsing van die tyd gesteun; sedertdien is nuwe navorsing gepubliseer (Arend *et al.*, 2012; Deligöz & Bayar, 2018; Sancho-Knapik *et al.*, 2018; Selig & Böhne, 2017) en kan die verskillende interpretasies toegeskryf word aan nuwe data oor wat as watertekort beskou moet word, sowel as nuwe metings van waterinhoud, onder andere stamwaterinhoud (Zhou *et al.*, 2018). Bowendien word *Q. robur* as 'n droogtebestande spesie beskou en ter wille van die aanpassing daarvan by 'n watertekort deur diep wortelsisteme regoor die wêreld as straatbome gekies (Arend *et al.*, 2012; Deligöz & Bayar, 2018; Scharnweber *et al.*, 2011; Thomsen *et al.*, 2020; Van Hees, 1997).

Hoewel bome in die ondeurdringbare oppervlak-groep lae waterpotensiaalwaardes getoon het, blyk dit nie die fotosintetiese vermoëns van hierdie bome te affekteer nie (boom 1A–1E, 2A–2C, 4A–4E, 6A–6C, 7A–7D, 8A–8E en 9A–9E), soos aan die PI_{TOTAAL} en F_w/F_m -waardes gesien kan word (Figuur 9 en 10). Bome het oor die algemeen 'n afname van waterpotensiaal sowel as PI_{TOTAAL} van Desember 2018 tot Maart 2019 getoon. Hierdie verskil was egter nie statisties beduidend nie. Moontlike verklarings vir hierdie afname kan laer waterbeskikbaarheid (hoewel nie 'n watertekort nie) en beperkte fotosintetiese aktiwiteit van mesofil weens laer temperatuur in Maart 2019 as in Desember 2018 wees (Garcia-Plazaola *et al.*, 1997). Dis egter duidelik dat 'n afname in waterbeskikbaarheid nie direk aan verlaagde PI_{TOTAAL} -waardes gekoppel kan word nie. Boom 3B, 3C en 9D het byvoorbeeld die laagste PI_{TOTAAL} -waardes in Maart 2019 gehad, maar geen watertekort getoon nie (Figuur 8 en Blyae B).

Daar is getoon dat *Q. ilex* wat nie aan ernstige watertekort (-3 MPa) blootgestel is nie, konstante F_w/F_m -waardes behou (Sancho-Knapik *et al.*, 2018) – dit is ook soos in Figuur 10 gesien kan word by *Q. robur* die geval. Živčák *et al.* (2008) vind dat PI_{TOTAAL} 'n meer betroubare aanduiding van FSII-aktiwiteit is as F_w/F_m (Figuur 9 en 10). Verdere ondersoek van die faktore wat bydra tot boomvitaliteit behoort dus gedoen te word met die oog op verbeterde bewaring en opvolging. Verder kan

waterpotensiaal en chlorofil *a*-fluoresensiemetings herhaal word ten einde tendense in verandering weens grondverdichting of ander oorsake vas te stel.

Wat voedingstofinhoud betref, het die klipgruisgroep 'n hoër kalsiumvlak getoon as die ander groepe; dit kan potensieel toegeskryf word aan logging vanuit gruis in die grondoplossing in (Liu *et al.*, 2022). In teenstelling daarmee het die ondeurdringbare oppervlak-, die tuin-/grasperkbedekking- en die kontrolegroep laer kalsiumwaardes getoon as die gemiddelde van *Quercus*-spesies ($<8\ 400\ \text{mg kg}^{-1}$) (Burgess *et al.*, 2015), wat op kalsiumtekort kan dui (sien Bylaag A). Kalsium is 'n noodsaaklike voedingstof wat in verskeie fisiologiese prosesse 'n rol speel – dit maak deel uit van selwande, dien as boodskappers in metabolisme prosesse en as regulerende komponente tydens fotosintese (Ridolfi *et al.*, 1996). Verder kan 'n kalsiumtekort verminderde stomatale beweging teweegbring en dus die watertoestand binne plante asook CO_2 -assimilerings beïnvloed (Ridolfi *et al.*, 1996). 'n Kalsiumtekort kan dus duidelik nadelige gevolge inhou vir die vitaliteit van bome. Dit speel egter waarskynlik 'n klein rol by die Eikelaan, aangesien die bome in natuurlike gebiede soortgelyke lae kalsiumvlakke getoon het (Bylaag A).

Hoewel die resultate op hoë kaliumvlakke in die meeste *Q. robur*-bome gedui het, behels dit nie noodwendig toksiese kaliumvlakke nie. Kalium is die mees algemene katioon in plante en 'n onontbeerlike voedingstof vir plantmetabolisme – kaliumtoksisiteit is gevolglik baie skaars in plante (Mäser *et al.*, 2002). 'n Moontlike verklaring vir die statistiese beduidende hoër vlak van kalium in die klipgruisgroep as Groep 1, is dat kalium mettertyd uit gruis in die grond vrygestel word, en dus tot hoër kaliumvlakke in die grond self kan lei (Liu *et al.*, 2022). Dieselfde geld vir die verryking van magnesium, kalsium, chroom en natrium, sowel as sink, yster, silika, koolstof en stikstof (Liu *et al.*, 2022).

Ander voedingstowwe waarvan hoër of laer vlakke aangeteken is, was egter steeds binne die aanvaarbare spesifieke interval vir *Quercus*-bome (Burgess *et al.*, 2015). Die resultate van ander voedingstowwe het nie toksisiteit of tekort aangedui nie en het dus nie die straatbome se vitaliteit beïnvloed nie.

Hoewel die F_w/F_m -waardes 'n beduidende verskil tussen bome in die Klipgruis groep en die res van die bome, was hierdie F_w/F_m -waardes steeds hoog genoeg om nie op fisiologiese stres te dui nie. F_w/F_m toon eers 'n afname by ernstige waterstres teen -3Mpa (Sancho-Knapik *et al.*, 2018). Nietemin, aangesien PI_{TOTAAL} ook laer waardes getoon het vir bome in die Klipgruisgroep, toon dit fisiologiese stres wat duidelik nie deur watertekort veroorsaak word nie. Hoe dit ook al sy, slegs hierdie twee parameters van chlorofilfluoresensie is bespreek en vele ander sou in toekomstige diepgaande studies rakend fluorensie-data ondersoek kon word. Voedingstof- / elementalanalise toon dat die meerderheid van voedingstowwe (magnesium, fosfaat, yster, mangaan, nikkel, sink) binne normale vlakke val vir *Quercus*-bome. Ons gevolgtrekking is dat resultate getoon het eikebome wat aan die Universiteit grens, ly nie aan watertekort nie, maar toon aanvaarbare vlakke van water, in teenstelling met die

resultate van Van Rensburg, *et al.* (1997a). Dit dui daarop dat watertekort as die hooforsaak van eikafsterwe in Potchefstroom uitgeskakel kan word. Daar word dus voorgestel dat daar dieper gedelf word in die fluorensiedata asook dat lugbesoedelingstudies uitgevoer word, sowel as herhaling van die fisiologiese en ekologiese studies, ten einde 'n bestuursplan op te stel om hierdie bome te bewaar. Verder is dit van kritieke belang dat daar ook biodiversiteitsstudies op die bome uitgevoer word om te bepaal watter ander organismes op hierdie bome as 'n habitat vir oorlewing staatmaak. Verder word die bestudering van die effek van uitlaatgasse op die bome aanbeveel. Intussen word ook voorgestel dat die bome vir enige drastiese veranderinge in hulle vitaliteit gemoniteer word. Die oorsaak van die terugsterwing van die bome moet eers met sekerheid bepaal word voordat bestuursplanne, soos die plant van nuwe bome of die skepping van tuine onder die bome, of selfs kunsmis-toediening of plaagbeheer, suksesvol uitgevoer kan word.

Gevolgtrekking

Die hipotese was dat ondeurdringbare oppervlakke soos sypaadjies of teer, wat tipies van stedelike omgewings is, 'n negatiewe uitwerking op die vitaliteit van die bome in die Potchefstroomse Eikelaan het. Dit is deels bevestig, aangesien die ondeurdringbare oppervlak as grondbedekking 'n waarneembare negatiewe effek het op waterspanning in bome en visuele boomgesondheid. Hierdie effek het egter nie gekorreleer met 'n watertekort nie, al is laer ψ_{blaar} aangeteken en swakker ander vitaliteitsindekse gemeet. Na aanleiding van die bespreking van die resultate wat verkry is, kan die gevolgtrekking gemaak word dat bome in die Eikelaan in Potchefstroom aan omgewingstres ly en visuele afsterwe toon. Hierdie bome ervaar egter nie droogtestres nie, dus is ander faktore waarskynlik vir die kwynende vitaliteit van die bome verantwoordelik. Hierdie faktore kan volgens die Manionkwyningspiraal (Bulaon & MacKenzie, 2007) gekategoriseer word, naamlik bestaande vatbaarheidsfaktore soos die gevolge van ouderdom en lugbesoedeling, ontkeningsfaktore soos ontblarende insekte en bydraende faktore soos kankerswamme en parasiete.

Daar word aanbeveel dat fisiologiese en ekologiese data-versameling herhaal word ten einde tendense in waterinhoud en fotosintetiese aktiwiteit vas te stel. Dit kan ook help om die deurlopende vitaliteit van *Q. robur*-bome in die Eikelaan te monitor. Verder kan toekomstige studies boomvitaliteit takseer deur middel van boomringisotope ('n nievernietigende metode) en grondmonsterstudies, en deur studies van waterpotensiaal en chlorofilfluoresensie te herhaal. Bestudering van klimaatdata word ook voorgestel, sowel as die moontlike teenwoordigheid van bekende plae van *Quercus*-bome, onder andere die herbi-voriese stompkopkewer (*Euwallacea fornicatus*).

Erkennings

My opregte dank aan my studieleiers, prof. Jacques Berner en prof. Sarel Cilliers, vir die geleentheid om hierdie navorsing te doen en vir omvangryke leiding en ondersteuning. 'n Woord van dank ook aan my broer Hardus Ludick vir die taalversorging van hierdie manuskrip.

Befondsingsbronne

Ek dank graag InteliGro Noord, die Noordwes-Universiteit en die Suid-Afrikaanse Akademie vir Wetenskap en Kuns vir ruim befondsing waarsonder hierdie navorsing nie moontlik sou wees nie.

Bydrae van elke outeur

Al vier outeurs voldoen aan elk die volgende vereistes:

- Wesenlike bydraes tot die totstandkoming **of** vormgewing van die werk; **of** die verkryging, ontleding, of interpretasie van data vir die werk; **EN**
- Konseptualisering van die werk **of** kritiese hersiening van die werk vir belangrike intellektuele inhoud; **EN**
- Finale goedkeuring van die weergawe wat gepubliseer gaan word; **EN**
- Ooreenkoms om aanspreeklik te wees vir alle aspekte van die werk om te verseker dat vrae oor die akkuraatheid en integriteit van enige gedeelte van die werk behoorlik ondersoek en opgeklaar word.

Datums

Ingedien: 28/07/2022
Aanvaar: 04/05/2023
Gepubliseer: 01/06/2023

Bibliografie

- Abadia, J., 1993, Iron and plant pigments. *Iron chelation in plants and soil microorganisms* 327-343. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-079870-4.50020-X>.
- Adesoye, P.O., Dondofema, F., 2021, Assessing and classifying the health and risk status of avenue trees, *Arboricultural Journal*, 43(2), 93-114. <https://doi.org/10.1080/03071375.2021.1903210>.
- Allison, R.B., Wang, X., 2015, Chapter 7: Nondestructive Testing in the Urban Forest. In: USDA Forest Service. Forest Products Laboratory, General Technical Report. pp. 77-86. <https://www.fs.usda.gov/treesearch/pubs/49380>.
- Améglio, T., Archer, P., Cohen, M., et al., 1999, Significance and limits in the use of predawn leaf water potential for tree irrigation, *Plant and Soil* 207(2), 155-167. <https://doi.org/10.1023/A:1026415302759>.
- Anon., 2017, The historic oak avenue of Potchefstroom may have a future. The Heritage Portal. <http://www.theheritageportal.co.za/notice/historic-oak-avenue-potchefstroom-may-have-future>. Accessed 21 March 2023.
- Arend, M., Brem, A., Kuster, T., et al., 2012, Seasonal photosynthetic responses of European oaks to drought and elevated daytime temperature, *Plant biology* 15(suppl. 1), 169-176. <https://doi.org/10.1111/j.1438-8677.2012.00625.x>.
- Baker, N.R., 2006, A possible role for photosystem II in environmental perturbation of photosynthesis, *Physiologia Plantarum* 81, 563-570. <https://doi.org/10.1111/j.1399-3054.1991.tb05101.x>.
- Bal, T.L., Storer, A.J., Jurgensen, M.F., et al., 2015, Nutrient stress predisposes and contributes to sugar maple dieback across its northern range: a review, *Forestry: An International Journal of Forest Research* 88(1), 64-83. <https://doi.org/10.1093/forestry/cpu051>.
- Bauerle, T.L., Richards, J.H., Smart, D.R., et al., 2008, Importance of internal hydraulic redistribution for prolonging the lifespan of roots in dry soil. *Plant, Cell & Environment*, 31(2):177-186. Doi: 10.1111/j.1365-3040.2007.01749.x <https://doi.org/10.1111/j.1365-3040.2007.01749.x>.
- Berland, A., Shiflett, S.A., Shuster, et al., 2017, The role of trees in urban stormwater management, *Landscape and Urban Planning* 162, 167-177. <https://doi.org/10.1016/j.landurbplan.2017.02.017>.
- Besson, C., Lobo-do-Vale, R., Rodrigues, M., et al., 2014, Cork oak physiological responses to manipulated water availability in a Mediterranean woodland, *Agricultural and Forest Meteorology* 184, 230-242. <https://doi.org/10.1016/j.agrformet.2013.10.004>.
- Bojórquez-Quintal, E., Escalante-Magaña, C., Echevarría-Machado, I., et al., 2017, Aluminum, a friend or foe of higher plants in acid soils, *Frontiers in Plant Science* 8, e1767. <https://doi.org/10.3389/fpls.2017.01767>.
- Bréda, N., Granier, A., Barataud, F., et al., 1995, Soil water dynamics in an oak stand, *Plant and Soil* 172(1), 17-27. <https://doi.org/10.1007/BF00020856>.
- Brun, F.G.K., Brun, E.J., Gerber, D., et al., 2017, Nutrition facts and limits for micronutrients in tree species used in urban forestry, *Anais da Academia Brasileira de Ciências* 89(3), 1881-1893. <https://doi.org/10.1590/0001-3765201720160785>.
- Bulaon, B., MacKenzie, M., 2007, Red fir decline and mortality on the Stanislaus National Forest. In: USDA Forest Service. FHP Report No. SS07-01.
- Burgess, J., Szlavetz, K., Rajakaruna, N., et al., 2015, Ecotypic differentiation of mid-Atlantic *Quercus* species in response to ultramafic soils, *Australian Journal of Botany* 63(4), 308-323. <https://doi.org/10.1071/BT14274>.
- Burley, H., Beaumont, L.J., Ossola, A., et al., 2019, Substantial declines in urban tree habitat predicted under climate change, *Science of the Total Environment* 685, 451-462. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.05.287>.
- Bussotti, F., Bettini, D., Grossoni, P., et al., 2002, Structural and functional traits of *Quercus ilex* in response to water availability, *Environmental and Experimental Botany* 47(1), 11-23. [https://doi.org/10.1016/S0098-8472\(01\)00111-3](https://doi.org/10.1016/S0098-8472(01)00111-3).
- Calfapietra, C., Peñuelas, J., Niinemets, Ü., 2015, Urban plant physiology: adaptation-mitigation strategies under permanent stress, *Trends in Plant Science* 20(2), 72-75. <https://doi.org/10.1016/j.tplants.2014.11.001>.
- Callow, D., May, P., Johnstone, D., 2018, Tree vitality assessment in urban landscapes, *Forests*, 9(5), e279. <https://doi.org/10.3390/f9050279>.
- Cavender-Bares, J., 2007, Chilling and freezing stress in live oaks (*Quercus* section *Virentes*): intra- and inter-specific variation in PS II sensitivity corresponds to latitude of origin, *Photosynthesis Research* 94(2-3), 437-453. <https://doi.org/10.1007/s11120-007-9215-8>.
- Čermák, J., Ulehla, J., Kučera, J., et al., 1982, Sap flow rate and transpiration dynamics in the full-grown oak (*Quercus robur* L.) in floodplain forest exposed to seasonal floods as related to potential evapotranspiration and tree dimensions, *Biologia Plantarum* 24(6), 446-460. <https://doi.org/10.1007/BF02880444>.
- Chen, W., He, Z.L., Yang, X.E., et al., 2010, Chlorine nutrition of higher plants: progress and perspectives, *Journal of Plant Nutrition* 33(7), 943-952. <https://doi.org/10.1080/01904160903242417>.
- Czaja, M., Kolton, A., Muras, P., 2020, The complex issue of urban trees-stress factor accumulation and ecological service possibilities, *Forests* 11(9), e932. <https://doi.org/10.3390/f11090932>.
- Daley, M.J., Phillips, N.G., 2006, Interspecific variation in nighttime transpiration and stomatal conductance in a mixed New England deciduous forest, *Tree Physiology* 26(4), 411-419. <https://doi.org/10.1093/treephys/26.4.411.d>.
- Deligöz, A.E., Bayar, E., 2018, Drought stress responses of seedlings of two oak species (*Quercus cerris* and *Quercus robur*), *Turkish Journal of Agriculture and Forestry* 42, 114-123.
- Esteban, R., Balaguer, L., Manrique, E., et al., 2009, Alternative methods for sampling and preservation of photosynthetic pigments and tocopherols in plant material from remote locations, *Photosynthesis Research* 101(1), 77-88. <https://doi.org/10.1007/s11120-009-9468-5>.
- García-Plazaola, J.I., Faria, T., Abadia, et al., 1997, Seasonal changes in xanthophyll composition and photosynthesis of cork oak (*Quercus suber* L.) leaves under Mediterranean climate, *Journal of Experimental Botany* 48(9), 1667-1674. <https://doi.org/10.1093/jxb/48.9.1667>.
- Gielen, B., Löw, M., Deckmyn, G., et al., 2006, Chronic ozone exposure affects leaf senescence of adult beech trees: a chlorophyll fluorescence approach, *Journal of Experimental Botany* 58(4), 785-795. <https://doi.org/10.1093/jxb/erl222>.
- Guo, W., Nazim, H., Liang, Z., et al., 2016, Magnesium deficiency in plants: An urgent problem, *The Crop Journal* 4(2), 83-91. <https://doi.org/10.1016/j.cj.2015.11.003>.
- Haque, I., 1987, Molybdenum in soils and plants and its potential importance to livestock nutrition, with special reference to sub-Saharan Africa, *ILCA Bulletin* 26, 20-28.
- Haynes, R., 1986, Uptake and assimilation of mineral nitrogen by plants. In: Haynes, R., ed. Mineral nitrogen in the plant-soil system. Orlando: Academic Press. pp. 303-378. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-334910-1.50010-8>.
- Hinckley, T., Lassoie, J., Running, S., 1978, Temporal and spatial variations in the water status of forest trees, *Forest Science* 24(suppl. 1), a0001-z0001.
- Hirons, A., 2015, Tree nutrition, *The Plantsman* 14(4), 236-241.
- Jim, C.Y., 2005, Outstanding remnants of nature in compact cities: patterns and preservation of heritage trees in Guangzhou city (China), *Geoforum* 36(3), 371-385. <https://doi.org/10.1016/j.geoforum.2004.06.004>.
- Johnstone, D., Moore, G., Tausz, M., et al., 2013, The measurement of plant vitality in landscape trees, *Arboricultural Journal*, 35(1), 18-27. <https://doi.org/10.1080/03071375.2013.783746>.
- Kaur, H., Garg, N., 2021, Zinc toxicity in plants: a review, *Planta* 253(6). <https://doi.org/10.1007/s00425-021-03642-z>.
- Kleiber, T., Krzyżaniak, M., Świerk, D., et al., 2019, How does the content of nutrients in soil affect the health status of trees in city parks? *PloS ONE* 14(9), e0221514. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0221514>.

- Klepper, B., 1968, Diurnal pattern of water potential in woody plants, *Plant Physiology* 43(12), 1931-1934. <https://doi.org/10.1104/pp.43.12.1931>.
- Krüger, G.H.J., Jordaan, A., Tiedt, L.R., et al., 2017, Opportunistic survival strategy of *Welwitschia mirabilis*: recent anatomical and ecophysiological studies elucidating stomatal behaviour and photosynthetic potential, *Botany* 95(12), 1109-1123. <https://doi.org/10.1139/cjb-2017-0095>.
- Kusaka, M., Pietkiewicz, S., Podlaski, S., et al., 2014, Photosynthetic efficiency of virginia mallow (*Sida hermaphrodita* (L.) Rusby) under differentiated soil moisture conditions, *International Journal of Sustainable Water and Environmental System* 6, 89-95.
- Liu, Q., Li, Y., Li, W., et al., 2022, Effect of the release of gravel elements on soil nutrients and Jujube fruit yield under wet-and-dry cycles, *Agronomy* 12, 2881. <https://doi.org/10.3390/agronomy12112881>.
- Martínez-Vilalta, J., Poyatos, R., Aguadé, D., et al., 2014, A new look at water transport regulation in plants, *New Phytologist* 204(1), 105-115. <https://doi.org/10.1111/nph.12912>.
- Mäser, P., Gierth, M., Schroeder, J.I., 2002, Molecular mechanisms of potassium and sodium uptake in plants. In: Horst, W.J., Bürkert, A., Claassen, N., Flessa, H., Frommer, W.B., Goldbach, H. ... v. Wirén, N., eds. *Progress in Plant Nutrition: Plenary Lectures of the XIV International Plant Nutrition Colloquium: Food security and sustainability of agro-ecosystems through basic and applied research*. Dordrecht: Springer Netherlands. pp. 43-54. https://doi.org/10.1007/978-94-017-2789-1_3.
- Mattheck, C., Breloer, H., 1994, Field guide for visual tree assessment (VTA), *Arboricultural Journal* 18(1), 1-23. <https://doi.org/10.1080/03071375.1994.9746995>.
- May, P., Livesley, S., Shears, I., 2013, Managing and monitoring tree health and soil during extreme drought in Melbourne, Victoria, *Urban Forestry & Urban Greening* 39, 136-145. <https://doi.org/10.48044/jauf.2013.019>.
- McCutchan, H., Shackel, K.A., 1992, Stem-water potential as a sensitive Indicator of water stress in prune trees (*Prunus domestica* L. cv. French), *Journal of the American Society for Horticultural Science* 117(4), 607-611. <https://doi.org/10.21273/JASHS.117.4.607>.
- Menzies, N., Lucia, S., 2009, The science of phosphorus nutrition: forms in the soil, plant uptake, and plant response, *Science* 18(09). Available from: <https://grdc.com.au/resources-and-publications/grdc-update-papers/tab-content/grdc-update-papers/2009/02/the-science-of-phosphorus-nutrition-forms-in-the-soil-plant-uptake-and-plant-response>.
- Merchant, A., Tausz, M., Arndt, S.K., et al., 2006, Cyclitols and carbohydrates in leaves and roots of 13 Eucalyptus species suggest contrasting physiological responses to water deficit, *Plant, Cell and Environment* 29(11), 2017-2029. <https://doi.org/10.1111/j.1365-3040.2006.01577.x>.
- Moyo, G.G., Chikuni, M., 2016, Influence of anthropogenic activities on the initial establishment and growth rate of introduced *Senna siamea* in Zomba-Malosa Forest Reserve, Malawi, *Open Science Journal* 1(4). <https://doi.org/10.23954/osj.v1i4.673>.
- Murchie, E.H., Lawson, T., 2013, Chlorophyll fluorescence analysis: a guide to good practice and understanding some new applications, *Journal of Experimental Botany* 64(13), 3983-3998. <https://doi.org/10.1093/jxb/ert208>.
- Nawaz, M.F., Bourrié, G., Trolard, F., 2013, Soil compaction impact and modelling. A review, *Agronomy for Sustainable Development* 33(2), 291-309. <https://doi.org/10.1007/s13593-011-0071-8>.
- Nieminen, T.M., Ukonmaanaho, L., Rausch, N., et al., 2007, Biogeochemistry of nickel and its release into the environment, *Metal Ions in Life Sciences* 2, 1-30. <https://doi.org/10.1002/9780470028131.ch1>.
- Nitschke, C., Nichols, S., Allen, K., et al., 2017, The influence of climate and drought on urban tree growth in southeast Australia and the implications for future growth under climate change, *Landscape and Urban Planning* 167, 275-287. <https://doi.org/10.1016/j.landurbplan.2017.06.012>.
- Nowak, D.J., 1993, Atmospheric carbon reduction by urban trees, *Journal of Environmental Management* 37(3), 207-217. <https://doi.org/10.1006/jema.1993.1017>.
- Nowak, D.J., Crane, D.E., 2002, Carbon storage and sequestration by urban trees in the USA, *Environmental Pollution* 116(3), 381-389. [https://doi.org/10.1016/S0269-7491\(01\)00214-7](https://doi.org/10.1016/S0269-7491(01)00214-7).
- Perez-Priego, O., Zarco-Tejada, P.J., Miller, J.R., et al., 2005, Detection of water stress in orchard trees with a high-resolution spectrometer through chlorophyll fluorescence in-filling of the O/sub 2/-A band, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 43(12), 2860-2869. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2005.857906>.
- Petrova, S., Yurukova, L., Velcheva, I., 2014, Assessment of the urban trees health status on the base of nutrient and pigment content in their leaves, *Journal of Biological Sciences and Biotechnology* 3(1), 69-77.
- Pollastrini, M., Holland, V., Brüggemann, W., et al., 2014, Interactions and competition processes among tree species in young experimental mixed forests, assessed with chlorophyll fluorescence and leaf morphology, *Plant Biology* 16(2), 323-331. <https://doi.org/10.1111/plb.12068>.
- Purvis, E.R., 1955, Minor elements in plant nutrition, review of role of molybdenum in soils and plants, *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 3(8), 666-669. <https://doi.org/10.1021/jf60054a001>.
- Raghavan, G.S.V., Alvo, P., McKyes, E., 1990, Soil compaction in agriculture: A view toward managing the problem. In: Lal, R. & Stewart, B.A., eds. *Advances in Soil Science: Soil Degradation Volume 11*. New York, Springer New York. pp. 1-36. https://doi.org/10.1007/978-1-4612-3322-0_1.
- Redillas, M.C.F., Jeong, J., Strasser, R., et al., 2011, JIP analysis on rice (*Oryza sativa* cv Nipponbare) grown under limited nitrogen conditions, *Journal of the Korean Society for Applied Biological Chemistry* 54(5), 827-832. <https://doi.org/10.1007/BF03253169>.
- Ridolfi, M., Rounsard, O., Garrec, J., et al., 1996, Effects of a calcium deficiency on stomatal conductance and photosynthetic activity of *Quercus robur* seedlings grown on nutrient solution, *Annales des Sciences Forestières* 53(2-3), 325-335. <https://doi.org/10.1051/forest:19960215>.
- Sæbø, A., Borzan, Z., Ducatillon, C., et al., 2005, The selection of plant materials for street trees, park trees and urban woodland. In: Schipperijn, J., Pillmann, W., Tyrvalinen, L., Mäkinen, K., & O'Sullivan, R., eds. *Urban Forests and Trees*. Dordrecht: Springer. pp. 257-280. https://doi.org/10.1007/3-540-27684-X_11.
- Samborska, I.A., Kalaji, H.M., Sieczko, L., et al., 2019, Can just one-second measurement of chlorophyll a fluorescence be used to predict sulphur deficiency in radish (*Raphanus sativus* L. *sativus*) plants? *Current Plant Biology* 19, 100096. <https://doi.org/10.1016/j.cpb.2018.12.002>.
- Sancho-Knapik, D., Mendoza-Herrer, Ó., Gil-Pelegrín, E., et al., 2018, Chl fluorescence parameters and leaf reflectance indices allow monitoring changes in the physiological status of *Quercus ilex* L. under progressive water deficit, *Forests* 9(7), 400. <https://doi.org/10.3390/f9070400>.
- Scalenghe, R., Ajmone Marsan, F., 2009, The anthropogenic sealing of soils in urban areas, *Landscape and Urban Planning* 90, 1-10. <https://doi.org/10.1016/j.landurbplan.2008.10.011>.
- Scharnweber, T., Manthey, M., Criegee, C., et al., 2011, Drought matters - Declining precipitation influences growth of *Fagus sylvatica* L. and *Quercus robur* L. in north-eastern Germany, *Forest Ecology and Management* 262(6), 947-961. <https://doi.org/10.1016/j.foreco.2011.05.026>.
- Scholander, P.F., Bradstreet, E.D., Hemmingsen, E.A., et al., 1965, Sap pressure in vascular plants: Negative hydrostatic pressure can be measured in plants, *Science* 148(3668), 339-346. <https://doi.org/10.1126/science.148.3668.339>.
- Selig, M., Bohne, H., 2017, Drought stress reactions of different populations of *Quercus robur* L. and *Tilia cordata* Mill, *Journal of Environmental Horticulture* 35(1), 6-12. <https://doi.org/10.24266/0738-2898-35.1.6>.
- Sepúlveda, P.J., Johnstone, D., 2018, A novel way of assessing plant vitality in urban trees, *Forests* 10(1), e2. <https://doi.org/10.3390/f10010002>.
- Shah, A.N., Tanveer, M., Shahzad, B., et al., 2017, Soil compaction effects on soil health and crop productivity: an overview, *Environmental Science and Pollution Research* 24(11), 10056-10067. <https://doi.org/10.1007/s11356-017-8421-y>.
- Sharma, A., Kapoor, D., Wang, J., et al., 2020, Chromium bioaccumulation and Its impacts on plants: an overview, *Plants* 9(1), 100. <https://doi.org/10.3390/plants9010100>.
- Shigo, A.L., 1991, Modern arboriculture: a systems approach to the care of trees and their associates. Durham: Shigo and Trees.
- Skiaadareis, G., Schwarz, J.A., Bauhus, J., 2019, Groundwater extraction in floodplain forests reduces radial growth and increases Summer drought sensitivity of Pedunculate oak trees (*Quercus robur* L.), *Frontiers in Forests and Global Change* 2(5), e1328. <https://doi.org/10.3389/ffgc.2019.00005>.
- Strasser, R., Srivastava, A., Tsimilli-Michael, M., 2000, The fluorescence transient as a tool to characterize and screen photosynthetic samples. In: Yunus, M., Pathre, U. & Mohanty, P., eds. *Probing photosynthesis: Mechanism, regulation and adaptation*. Boca Raton: CRC Press. pp. 445-483.
- Strasser, R., Tsimilli-Michael, M., Qiang, S., et al., 2010, Simultaneous in vivo recording of prompt and delayed fluorescence and 820-nm reflection changes during drying and after rehydration of the resurrection plant *Haberlea rhodopensis*, *Biochimica et Biophysica Acta* 1797, 1313-1326. <https://doi.org/10.1016/j.bbabio.2010.03.008>.
- Thomsen, S., Reisdorff, C., Gröngroft, A., et al., 2020, Responsiveness of mature oak trees (*Quercus robur* L.) to soil water dynamics and meteorological constraints in urban environments, *Urban Ecosystems*, 23, 1-14. <https://doi.org/10.1007/s11252-019-00908-z>.
- Van Hees, A., 1997, Growth and morphology of pedunculate oak (*Quercus robur* L.) and beech (*Fagus sylvatica* L.) seedlings in relation to shading and drought, *Annales des Sciences Forestières* 54(1), 9-18. <https://doi.org/10.1051/forest:19970102>.
- Van Rensburg, L., Krüger, G.H.J., Ubbink, B., et al., 1997a, A phytocentric perspective of *Asterolecanium quercicola* Bouché infestation on *Quercus robur* L. trees along an urbanization gradient, *South African Journal of Botany*, 63(1), 25-31. [https://doi.org/10.1016/S0254-6299\(15\)30688-8](https://doi.org/10.1016/S0254-6299(15)30688-8).
- Van Rensburg, L., Krüger, G.H.J., Ubbink, B., et al., 1997b, Seasonal performance of *Quercus robur* L. along an urbanization gradient, *South African Journal of Botany* 63(1), 32-36. [https://doi.org/10.1016/S0254-6299\(15\)30689-X](https://doi.org/10.1016/S0254-6299(15)30689-X).

- White, P.J., 2003, Calcium in plants, *Annals of Botany* 92(4), 487-511. <https://doi.org/10.1093/aob/mcg164>.
- Zhori, A., Meco, M., Brandl, H., et al., 2015, In situ chlorophyll fluorescence kinetics as a tool to quantify effects on photosynthesis in *Euphorbia cyparissias* by a parasitic infection of the rust fungus *Uromyces pisi*, *BMC Research Notes* 8(1). <https://doi.org/10.1186/s13104-015-1681-z>.
- Živčák, M., Brestič, M., Olšovská, K., et al., 2008, Performance index as a sensitive indicator of water stress in *Triticum aestivum* L, *Plant, Soil and Environment* 54(4), 133-139. <https://doi.org/10.17221/392-PSE>.
- Zukswert, J.M., Hallett, R., Bailey, S.W., et al., 2021, Using regional forest nutrition data to inform urban tree management in the northeastern United States, *Urban Forestry & Urban Greening* 57, e126917. <https://doi.org/10.1016/j.ufug.2020.126917>.

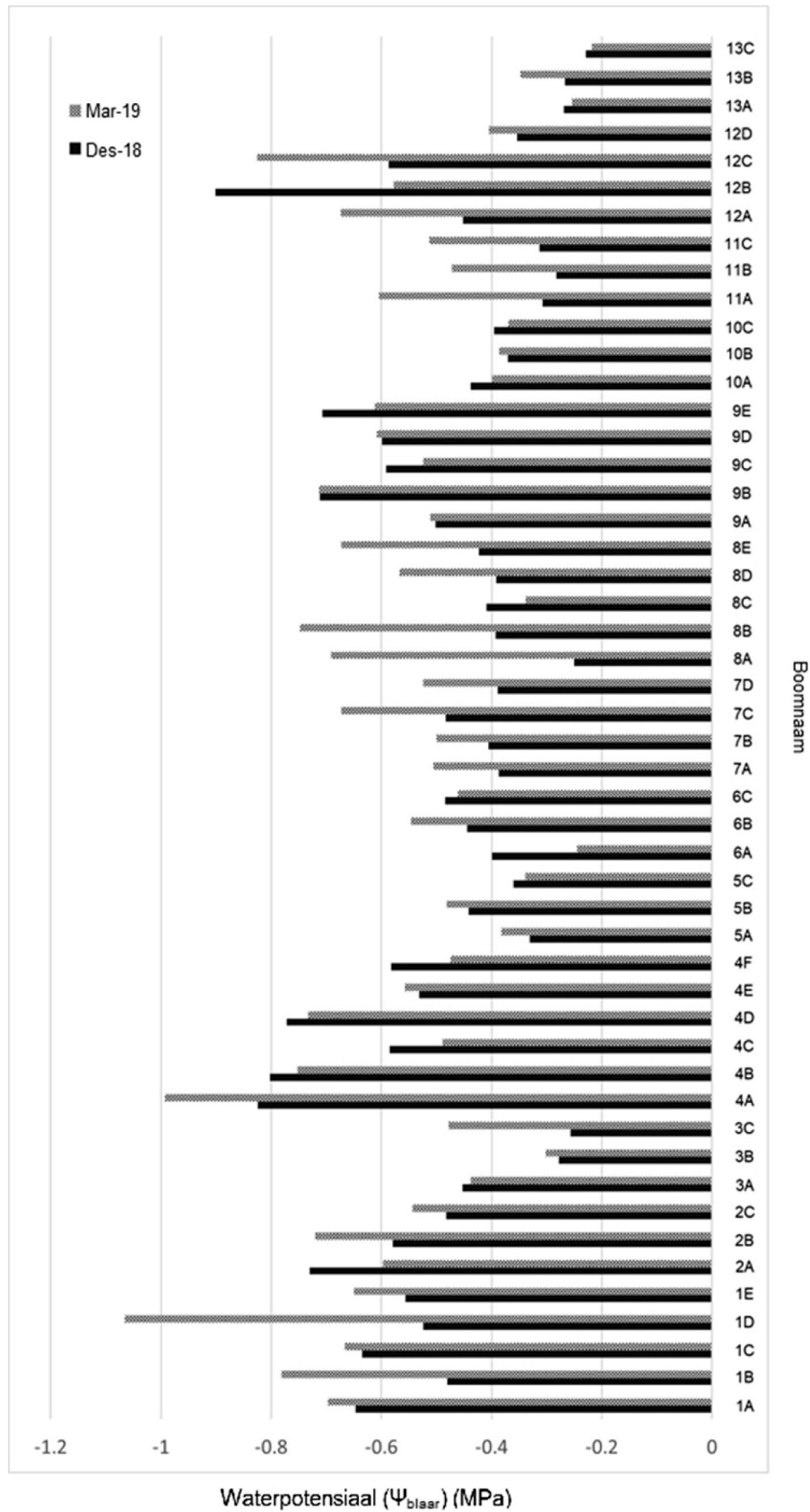
Bylaes

Bylae A: Mikro- en makrovoedingstowwe in plante, hul funksies en algemeen aanvaarbare hoeveelhede binne plante, asook die gemiddelde hoeveelhede in *Quercus*-spesies. Aangepas uit Hiron (2015).

Voedingstof	Funksie van voedingstof	Aanneemlike vlak (mg kg ⁻¹)*	Gemiddelde inhoud in stadsbome (mg kg ⁻¹)**	Gemiddelde inhoud in <i>Quercus</i> -spesies (mg kg ⁻¹ ***)
Mikrovoedingstowwe				
Aluminium (Al)	Plantgroeistimulering en bevordering van voedingstofopname, voorkoming van biotiese en abiotiese stres	1,0–2,0 (pH < 5,5)	30,3–505	35,4
Boor (B)	Speel 'n rol by lootgroeï en wortelverlenging, membraanfunksie en selwandstruktuur	20,0–60,0	12,0–70,0	
Chloor (Cl)	Osmoregulering, speel 'n rol in vorming van O ₂ tydens fotosintese	200–400		
Chroom (Cr)	Geen biologiese rol bekend, moontlik toksies			1,9
Koper (Cu)	Teenwoordig in proteïene, speel 'n rol by verhouting en stuif-meelvervaardiging	5,0–20,0	4,48–14,6	4,09
Yster (Fe)	Speel 'n rol in chlorofilsintese, deel van proteïene en ensieme	50,0–150,0	52,8–184,0	94,3
Mangaan (Mn)	Dien as ensieme en kofaktor vir ensieme, speel 'n rol in vorming van O ₂ tydens fotosintese	20–840,0	25,0–446,6	1167,6
Molibdeen (Mo)	Komponent van ensieme en kofaktore, ensiem vir fiksering van N ₂	0,1–4,8		
Nikkel (Ni)	Speel 'n rol in stikstofmetabolisme, komponent van ensieme	0,05–10		10,603
Sink (Zn)	Speel 'n rol in proteïensintese, koolhidraatmetabolisme en aktivering van ensieme, komponent van ensieme	20,0–200,0	9,51–43,8	20,2
Makrovoedingstowwe				
Kalsium (Ca)	Stabilisering van selwande en -membrane, seluitbreiding, osmoregulering, uitskeidingsprosesse	1 000–50 000	4 835– 18 435	8413,1
Koolstof (C)	Noodsaaklike komponent van organiese materiaal en nood-saaklik tydens fotosintese			46 9333
Magnesium (Mg)	Komponent van chlorofil, speel 'n rol in aktivering van ensieme en fosforilering	1 500–3 500	1 341–6 116	4391,9
Stikstof (N)	Komponent van proteïene, fosfolipiede, nukleïensuur, chlorofil, ko-ensieme, fitohormone en sekondêre metaboliete	15 000–50 000	1 440–2 600	15 233
Fosfor (P)	Komponent van ATF (energiemolekule), nukleïensuur, fosfolipiede, ko-ensieme, stysels en suikers	800–2 200	1 579–1 641	639,9
Kalium (K)	Speel 'n rol in ensiemaktivering, floëemvervoer, stresweerstand en regulering van stomatale opening, onderverdeling van proteïene	4 000–15 000	1 919–20 900	3642,7
Sulfaat (S)	Onderverdeling van aminosure, proteïene, ko-ensieme en sekondêre metaboliete, speel 'n rol in selweerstand teen ontwatering en rypskade	1 000–1 600	1 140–3 021	1174,8

*Waardes verkry vanuit Bojórquez-Quintal *et al.*, 2017; Brun *et al.*, 2017; Chen *et al.*, 2010; Guo *et al.*, 2016; Haque, 1987; Haynes, 1986; Kaur & Garg, 2021; Menzies & Lucia, 2009; Nieminen *et al.*, 2007; Purvis, 1955; Sharma *et al.*, 2020; White, 2003. ** Waardes verkry vanuit (Brun *et al.*, 2017; Petrova *et al.*, 2014; Zukswert *et al.*, 2021. *** Waardes verkry vanuit Burgess *et al.*, 2015.

Bylae B: Basale blaarwaterpotensiaal (Ψ_{blaar}) van individuele bome (1-50) soos aangeteken in Desember 2018 en Maart 2019



Bylae C: Opsomming van statistiese bevindinge van verskille in voedingstofwaardes in groepe, met mediaanwaardes asook *p*- en *z*-waardes. G1 = Ondeurdringbare oppervlak, G2 = Klipgruis, G3 = Tuin/grasperkbedekking, K = kontrole.

	G1-G2	G1-G3	G2-G3	G1-K	G2-K	G3-K
Berillium	G1: 0,001 G2: 0,002 <i>z</i> = -1,888 <i>p</i> = 0,059	G1: 0,001 G3: < 0,000 <i>z</i> = 2,548 <i>p</i> = 0,011*	G2: 0,002 G3: < 0,000 <i>z</i> = 3,097 <i>p</i> = 0,002*	G1: 0,001 K: 0,001 <i>z</i> = -1,888 <i>p</i> = 0,059	G2: 0,002 K: 0,001 <i>z</i> = 0,000 <i>p</i> = 1,000	G3: < 0,000 K: 0,001 <i>z</i> = -3,097 <i>p</i> = 0,002*
Natrium	G1: 11,57 G2: 16,75 <i>z</i> = -1,487 <i>p</i> = 0,137	G1: 11,57 G3: 7,379 <i>z</i> = 2,858 <i>p</i> = 0,004*	G2: 16,75 G3: 7,379 <i>z</i> = 2,878 <i>p</i> = 0,004*	G1: 11,57 K: 9,546 <i>z</i> = -0,126 <i>p</i> = 0,900	G2: 16,75 K: 9,546 <i>z</i> = 1,008 <i>p</i> = 0,313	G3: 7,379 K: 9,546 <i>z</i> = -1,593 <i>p</i> = 0,111
Magnesium	G1: 2 770 G2: 4 749 <i>z</i> = -1,729 <i>p</i> = 0,084	G1: 2 770 G3: 2 135 <i>z</i> = 1,984 <i>p</i> = 0,047*	G2: 4 749 G3: 2 135 <i>z</i> = 2,656 <i>p</i> = 0,008*	G1: 2 770 K: 1 884 <i>z</i> = 1,94 <i>p</i> = 0,052	G2: 4 749 K: 1 884 <i>z</i> = 2,717 <i>p</i> = 0,007*	G3: 2 135 K: 1 884 <i>z</i> = 0,807 <i>p</i> = 0,4195
Aluminium	G1: 22,72 G2: 40,89 <i>z</i> = -2,070 <i>p</i> = 0,038*	G1: 22,72 G3: 15,35 <i>z</i> = 2,530 <i>p</i> = 0,011*	G2: 40,89 G3: 15,35 <i>z</i> = 3,240 <i>p</i> = 0,001*	G1: 22,72 K: 16,96 <i>z</i> = 1,598 <i>p</i> = 0,11	G2: 40,89 K: 16,96 <i>z</i> = 2,717 <i>p</i> = 0,007*	G3: 15,35 K: 16,96 <i>z</i> = 0,203 <i>p</i> = 0,839
Fosfor	G1: 1 117 G2: 1 266 <i>z</i> = -1,31 <i>p</i> = 0,190	G1: 1 117 G3: 1 037 <i>z</i> = 1,116 <i>p</i> = 0,2645	G2: 1 266 G3: 1 037 <i>z</i> = 1,812 <i>p</i> = 0,07	G1: 1 117 K: 853,2 <i>z</i> = 2,358 <i>p</i> = 0,018*	G2: 1 266 K: 853,2 <i>z</i> = 2,717 <i>p</i> = 0,007*	G3: 1 037 K: 853,2 <i>z</i> = 1,650 <i>p</i> = 0,099
Kalium	G1: 7 278 G2: 10 450 <i>z</i> = -2,143 <i>p</i> = 0,032*	G1: 7 278 G3: 9 980 <i>z</i> = -3,001 <i>p</i> = 0,003*	G2: 10 450 G3: 9 980 <i>z</i> = 0,475 <i>p</i> = 0,635	G1: 7 278 K: 6 824 <i>z</i> = 0,315 <i>p</i> = 0,753	G2: 10 450 K: 6 824 <i>z</i> = 1,820 <i>p</i> = 0,068	G3: 9 980 K: 6 824 <i>z</i> = 1,845 <i>p</i> = 0,065
Kalsium	G1: 6 879 G2: 10 470 <i>z</i> = -2,385 <i>p</i> = 0,017*	G1: 6 879 G3: 7 107 <i>z</i> = 0,717 <i>p</i> = 0,474	G2: 10 470 G3: 7 107 <i>z</i> = 2,621 <i>p</i> = 0,009*	G1: 6 879 K: 5 752 <i>z</i> = 0,962 <i>p</i> = 0,336	G2: 10 470 K: 5 752 <i>z</i> = 2,479 <i>p</i> = 0,013	G3: 7107 K: 5752 <i>z</i> = 0,538 <i>p</i> = 0,590
Vanadium	G1: 0,443 G2: 0,583 <i>z</i> = -0,168 <i>p</i> = 0,866	G1: 0,443 G3: 0,329 <i>z</i> = 2,726 <i>p</i> = 0,006*	G2: 0,583 G3: 0,329 <i>z</i> = 1,565 <i>p</i> = 0,118	G1: 0,443 K: 0,183 <i>z</i> = 3,198 <i>p</i> = 0,001*	G2: 0,583 K: 0,183 <i>z</i> = 2,493 <i>p</i> = 0,013*	G3: 0,329 K: 0,183 <i>z</i> = 1,612 <i>p</i> = 0,107
Chroom	G1: 1,98 G2: 2,323 <i>z</i> = 0,118 <i>p</i> = 0,906	G1: 1,98 G3: 1,456 <i>z</i> = 2,734 <i>p</i> = 0,006*	G2: 2,323 G3: 1,456 <i>z</i> = 1,299 <i>p</i> = 0,194	G1: 1,98 K: 1,047 <i>z</i> = 3,257 <i>p</i> = 0,001*	G2: 2,323 K: 1,047 <i>z</i> = 2,324 <i>p</i> = 0,020*	G3: 1,456 K: 1,047 <i>z</i> = 1,664 <i>p</i> = 0,096
Mangaan	G1: 127,9 G2: 106,4 <i>z</i> = -0,189 <i>p</i> = 0,850	G1: 127,9 G3: 72,77 <i>z</i> = 3,833 <i>p</i> < 0,000*	G2: 106,4 G3: 72,77 <i>z</i> = 2,1557 <i>p</i> = 0,031*	G1: 127,9 K: 635 <i>z</i> = -2,269 <i>p</i> = 0,023*	G2: 106,4 K: 635 <i>z</i> = -1,540 <i>p</i> = 0,124	G3: 72,77 K: 635 <i>z</i> = -4,119 <i>p</i> = 0,000*
Yster	G1: 82,36 G2: 116,5 <i>z</i> = -1,815 <i>p</i> = 0,07	G1: 82,36 G3: 55,75 <i>z</i> = 2,922 <i>p</i> = 0,004*	G2: 116,5 G3: 55,75 <i>z</i> = 3,221 <i>p</i> = 0,001*	G1: 82,36 K: 69,62 <i>z</i> = 1,513 <i>p</i> = 0,130	G2: 116,5 K: 69,62 <i>z</i> = 2,464 <i>p</i> = 0,014*	G3: 55,75 K: 69,62 <i>z</i> = -0,08 <i>p</i> = 0,937
Kobalt	G1: 0,139 G2: 0,158 <i>z</i> = -1,748 <i>p</i> = 0,080	G1: 0,139 G3: 0,123 <i>z</i> = 1,954 <i>p</i> = 0,051	G2: 0,158 G3: 0,123 <i>z</i> = 2,658 <i>p</i> = 0,008*	G1: 0,139 K: 0,120 <i>z</i> = 0,445 <i>p</i> = 0,656	G2: 0,158 K: 0,120 <i>z</i> = 1,624 <i>p</i> = 0,104	G3: 0,123 K: 0,120 <i>z</i> = -0,588 <i>p</i> = 0,557

* Dui op statisties beduidende verskille (*p* > 0.05).

Bylae C: Opsomming van statistiese bevindinge van verskille in voedingstofwaardes in groepe, met mediaanwaardes asook *p*- en *z*-waardes. G1 = Ondeurdringbare oppervlak, G2 = Klipgruis, G3 = Tuin/grasperkbedekking, K = kontrole. (vervolg)

	G1-G2	G1-G3	G2-G3	G1-K	G2-K	G3-K
Nikkel	G1: 2,613 G2: 2,366 <i>z</i> = -0,123 <i>p</i> = 0,902	G1: 2,613 G3: 1,973 <i>z</i> = 3,746 <i>p</i> < 0,000*	G2: 2,366 G3: 1,973 <i>z</i> = 2,049 <i>p</i> = 0,041*	G1: 2,613 K: 2,246 <i>z</i> = 0,860 <i>p</i> = 0,39	G2: 2,366 K: 2,246 <i>z</i> = 0,728 <i>p</i> = 0,467	G3: 1,973 K: 2,246 <i>z</i> = -1,120 <i>p</i> = 0,263
Sink	G1: 170 G2: 177,8 <i>z</i> = -1,195 <i>p</i> = 0,232	G1: 170 G3: 143,2 <i>z</i> = 3,371 <i>p</i> = 0,001*	G2: 177,8 G3: 143,2 <i>z</i> = 2,867 <i>p</i> = 0,004*	G1: 170 K: 138,4 <i>z</i> = 2,606 <i>p</i> = 0,009*	G2: 177,8 K: 138,4 <i>z</i> = 2,815 <i>p</i> = 0,005*	G3: 143,2 K: 138,4 <i>z</i> = 0,721 <i>p</i> = 0,471
Arseen	G1: 0,147 G2: 0,191 <i>z</i> = -0,776 <i>p</i> = 0,438	G1: 0,147 G3: 0,121 <i>z</i> = 1,966 <i>p</i> = 0,049*	G2: 0,191 G3: 0,121 <i>z</i> = 1,747 <i>p</i> = 0,081	G1: 0,147 K: 0,095 <i>z</i> = 3,044 <i>p</i> = 0,002*	G2: 0,191 K: 0,095 <i>z</i> = 2,829 <i>p</i> = 0,005*	G3: 0,121 K: 0,095 <i>z</i> = 1,859 <i>p</i> = 0,063
Rubidium	G1: 15,88 G2: 8,329 <i>z</i> = 2,408 <i>p</i> = 0,016*	G1: 15,88 G3: 16,08 <i>z</i> = 0,080 <i>p</i> = 0,936	G2: 8,329 G3: 16,08 <i>z</i> = -2,231 <i>p</i> = 0,026*	G1: 15,88 K: 8,636 <i>z</i> = 1,916 <i>p</i> = 0,055	G2: 8,329 K: 8,636 <i>z</i> = -0,364 <i>p</i> = 0,716	G3: 16,08 K: 8,636 <i>z</i> = 1,767 <i>p</i> = 0,077
Silwer	G1: 0,181 G2: 0,323 <i>z</i> = -1,962 <i>p</i> = 0,05*	G1: 0,181 G3: 0,097 <i>z</i> = 1,872 <i>p</i> = 0,061	G2: 0,323 G3: 0,097 <i>z</i> = 2,818 <i>p</i> = 0,005*	G1: 0,181 K: 0,088 <i>z</i> = 1,707 <i>p</i> = 0,088	G2: 0,323 K: 0,088 <i>z</i> = 2,717 <i>p</i> = 0,007*	G3: 0,097 K: 0,088 <i>z</i> = 0,645 <i>p</i> = 0,519
Kadmium	G1: 0,012 G2: 0,012 <i>z</i> = -0,183 <i>p</i> = 0,855	G1: 0,012 G3: 0,006 <i>z</i> = 2,636 <i>p</i> = 0,008*	G2: 0,012 G3: 0,006 <i>z</i> = 1,532 <i>p</i> = 0,125	G1: 0,012 K: 0,008 <i>z</i> = 1,292 <i>p</i> = 0,196	G2: 0,012 K: 0,008 <i>z</i> = 1,092 <i>p</i> = 0,275	G3: 0,006 K: 0,008 <i>z</i> = -0,140 <i>p</i> = 0,889
Antimoon	G1: 0,045 G2: 0,062 <i>z</i> = -2,154 <i>p</i> = 0,031*	G1: 0,045 G3: 0,041 <i>z</i> = 1,704 <i>p</i> = 0,088	G2: 0,062 G3: 0,041 <i>z</i> = 2,912 <i>p</i> = 0,004*	G1: 0,045 K: 0,034 <i>z</i> = 2,876 <i>p</i> = 0,004*	G2: 0,062 K: 0,034 <i>z</i> = 3,725 <i>p</i> < 0,000*	G3: 0,041 K: 0,034 <i>z</i> = 1,836 <i>p</i> = 0,066
Barium	G1: 11,12 G2: 17,37 <i>z</i> = -1,850 <i>p</i> = 0,064	G1: 11,12 G3: 10,79 <i>z</i> = -0,471 <i>p</i> = 0,638	G2: 17,37 G3: 10,79 <i>z</i> = 1,504 <i>p</i> = 0,133	G1: 11,12 K: 25,33 <i>z</i> = -2,342 <i>p</i> = 0,019*	G2: 17,37 K: 25,33 <i>z</i> = -0,364 <i>p</i> = 0,716	G3: 10,79 K: 25,33 <i>z</i> = -1,968 <i>p</i> = 0,049*
Tallium	G1: 0,022 G2: 0,009 <i>z</i> = 2,267 <i>p</i> = 0,023*	G1: 0,022 G3: 0,009 <i>z</i> = 2,881 <i>p</i> = 0,004*	G2: 0,009 G3: 0,009 <i>z</i> = -0,654 <i>p</i> = 0,513	G1: 0,022 K: 0,007 <i>z</i> = 2,531 <i>p</i> = 0,011*	G2: 0,009 K: 0,007 <i>z</i> = 0,196 <i>p</i> = 0,845	G3: 0,009 K: 0,007 <i>z</i> = 0,903 <i>p</i> = 0,367
Bismut	G1: 0,003 G2: 0,004 <i>z</i> = -1,538 <i>p</i> = 0,124	G1: 0,003 G3: 0,003 <i>z</i> = -0,845 <i>p</i> = 0,398	G2: 0,004 G3: 0,003 <i>z</i> = 1,016 <i>p</i> = 0,31	G1: 0,003 K: 0,002 <i>z</i> = 2,168 <i>p</i> = 0,030*	G2: 0,004 K: 0,002 <i>z</i> = 2,745 <i>p</i> = 0,006*	G3: 0,003 K: 0,002 <i>z</i> = 2,483 <i>p</i> = 0,013*

* Dui op statisties beduidende verskille (*p* > 0,05).

Sirkoon as voerstof vir sirkoniumgebaseerde chemikalieë, keramieke, die metaal en sy legerings: 'n Oorsigartikel

SJ Lubbe,¹ PL Crouse^{1,2}

¹Zirconox Eiendoms Bpk, Suid-Afrika

²Departement Chemiese Ingenieurswese, Universiteit van Pretoria, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: SJ Lubbe **E-pos:** salmon.lubbe@zirconoxglobal.co.za

Suid-Afrika is die tweedegrootste internasionale produsent van sirkoon. Plaaslike veredeling is egter minimaal, ondanks die aantreklike markgeleentheid vir sirkoniumgebaseerde produkte. Daar is verskeie goed ontwikkelde prosesse vir die vervaardiging van 'n reeks sirkoniumchemikalieë. Hierdie chemikalieë kan op hul beurt gebruik word om monokliniese sowel as gestabiliseerde sirkoniumoksiede te berei. In die meeste van die prosesse word sirkoniumoksichloriedoktahidraat – ook na aanleiding van die Engels bekend as ZOC – as voerstof gebruik. Sirkonium is inert en nie giftig nie, en kan daarom in verskeie toepassings gebruik word. Dit sluit in mediese implantate, antiperspirante en selfs as absorbeermiddels gedurende bloeddialise om ammoniak te absorbeer. Sirkoniumoksiedgebaseerde keramieke het ook verskeie toepassings in aggressiewe industriële prosesse as gevolg die hardheid en inerte karakter van die materiaal. Hierdie artikel gee 'n oorsig van die prosesserings- en sinteseroetes tussen die mineraal en die finale produkte, sowel as die voerchemikalieë, met klem op die plaaslike konteks.

Trefwoorde: sirkoon, sirkoniumchemie, sirkoniumoksichloried-oktahidraat, sirkonia, sirkoniumchemikalieë

Zircon as feedstock for zirconium chemicals, ceramics, the metal and alloys: A review: South Africa is the second largest producer of zircon internationally. Local beneficiation of the mineral is minimal at present, despite the very attractive market opportunity zirconium-based products present. Several well-developed processes for the production of a range of zirconium chemicals exist. These chemicals can in their turn be used to prepare monoclinic and stabilised zirconium oxides. In the majority of cases zirconium oxychloride octahydrate – generally referred to as ZOC – is used as precursor. Zirconium-based products are generally inert and non-toxic, and may be used in several applications. These include medical implants, anti-perspirants, and even as ammonia absorbents during blood dialysis. Zirconium oxide ceramics also have many applications in medical and industrial applications due to their hardness, chemical inertness and corrosion resistance. This review provides an overview of the processing and synthesis routes between the mineral and these final products, as well as the gateway products. The local context is emphasised.

Keywords: zircon, zirconium chemistry, zirconium oxychloride octahydrate, zirconium chemicals, zirconia

Inleiding

Suid-Afrika beskik oor ruim sirkoonbronne. Ons voer uit, maar veredel omtrent nie, ten spyte van die feit dat die prosesserings- en sinteseroetes standaard en onproblematis is – behalwe vir die teenwoordigheid van radioaktiewe elemente in die mineraal se kristalrooster en die vereiste van noukeurige aandag aan die verwerkingsprosesse. Hierdie artikel gee 'n breë oorsig van die relevante prosesseringsroetes, die gebruike van sirkoniumgebaseerde chemikalieë, en die internasionale markte. Die sirkoniumproduklys sluit in chemies reaktiewe sirkoniumchemikalieë; versmelte en chemies gepresipiteerde sirkonia – gestabiliseer en ongestabiliseer; anorganiese sirkonate; sirkoniakeramieke; die metaal en legerings daarvan. Die mees algemene produkte word hier bespreek.

Markte en gebruike

Die mineraal sirkoon

Sirkoon is die mees algemene en wydverspreide kommersiële mineraal, en is oorspronklik geassosieer met stollingsgesteentes. 'n Kombinasie van verwerking en natuurlike konsentrasieprosesse – as gevolg van sy hoë digtheid ($4,6 \text{ g/cm}^3$) – het gelei tot groot sekondêre neerslae wat nou in sandstrande gevind word. Die afsettings word gewoonlik geassosieer met die titaanminerale rutiel en ilmeniet, sowel as seldsameaardeafsettings soos monasiet.

Suid-Afrika en Australië het albei 'n oorvloed sirkoon, ook bekend as sirkoniumsilikaat (ZrSiO_4). Suid-Afrika is die tweedegrootste produsent van sirkoon ter wêreld naas Australië (Roskill 2011), gevolg deur die VSA. (UxC Consulting Services 2011). Die internasionale verskaffers van sirkoon word skematies in Figuur 1 getoon.

In Suid-Afrika word sirkoon geassosieer met swaarmineraal-strandafsettings aan die kus van KwaZulu-Natal, die Oos-Kaap en aan die weskus van die Wes-Kaap. Dit word ontgin deur:

- Richards Bay Minerals (RioTinto) met 'n kapasiteit van sowat 300 000 ton per jaar; en
- Namakwa Sands en KZN Sands, albei bedryf deur Tronox Exxaro, met 'n gesamentlike kapasiteit van sowat 170 000 ton per jaar.

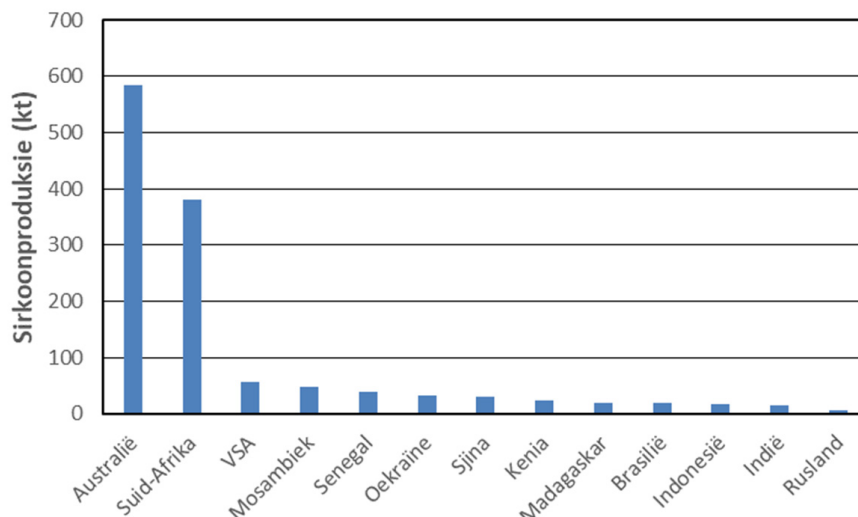
In 2010 het Suid-Afrika sowat 381 000 ton sirkoon geproduseer, wat 29% van die totale wêreldproduksie verteenwoordig het. Wêreldproduksie het toe 1 294 miljoen ton beloop, met 'n vraag van meer as 1 400 miljoen ton. Die Verenigde State se Geologiese Opname skat dat ekonomies ontginbare reserwes van sirkoon in Suid-Afrika 14 miljoen ton, oftewel 37% van die wêreldtotaal, beloop (US Geological Survey (USGS), 2011).

Iluka Resources, met aktiwiteite in Victoria en Wes-Australië, is die dominante sirkoonprodusent in Australië en het 'n geraamde kapasiteit van 500 000 ton per jaar in 2010 gehad, ongeveer

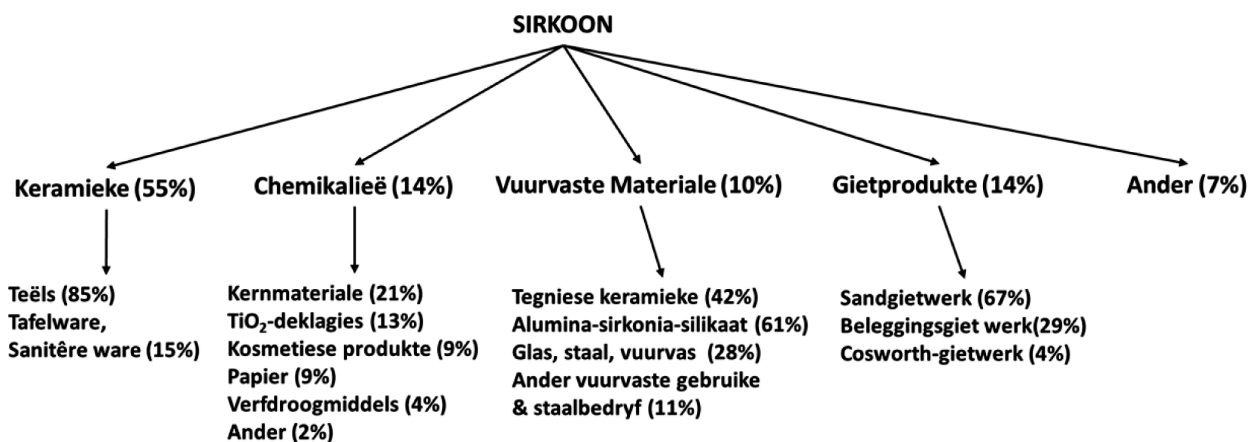
een derde van die wêreld se sirkoonverbruik (Roskill 2011). Iluka produseer hoofsaaklik premiumgraad sirkoon as 'n glasuurbasislaag vir die keramiekbedryf. TiWest en Bemax Resources is twee kleiner Australiese produsente.

Ander groot produserende lande is die VSA met 100 000 ton per jaar (8%) en China met 70 000 ton per jaar (5%).

'n Oorsig van die toepassings vir sirkoongebaseerde produkte word in Figuur 2 getoon. Sirkoon se hooftoepassing is as 'n glasuuronderlaag op keramiekteëls en sanitêre ware. Fyn-gemaalde sirkoon verskaf 'n helder witheid aan glasuurkeramiekpigmente, en op porseleinvoorwerpe, sanitêre produkte en breekgoed. Dit word ook gebruik in vuurvaste en skuurprodukte. Daar is verskeie glasuuronderlaaggrade, waaronder $-10\ \mu\text{m}$, $-5\ \mu\text{m}$ en $-1\ \mu\text{m}$ met 'n gemiddelde d_{50} -deeltjie-grootteverspreiding in die gebied $1-2\ \mu\text{m}$ (Snyders 2007). Daarna word oor die algemeen verwys as glasuurgaadsirkoon (Engels: opacifier grade zircon).



Figuur 1: Sirkoon: internasionale mynbou, 2015 (Helgi, 2023)



Figuur 2: Sirkoon-eindgebruike (IndustryARC, 2023)

Sirkoon word ontgin as 'n neweproduk van rutiel- (TiO_2), ilmeniet- (FeTiO_3), monasiet- en leukokseen-swaarmineraal-strandafsettings. Mynboubedrywighede word gewoonlik deur baggerwerk gedoen. Die verskillende minerale word geskei deur gravitasie- en magnetiese skeidingstegnieke. Die sirkoon-konsentrete word normaalweg geklassifiseer as prima graad, standaardgraad en vuurvaste graad. Hierdie klassifikasies word gewoonlik volgens chemiese suiwerheid en partikelgrootte-verspreiding gedoen. Die produsente en chemiese ontleding van 'n paar tipiese sirkoongrade word in Tabel 1 aangebied (Roskill 2011).

Alle sirkoonafsettings bevat uraan en torium, met hul radioaktiewe vervalprodukte. Sirkoon word dus as 'n natuurlik voorkomende radioaktiewe mineraal (NORM) beskou en die konsentraat moet dus voldoen aan toepaslike regulatoriese standaarde wat betref verwerking en vervoer. Verskeie pogings is in die verlede aangewend om hierdie radioaktiwiteit te verwyder, maar met beperkte sukses (Hollitt et al. 1995; Levins et al. (1995).

Die prys van sirkoonkonsentraat het sedert 2000 dramaties gestyg; die hoofrede is die vraag-aanbod-wanbalans. Meer onlangs het die prys gestabiliseer rondom VS\$1 500 per metrieke ton. Pryse van sirkoon oor die afgelope dekade word in Figuur 3 gegee.

Meer as 95% van alle Suid-Afrikaanse sirkoon word onveredel uitgeoer. Uitvoer van onverwerkte minerale is 'n groot bekommernis vir die Suid-Afrikaanse regering (DMR 2011). Beperkte plaaslike veredeling word gedoen deur:

- Eggerdine, met 'n maalfasiliteit in Richardsbaai (KZN) met 'n kapasiteit van sowat 20 000 ton per jaar. Dit produseer verskillende grade fyngemaalde en glasuurgraad sirkoonpoeier;
- Geratech in Krugersdorp het sirkoniumchemikalieë vervaardig en het 'n beplande kapasiteit van 10 000 ton sirkonsand per jaar gehad (Lubbe 2012). Die maatskappy is egter in 2013 weens 'n gebrek aan finansiering gelikwideer; en
- Foskor in Phalaborwa in die Limpopo-provinsie, wat gesmelte sirkonia produseer.

Die Suid-Afrikaanse Kernkorporasie Bpk. (Necsa) het verskeie sirkoonveredelingsprosesse ontwikkel om sirkoniumchemikalieë, gedokterde sirkoonpigmente en 'n voortreflike sirkoonglasuuronderlaag uit plasmagedissosieerde sirkoon te vervaardig (Snyders 2005a; Snyders 2005b). Hoewel sommige van hierdie proses tot loodsskaal gevoer is, is geeneen van hulle gekommersialiseer nie.

Baddeleyiet

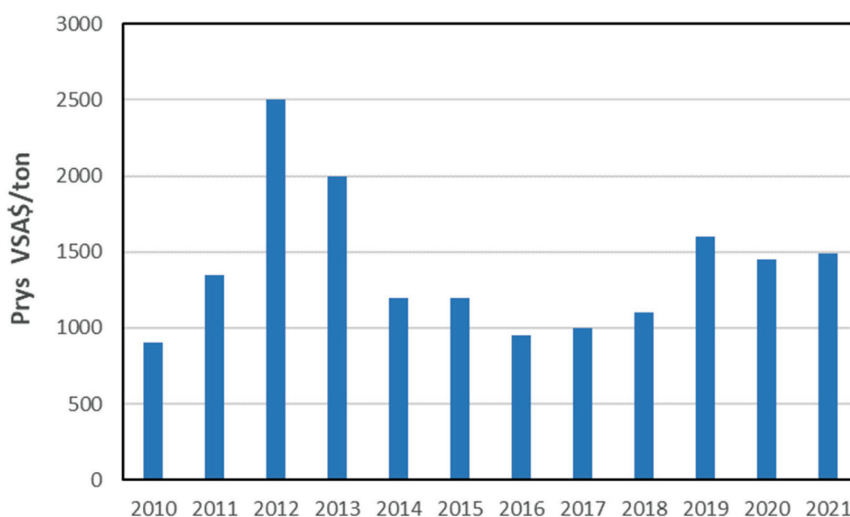
Natuurlike ZrO_2 (baddeleyiet) kan ook as sirkoniumbron gebruik word; dit is inderdaad minder problematies. Daar is egter nog net beperkte hulpbronne van baddeleyiet oor, met die uitsondering van die neerslag in Kovdor, Rusland. Minder as 10 000 ton baddeleyiet word jaarliks uit die Kovdor-neerslag geproduseer en oor die algemeen is die suiwerheid 98%. Suid-Afrika was die grootste produsent van baddeleyiet vanaf die Phalaborwa-kompleks in die Limpopo-provinsie tot 2001, toe die ontginning gestaak is aangesien dit nie meer as ekonomies winsgewend beskou is nie. Op sy hoogtepunt het Suid-Afrika ongeveer 20 000 ton baddeleyiet per jaar geproduseer (Skidmore 2010; Roskill 2011).

Versmelte sirkonia

Versmelte sirkoniumoksied word by hoë temperatuur in 'n boogdoon vervaardig deur smelting van sirkoon en gevolglike verdamping van SiO . Versmelte sirkonia is nog 'n bron vir sirkoniummetaalvervaardiging en het 'n suiwerheid van ongeveer 99%, vergeleke met die suiwerheid van chemies gepresipiteerde sirkonia van >99,5%. Beide versmelte en chemies gepresipiteerde sirkoniumoksied word met hoë vervaardigingskoste geassosieer. In Januarie 2012 is gesmelte sirkoniumoksied teen VS\$6 000 per ton verkoop en chemiese sirkoniumoksied tussen VS\$8 000 en \$12 000 per ton.

Sirkoniagebaseerde keramieke

Sirkoniagebaseerde keramiek is beide wetenskaplik en tegnologies as strukturele en funksionele materiaal van belang. Uitstekende eienskappe soos chemiese bestandheid, hoë ioniese geleidingsvermoë, hoë reaktansie, lae termiese gele-



Figuur 3: Historiese pryse vir sirkoonsand (Zircomet, 2023)

Tabel I: Tipiese sirkoonsuiwerheidsanalises van kommersiële verskaffers (Roskill 2011)

	Graad	% ZrO ₂	% TiO ₂	% Fe ₂ O ₃	% Al ₂ O ₃	% SiO ₂	dpm U + Th
Australië							
Bemax	Premium	65,8	0,12	0,06	0,0	32,5	450
	Standaard	65,5	0,25	0,15	1,00	32,9	450
Iluka	Capel Premium	65,5–66,0	0,10–0,15	0,05–0,07	0,50–0,70	32,2–32,5	360–440
	Capel Coarse	66,1–66,4	0,13–0,18	0,07–0,13	0,05–0,15	32,4–32,7	400–470
	Eneabba Premium	66,5	0,13	0,07	0,35	32,5	440
Ti-west	West Coast Premium	66,4	0,13	0,06	<0,50	33,2	400
	HTZ	65,9	0,65	0,06	1,15	31,7	420
Indië							
IRE	OR	64,25	0,70	0,30	-	32,10	-
	MK	65,80	0,25	0,10	1,20	32,50	-
	Q	65,30	0,27	0,12	-	32,80	-
Suid-Afrika							
Tronnox-Exxaro	Namakwa Sands	66,2	0,11	0,05	0,25	32,8	410
RBM	Premium	65,9	0,12	0,08	0,14	32,0	450
	Intermediêr	65,5	0,25	0,12	0,25	32,5	450
VSA							
DuPont	Premium	66,7	0,13	0,02	0,24	-	-
	Lae Alumina	66,5	0,21	0,04	0,50	-	-
	Standaard	65,9	0,27	0,04	1,15	-	-

dingsvermoë met goeie termiese stabiliteit en weerstand teen termiese skok beteken dat sirkoniumkeramieke in 'n wye verskeidenheid toepassings gebruik kan word (Guo & Chen 2004). Voorbeelde is toepassings in termiese afskermingsbedekkings, veral in aggressiewe omgewings, yttriumgestabiliseerde sirkonia as die vaste elektroliet in soliedeoksied-brandstofselle (SOFC), vanweë die suurstofoongeleidingsvermoë daarvan. SOFC-selle werk normaalweg by temperature bo 800 °C.

Die koördinasievalensie van sirkonia word nie altyd op die oppervlak bevredig nie. Sirkoniumatome vorm 'n Lewis-suurstel, en die suurstofatome 'n Lewis-basisstel. Die oppervlak van sirkonia kan dus beide as 'n suur of 'n basis optree, met oksiderende en reduserende eienskappe (Shiaw-Tseh Chiang 2015a; Chuah et al. 1996), byvoorbeeld deur die adsorpsie van CO₂ en NH₃ op die oppervlak. 'n SiO₂-Al₂O₃-oppervlak kan ook basiese NH₃ adsorbeer, maar nie suur CO₂ nie, terwyl 'n MgO-oppervlak CO₂ kan adsorbeer maar nie NH₃ nie. ZrO₂-oppervlakke kan beide adsorbeer as gevolg van die suur- en basis- (amfoteriese) eienskappe (Yamaguchi 1994).

Sirkoniumoksied is ook 'n hoogs aktiewe katalisator vir metielgroep-C-H-bindingsplyting. Dit is hoogs selektief vir die sintese van α-olefiene uit sekondêre alkohole. Resultate het gesuggereer dat sulke reaksies via 'n bifunksionele suurbasiskatalisereaksie verloop en dat die oriëntasie van die suurbasispaar 'n belangrike rol in die katalitiese werking speel (Tanabe 1985).

As gevolg van sirkonia se hoë brekingsindeks is toepassings ontwikkel as vuller vir die vervaardiging van nanosamestellings vir hoëbrekingsindeks-optika, naamlik helderheidversterkings-

films vir LCD-skerm, die enkapsulering van LED- holografiese roosters, sowel as in tandheelkundige toepassings. Die groot brekingsindeksverskil tussen die sirkonia en die hars kan egter oormatige optiese verstrooiing veroorsaak. Om deursigtigheid te handhaaf, moet die partikels ongeagglomereer en kleiner as 10 nm wees.

Grootoppervlakte-nanosirkonia kan geproduseer word deur fasestabilisering waardeur sirkonia gedeeltelik in die kristalrooster vervang word met oksiede van lantaan, magnesium, kalsium en yttrium. Sulke substitusies lei tot tetragonale-kristalfase- gestabiliseerde sirkoniumoksied. Tydens sirkoniumkeramiekproduksie lei 'n martensitiese transformasie van die tetragonale fase na die monokliniese fase tot 'n stresveld in die vorm van 'n voortplantende kraak. Hierdie fasetransformasie gaan gepaard met 'n volumetoename, wat dan tot die sluiting van die kraak lei. Om hierdie rede word gestabiliseerde sirkoniumoksied kommersieel gebruik vir die hoë sterkte en taaiheid daarvan (Chuah et al. 1996).

Nog 'n belangrike gestabiliseerde sirkonia-aanwending is in hoëtemperatuurturbine-enjins. 'n Deklaag van gestabiliseerde sirkonia speel 'n belangrike rol in die verbetering van die werkverrigting en lewensduur van gasturbine-enjins deur 'n temperatuurgradiënt van 100–300 °C tussen die oppervlak en die legeringskomponente van die turbine te skep. Gevolglik kan die gastemperatuur rondom die enjin verhoog word en sodoende die doeltreffendheid van die enjin verbeter sonder om die superlegeringskomponente te verander (Wang et al. 2007). Deur yttriumgestabiliseerde sirkonia met seldsame-aardeoksiede te ko-dokter kan die termiese geleidingsvermoë van die termiese versperringsdeklaag met soveel as 30% van huidige vlakke verminder.

Sirkoniumchemikalieë

Sirkoniumchemikalieë en -oksiede word geproduseer deur sirkoon as uitgang grondstof te gebruik. Sirkoon is inert en bestand teen oplossing in mineraalsure en word by hoë temperatuur ontbind deur dit te smelt met sterk basiese stowwe soos NaOH of Na_2CO_3 . Karbochlorering in teenwoordigheid van koolstof en chloor, uitgevoer by 1200 °C, word as 'n veredelings-roete gebruik om die reaktiewe sirkonium-suurstofreaksie tydens die produksie van sirkoniummetaal te vermy. Die verskillende verwerkingsmetodes word later vollediger bespreek.

Alkaliese smelting kraak die sirkoonkristalstruktuur, en dit word moontlik om sirkonia met behulp van soutsuur op te los en dan te ekstraheer. Die mees algemene verbinding wat uit hierdie oplossing gepresipiteer word, is sirkoniumoksichloriedoktahidraat, $\text{ZrOCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. As gevolg van die sirkonielkristalstruktuur staan dit ook bekend as sirkonielchloried met die algemene afkorting ZOC.

Die geraamde wêreldverbruik van sirkoniumchemikalieë, uitgesonderd sirkoniumoksied, was in 2011 meer as 325 000 ton, met meer as 60% van die kapasiteit wat aan die produksie van ZOC toegewys was. Ongeveer 90% van ZOC-produksie is in China teen 'n geraamde kapasiteit van 250 000 ton per jaar. Ander ZOC-produserende lande is Frankryk, Indië, Japan, Rusland, die Verenigde Koninkryk en die VSA (Roskill 2011).

Sirkoniummetaal

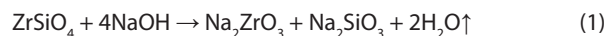
Sirkoniumlegerings vind toepassing as 'n bekledingsmateriaal vir kernbrandstof in kragentrales. Wêreldwyd is daar 431 kernreaktors in bedryf, met nog 139 wat beplan is om teen 2030 gebou te word, of beplan word. (UxC_Consulting_Services 2011; Snyder et al. 2011). Hoewel Eskom homself tans in 'n windstilte bevind, het Suid-Afrika beplan om teen 2030 ses nuwe 1 200 MW-reaktors te bou om die elektrisiteitskrisis te verlig (MBM 2007). Dit sou 'n bykomende 9 600 MW se kernkrag tot die elektrisiteitsnetwerk bydra. 'n Tipiese 1 200 MW-kernreaktor benodig 27 ton sirkoniummetaal vir die aanvanklike lading, en word daarna met sowat 10 ton per jaar aangevul. Meer as 85% van alle sirkoniummetaal wat vervaardig word, word in die kernbedryf gebruik. Die res word in gespesialiseerde legerings gebruik waar hoë korrosiebestandheid in hoë-temperatuurtoepassings benodig word, byvoorbeeld dompel-verwarmers, hitteuiers, chemiese reaktore en tenkvoerings, mengers, pompe en kleppe (Miller 1957). Ons som die hoof-prosesstappe op in Figuur 4 onder.

Prosessering van sirkoon

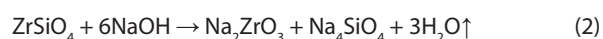
Sirkoon is chemies inert en onoplosbaar in enige van die mineraalsure, selfs hidrofluooruur. Dit kan slegs opgelos word deur smelting met alkalië. Lubbe et al. (2012) gee 'n oorsig van

die veredelingsprosesse van sirkoon vir die vervaardiging van verskeie sirkoniumchemikalieë en oksiede.

Tipiese alkaliese smeltmiddels sluit NaOH, Na_2CO_3 , CaO en MgO in (Nel et al. 2011; Biswas et al. 2012; Biswas et al. 2010; Stevens 1986). Die smelttemperatuur wissel tussen 600 °C en 1 400 °C, na gelang van die tipe smeltmiddel wat gebruik word. Die mees algemene industriële veredelingsmetode is d.m.v. NaOH-smelting by 600 °C om 'n sg. frit te vorm. Die stoïgiometriese dissosiasiereaksie is:



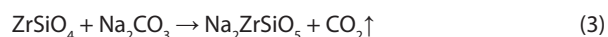
In die industrie word 'n oormaat NaOH gebruik met die voordeel van 'n sagter en meer bewerkbare frit:



Die natriumsilikaat in die frit is wateroplosbaar, terwyl natrium-sirkonaat slegs suuroplosbaar is. In beginsel kan die skeiding van die sirkonaat van die oortollige silika in die frit dus gedoen word deur dit deeglik met water te was. Dit vereis dikwels verskeie wasstappe. Die natriumsirkonaat word dan in soutsuur opgelos en ZOC word deur verdamping gepresipiteer.

China is die leier in veredeling na ZOC en het in 2011 meer as 200 000 ton ZOC geproduseer (Liu et al. 2014). China gebruik uitsluitlik die NaOH-roete vir veredeling. Alkaliese veredeling van sirkoon bied goeie veelsydigheid, is redelik eenvoudig en verg lae kapitaal- sowel as bedryfskoste, aangesien duur toerusting en reagentie nie nodig is nie.

'n Aantal akademiese publikasies is beskikbaar wat oor die veredeling van sirkoon handel. El Barawi et al. (2000) het die kinetika van sirkoon-dissosiasie met beide NaOH en Na_2CO_3 bestudeer. Hulle het tot die gevolgtrekking gekom dat 'n 2 mol-NaOH-oormaat tot 100% dissosiasie van die sirkoonkristal by 700 °C lei. Hulle het die skynbare aktiveringsenergie bereken as 62,11 kJ mol⁻¹, vergeleke met die 250 kJ mol⁻¹ wat nodig is om sirkoon met Na_2CO_3 te disosieer. Met 'n 0,2 molaar-oormaat Na_2CO_3 volgens die reaksie



was die optimale smelttemperatuur 1 100 °C, met 'n 91%- ZrO_2 -opbrengs.

Biswas et al. (2010) het El Barawy se werk herhaal en tot die gevolgtrekking gekom dat 'n hoër konsentrasie NaOH nodig is vir volledige dissosiasie van sirkoon by 700 °C. Hulle het die aktiveringsenergie van die NaOH-smelting as 125 kJ mol⁻¹ bepaal, wat op 'n chemies beheerde proses dui. Die sirkoonpartikelgrootteverspreiding wat gebruik is, was tussen



Figuur 4: Hoofstappe tussen sirkoonkonsentraat en kernkomponente

44 µm en 53 µm. Hulle het bevind dat 'n smeltyd van 1 uur met ekwimolêre Na_2CO_3 by 1 000 °C voldoende was om slegs 86% sirkoon op te los. Hulle het egter gewaarsku dat die skeiding van die gelatienagtige H_2SiO_3 en ongereageerde sirkoon uit die ZrOCl_2 -oplossing op industriële skaal problematies kan wees.

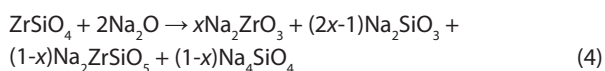
Abdelkader et al. (2008) het ekwimolêre verhoudings NaOH en KOH gebruik om Egiptiese sirkoonsand met 'n gemiddelde partikelgrootte van 63 µm te smelt. Hulle het gevind dat die dissosiasiedoeltreffendheid met ongeveer 7% verbeter met 'n verhoging van die stoïgiometries benodigde hoeveelheid alkali vanaf 100% tot 150%. Hulle het bevind dat 'n oormaat van slegs 20% die optimale dissosiasiedoeltreffendheid by 550 °C binne 60 minute bereik. By hierdie toestand is 96% van die sirkoon gedissosieer, teenoor die 100% dissosiasie wat deur El Barawy en medewerkers gerapporteer is.

'n Alternatiewe veredelingsproses word deur Abdelkader & Daher (2008) voorgestel. 'n Mengsel van NaOH en KOH word tydens die smeltproses gebruik. Ná die waterwassing en verwydering van die natrium- en kaliumsilikaat, is die sirkonium met verskillende konsentrasies HCl en H_2SO_4 gelooë. Basiese sirkoniumsulfaat (ZBS) is in situ gepresipiteer en die onsuiverhede met verskillende HCl-konsentrasies gelooë. Nóg die gewenste suiwerheid ZOC nóg sirkonium-basiese sulfaat (ZBS) kon bereik word. Die ZrO_2 wat ná kalsinering via die ZBS-roete geproduseer is, was 100% tetragonaal, maar dié wat van ZOC geproduseer is, was 'n mengsel van tetragonale en monokliniese kristalfases.

Manhique et al. (2003) het tot die gevolgtrekking gekom dat die gepatenteerde De Wet-proses (De Wet 2006) vir sirkoon-veredeling die volgende voordele vergeleke met die ander industrieel ontwikkelde metodes inhou:

- Minder verwerkingstappe om suursirkoniumsulfaattetrahidraat $\text{Zr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (AZST) te produseer;
- 'n Betreklik laekoste-pigmentgraadsirkonium met verminderde radioaktiewe inhoud kan geproduseer word;
- Die alkalireaktant kan as 'n verkoopbare natriumsilikaat-produk herwin word;
- 'n Swaelsuuroormaat van slegs vyf maal word benodig om AZST te produseer;
- Radioaktiwiteit word as 'n vastestoffase verwyder. Geen presipitasie word benodig nie;
- Minder uitvloeielsstrome met minder afval word geproduseer; en
- 'n Nadeel is die onvermoeë om sirkoniumoksichloried of ZOC te produseer wat aan die huidige klassifikasies voldoen.

Gemaalde sirkoon met 'n gemiddelde partikelgrootteverspreiding van 9 µm is in Manhique se studie gebruik. Hy het bepaal dat die hoëtemperatuur-smeltreaksie by 700 °C 'n mengsel van reagentse lewer:



Die waarde van x is tipies tussen 0,5 en 0,6 en het belangrike implikasies op die sirkoonopbrengs en alkaliherwinning.

$\text{Na}_2\text{ZrSiO}_5$ is nie wateroplosbaar nie en verhoed volledige alkaliherwinning. Dit moet met soutsuur gehidroliseer word na die ooreenstemmende natriumsout-afvalstroom sowel as die oplos van die sirkonium. Andersyds fasiliteer dit hoër herwinning van sirkoniumoksied per mol natriumhidroksied wat gebruik word. 'n Laer NaOH-molverhouding produseer minder afval, hoewel 'n hoër temperatuur (850 °C) en 'n smeltyd van twee uur nodig is vir volledige omskakeling. By 'n temperatuur van 650 °C is dieselfde resultate behaal, maar met 'n smeltyd van 336 uur is die proses industrieel onlewensvatbaar.

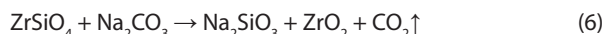
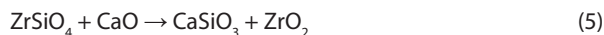
Da Silva et al. (2012) het gevind dat die optimale smelttemperatuur 600 °C is vir 20 minute, aangesien hoër temperatuur tot meer wateronoplosbare bindings soos $\text{Na}_2\text{ZrSiO}_5$ of $\text{Na}_4\text{Zr}_2\text{SiO}_3\text{O}_{12}$ kan lei. Hulle het die reaksietempo by verskillende temperature bepaal en gevind dat die reaksietempo met verhoogde smelttemperatuur toeneem, gepaard met 'n aktiveringsenergie van $130.9 \text{ kJ mol}^{-1}$. Hulle het tot 60% van die alkali herwin deur dit as kalsiummetasilikaat met $\text{Ca}(\text{OH})_2$ te presipiteer.

Liu et al. (2014) het die NaOH-frit ondersoek om die hidrolisestap van die natriumsirkonaat te optimeer. Die pH van die natriumsirkonaatoplossing word met 'n suur tot 'n pH van 3 verlaag om volledige hidrolise van die $\text{Na}_2\text{ZrSiO}_5$ te bewerk. Dit verseker dat voldoende natrium tydens die presipitasie en filtrasie van die ZOC-kristalle verwyder word.

Welham & Walmsley (2000) en andere (Puclin et al. 1995; Biswas et al. 2010) het sirkoon opgelos deur dit vir 200 uur in verskeie alkali-aardoksiede te maal. Die voermateriaal het 'n partikelgrootteverspreiding tussen 200 µm en 300 µm gehad. Die gebruik van BaO as 'n smeltmiddel teen 'n 1:1-molverhouding het tot gevolg dat 86% van die sirkoon na BaZrO_3 omgeskakel word. Die HCl-oplosbaarheid kan verder verhoog word deur hoër molare verhoudings te gebruik. Suuroplosbaarheid van 99% is verkry met 'n 3:1-verhouding CaO, en 97% met 'n 2:1-verhouding MgO. Kommersiële sal MgO die mees lewensvatbare oksied wees. Die massafraksie is slegs sowat 31%. Met 'n effens hoër verhouding kan moontlik meer as 99% van die sirkoon in 'n suur opgelos word. Welham beveel aan dat die mees energiedoeltreffende meule gebruik word om die maaltyd vir kommersiële bedrywighede te verminder.

Nel et al. (2011) het suur ammoniumfluoried ($\text{NH}_4\text{F} \cdot 1.5\text{HF}$) gebruik om sirkoon met 'n gemiddelde partikelgrootteverspreiding van 63 µm met behulp van mikrogolfvertering op te los. Die onopgeloste sirkoon is tydens die oplossingsreaksie herwin. Met elke daaropvolgende oplossingstap is 'n oormaat van 5:1 suur ammoniumfluoried gebruik. Die onopgeloste fraksie is gefiltreer, met propanol gewas, gedroog en dan met nuwe suur ammoniumfluoried heropgelos. Tot 99% omskakeling is ná 285 minute by 240 °C bereik. Ongelukkig het Nel nie die verwerkingstappe van die $(\text{NH}_4)_3\text{ZrF}_7$ tot sirkoniumoksied en chemikalieë verduidelik nie.

Ayala et al. (1992) maal en smelt sirkoon met verskillende konsentrasies Na_2CO_3 en CaO met die doel om ZrO_2 -poeier volgens Reaksie 5 en 6 te berei.



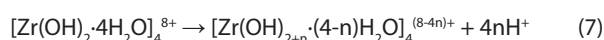
Verskillende NaOH-konsentrasies is gebruik om die oorblywende silika te loog om sirkoniumpoeiers met 'n suiwerheid van tussen 90% en 98% te produseer. Die finale sirkonium-oksiedsuiwerheid was egter afhanklik van die suiwerheid van die beginsirkoon. Ware en oënskynlike digthede van die vervaardigde sirkoniumoksied was laer as chemies gepresipiteerde sirkoniumoksied. Sirkoniumoksied wat m.b.v. die Na_2CO_3 -metode geproduseer word, vertoon kleiner en meer eenvormige korrelgrootteverspreiding as dié wat via die CaO-roete verkry word. Die suiwerheid van die sirkoon en hoeveelheid Na_2CO_3 of CaO wat vir dissosiasie gebruik is, het 'n groot invloed op die kwaliteit van die resulterende ZrO_2 -poeier.

Sirkoniumoksied

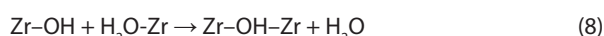
Vorbereiding

Bereiding van ZrO_2 deur middel van presipitasie van 'n sirkoniumsout met 'n basis soos ammoniak lei gewoonlik tot 'n mengsel van die stabiele monokliniese ZrO_2 en die metastabiele tetragonale ZrO_2 . Die fasetransformasie tussen die monokliniese en die tetragonale polimorf tydens verhoogde temperatuur verhoed dat sirkoniumoksied direk in die industrie gebruik kan word. Die fasetransformasie kan onderdruk word deur stabilisering van die tetragonale fase, hetsy deur die toepaslike kationiese seldsameardebbyvoeging in die kristal ("doping"), of deur die grootte van die partikels tot onder 'n kritieke waarde van ongeveer 30 nm te verklein. Tradisioneel word die tetragonale en kubiese polimorfe by kamertemperatuur gestabiliseer deur die byvoeging van 'n sekere hoeveelheid aliovalente katione. Stabilisering van hoëtemperatuurpolimorfe kan ook bereik word sonder die byvoeging van 'n chemiese stabiliseerder deur bloot die kristalliete van die materiaal tot nanogrootte te verminder –sogenaamde groottegeïnduseerde stabilisering (Tredici et al. 2012; Adamski et al. 2006). Daar word algemeen erken dat groottegeïnduseerde gestabiliseerde tetragonale sirkonia termodinamies by kamertemperatuur meer stabiel as monokliniese sirkonium is, solank kristallietgroeï voorkom word.

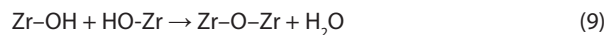
Dit is duidelik dat ZOC as die primêre voersirkoniumchemikalie gebruik word om sirkoniumoksied te produseer. Tydens die oplos van ZOC in water word 'n sikliese tetrameriese kompleks, $[\text{Zr}(\text{OH})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}]_4^{8+}$, gevorm. Wanneer die pH van hierdie kompleks verander word tydens die byvoeging van 'n basis soos ammoniak, vind hidrolise plaas en die tetrameer stel protone uit die terminale water vry om die $[\text{Zr}(\text{OH})_{2+n} \cdot (4-n)\text{H}_2\text{O}]_4^{(8-4n)+}$ -spesie volgens reaksies 12 tot 14 te vorm.



Vervolgens vind polikondensasie plaas deur olasie,



gevolg deur oksolasie,



wat lei tot die vorming van hidroksiel- en oksobruë tussen die tetrameereenhede (Adamski et al. 2006). Die verandering in ewewig tydens hidrolise volgens Reaksie 1 kan beheer word deur die pH van die oplossing te verander. Vinnige byvoeging van ammoniak verhoog die aantal terminale hidroksiele in die tetrameer op 'n ewekansige wyse sodat polikondensasie vinnig en in verskeie rigtings plaasvind, met 'n amorfie jel as produk. By kristallisasie gee so 'n jel aanleiding tot 'n mengsel van monokliniese en tetragonale sirkonia, wat lei tot die vorming van hidroksiel- en oksobruë tussen die tetrameereenhede (Adamski et al. 2006).

Monokliniese en gestabiliseerde sirkoniumoksied

'n Kenmerk van sirkonia is die bestaan van drie polimorfiese vorme, monoklinies ($\text{P}2_1/\text{c}$), tetragonaal ($\text{P}4_2/\text{nmc}$) en kubies ($\text{Fm}3\text{m}$). Hulle verskil duidelik in massa- en oppervlakteienskappe. In growwepartikelmateriale is die monokliniese fase by omgewingstemperatuurtoestande meer stabiel as in die tetragonale fase, maar in die geval van fynpartikelmateriaal word die tetragonale fase termodinamies meer stabiel as gevolg van die aansienlik laer oppervlakenergie daarvan (Jakubus et al. 2003).

Hoëtemperatuurverdigting of sintering van groenpoeier-keramiekkompakte is hoofsaaklik 'n proses om lugholtes te verwyder. Tydens die verhittingsiklus kan krimp en partikelgroeï gelyktydig plaasvind, na gelang van faktore soos sintertemperatuur, sinterdigtheid en die aanvanklike partikelpakkonfigurasie. Partikelgroeï is oor die algemeen ongewens, omdat dit die finale digtheid verlaag en die eienskappe van die produk negatief beïnvloed. Partikelgroeï tydens verdigting is dus 'n belangrike probleem om te oorkom (Liu 1998). Baie studies het eksperimenteel bevind dat volledige verdigting vir nanogrootte deeltjies bereik kan word by sintertemperature wat etlike honderde grade Celsius laer is as in die geval van growwe deeltjies. Laetemperatuursintering verminder effektief die neiging tot partikelgroeï.

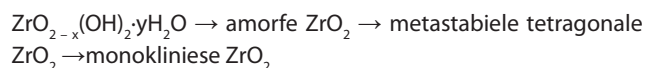
Monokliniese en gestabiliseerde sirkoniumoksied word meestal vervaardig deur die ontbinding van sirkoniumhidroksied. Die ontbindingsgedrag na monokliniese sirkoniumoksied, wat geproduseer word deur neutralisasie van 'n ZOC-oplossing, is dus deur verskeie outeurs bestudeer.

Alkaliese presipitering van sirkoniumhidroksied

Sato et al. (1979) het kaliumheksafluorsirkoonaat (K_2ZrF_6) as die voerstof gebruik om sirkoniumhidroksied met behulp van ammoniumhidroksied onder verskillende toestande te presipiteer. Hulle het gevind dat die presipitaat 'n mengsel is van amorfie gehidreerde oksihidroksiede, $\text{ZrO}_{2-x}(\text{OH})_{2x} \cdot y\text{H}_2\text{O}$. Die waarde van x word bepaal deur die presipiteringstoestande by verskillende alkalikonsentrasies. Volgens DTA-ontleding word geadsorbeerde water onder 100 °C verdamp. 'n Endotermiese reaksie by 140 °C ontstaan uit die dehidroksilasie as gevolg van die termiese ontbinding van die hidroksied na die amorfie sirkoniumoksied. 'n Laaste eksotermiese piek, by 450 °C, word

toegeskryf aan die kristallisering van die amorfie sirkoniumoksied na die tetragonale of monokliniese fase.

Sato (2002) het opgevolg met dehidrasiestudies van sirkonium-oksihidroksied deur sirkoniumoksichloriedoplossings met natriumhidroksied en/of ammoniumhidroksied onder verskillende toestande te presipiteer. Die resultate was baie soortgelyk – twee endotermiese DTA-pieke is by 80 en 110 °C waargeneem. Die eerste is weereens toegeskryf aan die vrystelling van geadsorbeerde water en die tweede as gevolg van dehidroksilasie tydens die termiese ontbinding van sirkoniumoksihidroksied na die amorfie oksied. Vanaf 430 °C is 'n oorgang van die amorfie oksied na die tetragonale kristalfase waargeneem. XRD-studies tydens verhitting tot 800 °C asook afkoeling tot kamertemperatuur het getoon dat die oksied tydens verhitting vanaf 420 °C na die tetragonale fase getransformeer het, maar daar word slegs gemeld dat kristallisering toeneem met temperatuur. Daar is egter tydens afkoeling vanaf 800 °C mengsels van monokliniese en tetragonale fases by 600 °C en 500 °C waargeneem, wat eers met verdere afkoeling by 200 °C na die monokliniese fase getransformeer is. Daar word voorgestel dat die termiese ontbinding deur die volgende proses verloop:



Hier is $x \leq 2$ en $1 \leq y \leq 2$, na gelang van van die samestelling van die uitgangsmateriaal.

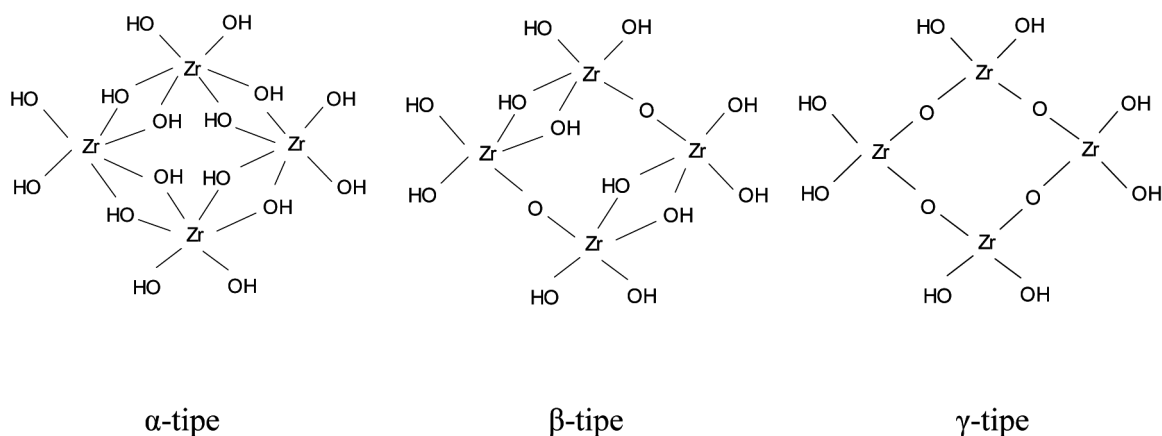
ZrO_2 kan ook verkry word deur die hidrolise en kalsinerings van baie ander sirkoniumsoute. Die kristalfase van die ZrO_2 hang af van die voorbereidingsproses van die hidroksied. Veroudering by 100 °C vir lang tye lei tot die voorkeurvorming van die monokliniese fase, terwyl die tetragonale fase dominant is wanneer veroudering weggelaat word. Stoombehandeling van die hidroksied lei ook tot die vorming van die monokliniese fase, terwyl vakuumbehandeling die tetragonale fase tot gevolg het (Yamaguchi 1994).

Die hidroksiedpresipitasietoestande, sowel as die verhitingsprogram van die hidroksied na die finale kristalfase, word verklaar aan die hand van die verandering van die een-

heidstruktuur (eenheidsel) van die hidroksied. Drie strukture is geïdentifiseer. Die α -tipe hidroksied is die hoofase net ná presipitasie via hidrolise. Veroudering bring 'n verandering teweeg na 'n β -tipe en uiteindelik die γ -tipe, met die verlies van OH-groepe. Die α -tipe is die voorloper van die tetragonale fase en die γ -tipe weer van die monokliniese fase. Sien Figuur 5 vir die modelstrukture (Yamaguchi 1994).

Chuah et al. (1996) het hidroksied berei deur 'n sirkonium-(IV)-chloriedoplossing met ammoniak van 'n pH ≤ 1 tot 'n pH van 9 te presipiteer. 'n Ander hidroksied is berei deur die suuroplossing direk by 'n gekonsentreerde ammoniakoplossing te voeg. Die pH van die ammoniakoplossing het van 11,8 na 9,4 verander. Ná filtrering en waterwas is die hidroksied by verskillende temperature, van 30 °C tot 100 °C en met verskillende tydintervalle, tussen 0 en 96 uur, na sirkonia gekalsineer. Die oppervlaktearea en sirkoniakristalfases is vir vergelykingsdoeleindes ontleed. Daar is waargeneem dat 'n toename in kalsinerings temperatuur ook die oppervlakte van die sirkonia verhoog het, maar dit neem af bo 900 °C. Kalsinerings tot en met 1 000 °C vir 48 uur produseer 'n bykans 100% tetragonale sirkonia. Eers ná kalsinerings by 1 100 °C keer dit na die monokliniese fase terug. Verhitting onder refluks het die amorfie jeldeltjies na 'n kristallyne produk soos 'n gehidreerde oksihidroksied, $[\text{ZrO}_x(\text{OH})_{4-2x} \cdot y\text{H}_2\text{O}]_n$, getransformeer. Die aanvanklike jel verskil van hierdie struktuur, aangesien die waarde van x veel kleiner is. Refluksverhitting lei tot 'n toename in x , wat beteken dat water uit die dubbelhidroksogroepe geëlimineer word om oksobruie te vorm, wat tot 'n meer gedehidreerde oksihidroksied as voorloper lei (Figuur 3 hierbo). Ander outeurs het soortgelyke werk gedoen en tot dieselfde slotsom gekom (Denkewicz et al. 2011; Štefanić et al. 1997; Jakubus et al. 2003).

Guo & Chen (2004; 2005) het ZOC by 320 °C onder suur toestande (pH 4.5) gehidroliseer om nanogrootte monokliniese sirkonia te produseer. Hierdie temperatuur is ongeveer 280 °C laer as wat gewoonlik benodig word om suiwer monokliniese sirkonia deur presipitasie te verkry. Die waterige sirkonia lewer by 'n kristallisering-aanvangstemperatuur van 310 °C oorwegend monokliniese (70%) en 30% tetragonale fases. Die monokliniese kristallietgrootte was ongeveer 17 nm, en die tetragonale grootte 28 nm. Ná verhitting van die presipitaat tot 320 °C is 'n suiwer nanokristallyne monokliniese sirkonia met 'n kristalliet-



Figuur 5: Modelstrukture vir die zirkoniumpolikatioon (Yamaguchi, 1994)

grootte van 15 nm geproduseer. Daar is gevind dat hierdie data nie die tradisionele siening ondersteun dat 'n kritieke kristallietgrootte van 30 nm verantwoordelik is vir die stabilisering van die tetragonale en monokliniese fases nie. Suur-pH-presipitasie, vinnige neerslagvorming, matige verouderingstyd en drogingstemperatuur het 'n beduidende invloed op die struktuur van die resulterende sirkonia en bevoordeel dus die vorming van die monokliniese eerder as die tetragonale fase.

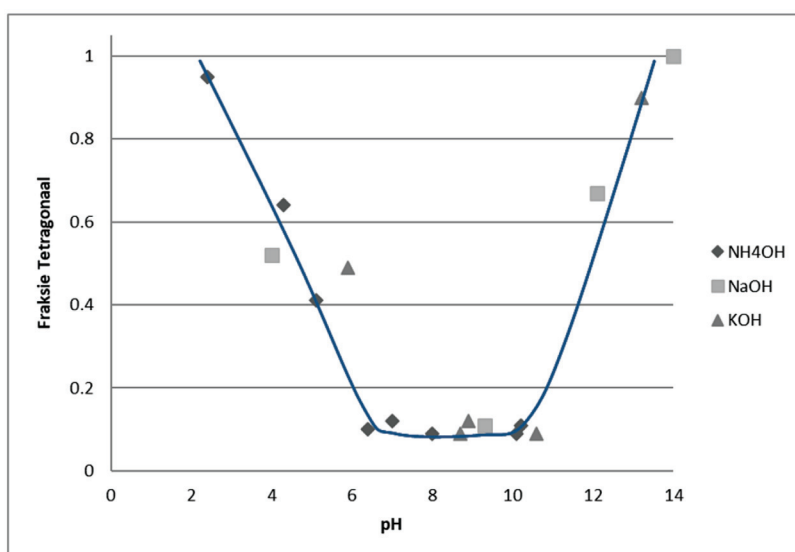
Al-Hazmi et al. (2014) het voortgegaan met die werk van Guo en Chen deur verskeie alifatiese sirkoniumkarboksilate en α -hidroksiekarboksilaatkomplekse te berei. 'n Algemene neiging vir die aanvanklike tetragonale kristallisatie van sirkoniumoksied is waargeneem tussen 350 °C en 450 °C. 'n Effense toename in die gemiddelde kristallietgrootte, van 3,2 tot 6,7 nm, is waargeneem wanneer die materiaal by 590 °C en 720 °C verhit is. 'n Gemiddelde kristallietgrootte van 18,4 nm is waargeneem nadat die monster by 800 °C gekalsineer is. By hierdie temperatuur is die kristalfase oorwegend monoklinies. ZrO_2 , afgelei van alifatiese karboksilate, ondergaan 'n fase transformasie na die monokliniese fase by hoër temperature as die α -hidroksielkarboksilate. Verder verhoog langer karboksilaatligandkettings die oppervlakte van die resulterende sirkoniumoksied.

Adamski et al. (2006), soos Chuah et al. (1996), het waterige sirkonia met die byvoeging van ammoniak in 'n ZOC-oplossing gepresipiteer, asook om 'n ZOC-oplossing by 'n ammoniakoplossing te voeg. In beide oplossings is die pH op 9,3 gehandhaaf. Daar is gevind dat deur 'n ZOC-oplossing by 'n ammoniakoplossing te voeg, gevolg deur langdurige veroudering van die presipitaat by 100 °C, die beste manier blyk te wees om 'n suiwer tetragonale fasesirkonia te berei deur kalsinering van die waterige sirkoniajêl by 600 °C vir 6 ure. Die konsentrasie van die aanvangsoplossing was van minder belang en hierdie werk is met ZOC-oplossings van tussen 0,006 M en 0,6 M uitgevoer. Meer gekonsentreerde oplossings het egter kristallisatie van die tetragonale ZrO_2 -polimorf bevoordeel. Hulle het dit verklaar binne die beginsels van die klassieke

kernvorming en partikelgroeimechanisme. Die BET-oppervlakte vir die nieverouderde monsters wat 6 uur lank by 600 °C gekalsineer is, was 23 m²/g en 77 m²/g vir die monsters wat vir 24 uur by 100 °C verouder is. 'n Toename in die porievolumen van $V_p = 0,046$ vir die nieverouderde monsters tot 0,214 cm³/g vir die verouderde monsters is ook waargeneem. Kalsinering van die nieverouderde ZrO_2 -monsters het 'n beduidende toename in die kristallietgrootte veroorsaak as gevolg van die vinnige samesmelting van die primêre deeltjies. TEM-beelde het aan die lig gebring dat die gemiddelde deursnee van die nieverouderde kristalle wat by 475 °C gekalsineer is, van 23 nm tot 33 nm by 600 °C gegroei het. Na kalsinering by 1 000 °C het die kristalle tot 69 nm gegroei. Om die waarheid te sê, die gemiddelde partikeldeursnee in die verouderde monsters was stabiel in die temperatuurgebied 400–800 °C, en het nie die kritieke waarde van 30 nm oorskry nie. Sintering is eers waargeneem ná die fase transformasie na monoklinies wat by 850–950 °C begin het.

Petrinin et al. (2004) het ZOC-, nitraat- en tetrachloriedoplossing met ammoniak gepresipiteer om sirkoniumhidroksied te verkry. Daar is gevind dat die aard van die aanvangsout sowel as die hittebehandelingstemperatuur 'n beduidende effek op die fasesamestelling en struktuur van die ZrO_2 -kristalliete gehad het. Hulle bied 'n skematiese diagram aan om die olasie-, oksolering- en jelvormingsproses tydens neutralisasie van die sirkoniumtetrameer met 'n basis soos ammoniak te verduidelik.

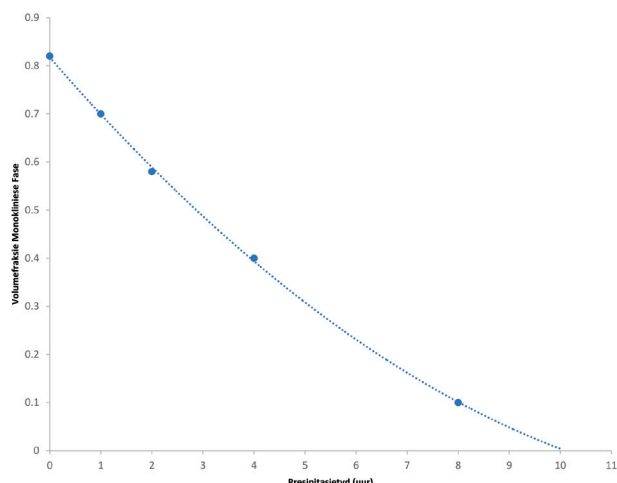
Kostrikin et al. (2010) het ook die dehidrasie van sirkonium- en hafniumhidroksied na sirkonia en hafnia bestudeer. Die hidroksied is by verskillende temperature gedroog en die hidroksiel- en suurstofeliminatie is met FTIR identifiseer. Die spektra bestaan uit verskeie bande wat die teenwoordigheid van OH-groepe, H_2O -molekules, Zr-O-H terminale groepe en Zr-O(H)-Zr en Zr-O-Zr-oorbruggingsgroepe aandui. 1,5 mol water word tydens die eerste droogstap van $\text{ZrO}_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ tot by 145 °C uitgeskakel as gevolg van die polikondensasie van hidroksogroepe. Die oorblywende 1 mol word verwyder tot by 900 °C, met die grootste verlies onder 485 °C.



Figuur 6: Die verhouding tussen pH en die fraksie- tetragonale fase tydens die presipitasie van sirkoniumhidroksied (Srinivasan & Davis 1997)

Srinivasan & Davis (1997) rapporteer 'n verband tussen die kristalstruktuur en die pH van van sirkoniumhidroksiedneerslag. Die pH van die oplossing bepaal die kristalfase van die gekalsineerde sirkoniumoksied. Monokliniese sirkonia word geproduseer in die pH-besteek van 6,5–10,4 en tetragonale sirkonium by 'n pH van 2–4 en 13–14, hoewel die stabiliteit by fase transformasie wisselvallig was (Figuur 6).

Die presipitasietyd van die hidroksied het ook 'n groot invloed op die kristalfase van die finale oksied. Srinivasan en Davis het 'n metaalsout by NH_4OH gevoeg om die pH by 10,4 te handhaaf. Die presipitasietyd het gewissel van vinnige toevoeging tot 8 ure. Die gevolgtrekking was dat die volume fraksie van mono-



Figuur 7: Volumefraksie- monokliniese kristalfase by pH 10,4 (Srinivasan & Davis 1997).

kliniese fase afneem met verlengde presipitasietyd (Figuur 7). Indien die lyn na die 0% monokliniese fase geëkstrapoleer word, wil dit voorkom asof 'n presipitasietyd van ongeveer 10 ure voldoende sal wees.

Sol-jel-presipitasie

Sol-jel-presipitasie is 'n verdere metode om sirkoniumoksied te produseer. 'n Sol is 'n mengsel van vaste kolloïdale deeltjies wat in 'n vloeistof vermeng is. Daar word aanvaar dat oppervlakladings en Brown se beweging 'n sol stabiel hou teen uitsakking. Daar is twee prosedures om sol-jel-presipitasie te gebruik:

- Die presipitasie van 'n kolloïdale suspensie van 'n metaalsout; en
- Die bereiding van 'n polimeriese jel deur die hidrolise van 'n organometaalverbinding in 'n geskikte organiese oplosmiddel.

Die primêre verskil is die tempo van hidrolise van die voerstof en die oplosmiddel wat tydens hidrolise gebruik word. Die kolloïdale roete behels vinnige hidrolise in water, gevolg deur peptisering en gelering. Die hidrolisetempo word egter tydens die polimeriese roete vertraag deur organometaalverbinding te gebruik (Srinivasan & Davis 1997).

Voordele van die sol-jel-tegniek sluit in:

- Groot oppervlakte van die gedroogde jel;
- Chemiese homogeniteit;
- Manipulasie van kombinasies van materiale om 'n mikrostruktuur, 'n kristallyne spesie en aktiewe oppervlaktes te produseer wat nie maklik met ander prosesse gedoen kan word nie; en
- Gerieflike vorming van voorwerpe deur gebruik van laetemperatuurgietmetodes.

Tredici et al. (2012) het nanosirkoniapoeiers berei deur hidrolise van alkoksiede en solvotermiese prosesse. Hulle het tot die gevolgtrekking gekom dat die poeiers wat deur alkoksiedhidrolise geproduseer word slegs marginale verbeterings

toon, vergeleke met die Pechini-sol-gel-metode. Die solvotermiese proses het veel beter resultate opgelewer. Beide strukturele en mikrostrukturele eienskappe van die nanopoeier is baie sterk deur die oplosmiddel beïnvloed. Kristallietgrootte, graad van agglomerasie en die hoeveelheid tetragonale fase in die beginproduk speel 'n belangrike rol om die kwaliteit van die gesinterde materiaal te bepaal. Agglomerasie het 'n groot invloed op die finale digtheid, maar dra ook by om die tetragonale fase tydens sintering te behou. Donsige poeiers is ideaal vir die vervaardiging van eenvormig gesinterde hoëdigtheidmonsters, maar neig tot oorgang na die monokliniese fase namate die kristallietgrootte gedurende die sintersiklus toeneem, terwyl geagglomereerde poeiers 'n behoud van die tetragonale fase getoon het. Met suiwer groottegestabiliseerde sirkonia kon hulle monsters met bykans volledige digtheid (r.d. 97%) bereik met 'n sintersiklus van 5 min onder enkelassige druk van 700 MPa by so laag as 900 °C. Die sirkonia het 'n kristallietgrootte van 31 nm en 'n 94%- tetragonale fase, en het termiese stabiliteit tot 900 °C vertoon.

Xu & Wang (2009) het beweer dat hulle die kristallietgrootte in 'n baie nou band onder 10 nm kan beheer deur sirkoniummoleaat vanuit ZOC-oplossings te presipiteer. Die sirkoniummoleaat is by 200 °C vir 2 tot 4 dae in oleïensuur en oleïelamien in 'n outoklaaf opgelos. Deur die reaksietyd in die outoklaaf te beheer, kon hulle die grootte van die sirkoniakristalliete beheer. Ongelukkig word daar geen melding gemaak van enige hittebehandeling van die kristalle ná presipitasie en waterwassing nie. Hul resultate kan dus nie met dié van ander navorsers vergelyk word nie, omdat die effek van kristallietgroeï by verhoogde temperature glad nie ondersoek is nie.

Sol-jel-presipitasie met sitroensuur en akrielamied is deur Vivekanandhan et al. (2007) ondersoek. Hulle het 'n tetragonalefase-kristallisasiepiek by 575 °C waargeneem. XRDanalise het 'n 50:50verhouding tussen die tetragonale fase en die monokliniese fase ná ontbinding by 600 °C geïdentifiseer. TEM-analise het agglomerate van <1 µm en primêre ZrO₂-deeltjies van tussen 10 nm en 20 nm bevestig. Hulle het hierdie ZrO₂ as voerstof in die tandheelkundige en ander biomediese toepassings berei. Geen melding is gemaak met betrekking tot sinterdigtheid en buigsterkte nie.

Judes & Kamaraj (2008) het sol-jel-presipitasie gebruik om minisfere van ceria-gestabiliseerde sirkonia te produseer. Oksaalsuur is by 'n ZOC-oplossing gevoeg met 13–15 mol% serumnitraat as stabiliseringsmiddel. Die optimale sintertemperatuur vir die bereiding van 'n ten volle tetragonaal gestabiliseerde, sol-jel-afgeleide, ceriagestabiliseerde sirkoniainisfeer was 1 500 °C.

Minisfere is ook deur Judes & Kamaraj (2009) met behulp van die sol-jel-metode berei. Hulle het 'n sol van ZOC, yttriumnitraat en oksaalsuur berei en 35% polivinielalkohol (PVA) bygevoeg om die vereiste viskositeit en vloeibaarheid te verkry. Die sol is stadig in 'n gekonsentreerde ammoniakoplossing gegiet, en die druppels by temperature tot en met 1 500 °C gedroog en gesinter. Tabel II gee die gesinterde digthede en porositeite van die vervaardigde sfere weer.

Tabel II: Gesinterde sol-jel-digtheid (Judes & Kamaraj 2009)

Temperatuur (°C)	Porositeit (%)	Sinterdigtheid (g/cm ³)	% van teoretiese digtheid	Gemiddelde kristalliet- grootte (nm)
300	67,62	n/a	n/a	n/a
500	51,35	5,01	82,13	9,87
700	33,63	5,72	93,77	17,32
900	20,36	5,89	96,56	24,17
1100	15,48	5,85	95,90	30,19
1300	2,81	5,82	95,41	49,62
1500	~0,0	5,81	95,25	54,32

Die SOFC-spesifikasies van > 6,05 g/cm³ gesinterde digtheid kon nie met hierdie metode bereik word nie. Daar is ook 'n mengsel van monokliniese en tetragonale fases van 900 °C tot 1 500 °C waargeneem. Transformasieverharding hou direk verband met die tetragonale fase, en sodanige materiaal moet 100% tetragonale fase wees. Die outeurs het tot die gevolgtrekking gekom dat die afname in tetragonale fase met verhoogde sintertemperatuur die traagheid van yttriummigrasie in die sirkoniumkristalstruktuur dui. Die tetragonale fase in die sfere kan moontlik metastabiel wees as gevolg van drukspanning wat tydens sintering ontwikkel word. Wanneer die tetragonale fase na die monokliniese fase terugkeer, lei die transformasie tot mikrokrake, wat in SEM-foto's sigbaar is.

Gavrilov & Zenkovets (2000) het die effek van jelveroudering bestudeer. Hulle het sirkonielchloried met ammoniak by pH 4 en pH 8 gepresipiteer en verouder en toe ten opsigte van digtheid, oppervlakte, mikroporievolume en porositeit vergelyk. Die jel wat by 'n pH van 8 gepresipiteer en vir 25 uur verouder is, het die hoogste digtheid en oppervlakte gehad. Die verwantskap tussen die verskillende parameters is bespreek en vergelyk met 'n jel wat by 'n pH van 4 presipiteer is.

Verskillende metodes is al voorgestel om suiwer monokliniese sirkoniumoksied te berei. Die waterige jelvorming of sol-jel-roete met behulp van 'n sirkoniummalkoksied is een van die beste prosesse om sirkonia-nanopartikels te produseer (Ayril et al. 1990). George en Seena (2011) het die roete gebruik om 'n jel vanaf ZOC en natriumasetaat te berei. Hulle het twee endoterms by 110 en 406 °C waargeneem. Die eerste is as gevolg van die verlies aan geadsorbeerde water en die laasgenoemde as gevolg van dehidrasie van die jel. Daar is 'n oorvleueling van die eksotermiese fasetransformasiepiek tussen 349 °C en 460 °C. Met XRD-studies kon slegs 'n tetragonale fasetransformasie by hierdie temperatuur geïdentifiseer word, terwyl met Raman-spektroskopie ook 'n klein hoeveelheid monokliniesefase-ZrO₂ waargeneem is. Met TEM-analise kon silindriese nanodeeltjies van kleiner as 25 nm egter geïdentifiseer word.

Nanogrootte sirkoniapoeier kan ook deur ander metodes geproduseer word, soos meganiese maling, sol-jel-presipitasie, direkte presipitering en dampfase-afsettingsprosesse (Ryu et al. 2010).

Ander metodes

Rubio et al. (2009) het nanogrootte sulfaathoudende sirkoniumoksied vanuit ammoniumsirkoniumkarbonaat- (AZC) oplossings vervaardig. Die ammoniak in die AZC-oplossing is toegelaat om oor 'n tydperk te verdamp. Na 'n week is 'n deursigtige monoliet verkry. Spesifieke konsentrasies H₂SO₄ is bygevoeg, die neerslag gefiltreer en 'n uur lank by 600 °C gekalsineer. Volgens ligverstrooiingsanalise het die resulterende sirkoniamonoliet 'n gemiddelde kristallietgrootte van 4 nm gehad. Sulfatering het agglomerasie van die oorspronklike nanodeeltjies veroorsaak. Uitgloeïng by 600 °C het getoon dat die tetragonale fase stabiel was, met geen omskakeling na die monokliniese fase nie.

Ryu et al. (2010) het 'n argonplasma gebruik om nanogrootte sirkonia- en yttriagestabiliseerde sirkonia te produseer deur sirkoniumkarbonaat as voerstof te gebruik. Die sirkonium- en yttriumkarbonaatvoerstof is tot 'n partikelgrootteverspreiding van < 10 µm gemaal en by 60 °C gedroog. 'n Mengsel van monokliniese- en tetragonalesirkonia is geproduseer, maar 'n afname in tetragonale fase is waargeneem wanneer plasmakrag van 7 kW tot 34 kW verhoog is. Die fasemengsel is toegeskryf aan die vinnige blustempo in die plasmareaktor. Min verkoelingstyd is beskikbaar om van die kubieke fase na die monokliniese fase oor te gaan. Dit onderdruk dus die samestellingsaanpassing wat nodig is vir die vorming van die monokliniese fase. Hoe hoër die blustempo, hoe minder is die monokliniese fase dus. 'n Toename in partikelgrootte is ook waargeneem met 'n toename in plasmakrag.

Die verhoging van die plasmagasvloei het dieselfde effek gehad as die verhoging van die plasmakrag met die vorming van metastabiele sirkoniumoksied, wat ook verklaar kan word aan die hand van die blustempo van die produk. Daar was egter groot opbrengsverliese, met 'n herwinning van slegs 30%. Die berekende mol% yttriumoksied wat oorspronklik bygevoeg is, is ook nie tydens yttriumgestabiliseerde sirkonia produksie bereik nie. 'n Suiwer tetragonale fase is waargeneem by 3.8 mol% yttrium, terwyl 'n mengsel van tetragonale en kubieke fases by 7,7 mol% yttrium waargeneem is. Die kristallietgrootte was 27 nm, wat wissel in die gebied 10–50 nm. Hulle het tot die gevolgtrekking gekom dat die proses die potensiaal het vir die bereiding van nanogrootte sirkonia, maar geoptimeer moet word deur verdere navorsing.

Chiang het verskeie belangrike faktore geïdentifiseer waaraan nanosirkonia moet voldoen vir optikaspesifieke toepassings. Hierdie eienskappe is:

- **Brekingsindeks:** Die toename in brekingsindeks word bepaal deur die kristalliniteit en die sirkoniumoksied-nanopartikellading;
- **Viskositeit:** Byvoeging van nanodeeltjies by 'n organiese hars verhoog altyd die viskositeit totdat dit 'n onbewerkbare jel vorm. Die maksimum ladingskapasiteit voor jelvorming hang af van die aspekverhouding van die deeltjies en die assosiasie tussen hulle;
- **Deursigtigheid:** Optiese deurlaatbaarheid van nanosirkoniumoksied is 'n funksie van die grootte van die primêre deeltjies en die mate van assosiasie tussen hulle; en
- **Dispergeerbaarheid:** Die oppervlakeienskappe van nanosirkoniumoksied bepaal die dispergeerbaarheid. Die oppervlak van sirkonia is van nature hidrofilies en moet met geskikte ligande gemodifiseer word om dispersie in die meeste organiese harse te vergemaklik (Shiaw-Tseh Chiang 2015a).

Chiang het verskeie gepatenteerde prosesse beskryf om nano- of kolloïdale sirkonia te berei. Hy het die verskillende prosesse in vier kategorieë verdeel, naamlik:

- **Organiesvrye suurstelsels:** Die hoofproses wat gebruik word, is die gedwonge hidrolise van waterige ZOC oplossings;
- **Waterige suursisteme wat organiese stowwe bevat:** Byvoeging van chelaatvormende middels soos by sol-jel-presipitasie. 'n Alternatief is om 'n organiese sout, of metaal-organiese verbinding soos sirkoniumasetaat, te gebruik om kolloïdale sirkoniumoksied te produseer;
- **Organiesvrye alkaliese sisteme:** Sirkoniumhidroksied word berei deur presipitasie by 'n hoë pH met behulp van NaOH of KOH. Die resulterende flodder word verwerk na 'n fynverdeelde sirkoniumoksied deur dit by hoë temperatuur te kook; en
- **Alkaliese sisteme wat organiese stowwe bevat:** Organiese verbindings soos alkanolamien en 'n tetrakiellammoniumkarbonaat is by 'n hoë pH en kookpunt gebruik (Shiaw-Tseh Chiang 2015a).

Shiaw-Tseh Chiang (2015b) beskryf die hidrolise van verskeie alkoksiede, of die sogenaamde solvotermiese prosesse, tesame met die voor- en nadele van elke proses, die oksiedfase wat gevorm word en bereidingsprosesse.

Die gebruik van sirkonia as 'n katalisator of as steunmateriaal is slegs doeltreffend wanneer dit 'n groot oppervlakte het en stabiel bly onder prosestoestande.

Die ko-dokter van yttriumgestabiliseerde sirkoniumoksied met ander seldsameaardeoksiede kan die termiese geleidingsvermoë met soveel as 30% verminder. Talle studies oor gestabiliseerde sirkoniumoksied is gedoen, met die meeste gekonsentreer op die finale materiaaleienskappe. Fasetransformasiestudies is hoofsaaklik gedoen op die meer algemene seldsameaardeoksiede soos yttrium en serum of die aardalkalioksiede van kalsium en magnesium. Wang et al. (2007) het 'n omvattende eksperimentele en berekeningsfasestudie van die stelsel $\text{ZrO}_2\text{-REO}_{1,5}$ gedoen ($\text{RE} = \text{La}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Dy}$ en Yb). Hulle het bevestig dat die oplosbaarheid van $\text{REO}_{1,5}$ toeneem wanneer die ioniese radius van RE verminder, en 'n benaderde lineêre verband tussen oplosbaarheid en ioniese radius kan gevind word.

Berry et al. (1999) het die invloed van pH op die reaksiemengsel tydens die bereiding van sirkoniumoksied vanaf sirkoniumasetaatoplossings ondersoek. Hulle het gevind dat die byvoeging van ammoniumhidroksied by temperatuur tot ongeveer 900 °C die tetragonale fase teen omskakeling na die monokliniese polimorf stabiliseer.

Guo & Chen (2005) het 'n oksiasetaat (of oksihidroksiasetaat) vervaardig deur ZOC in 'n oormaat asynsuur te reflux. Twee eksotermiese pieke is met DTA-analise waargeneem. Die pieke by 396 °C en 545 °C kan toegeskryf word aan die ontbinding van die organiese komplekse, wat aanleiding gee tot 'n mengsel van kubiese- en tetragonale fase-sirkoniumoksied. By 710 °C was die geproduseerde sirkoniumoksied 61% monoklinies, 27% kubies en 12% tetragonaal. Die toename in ontbindingstemperatuur het 'n groot invloed op die kristallietgrootte gehad, soos in Tabel III aangetoon word.

Dit is bekend dat klein kristallietgroottes 'n tetragonale kristallyne struktuur bevoordeel. Met die byvoeging van 'n basis word hidroksielione tot die amorf materiaal toegevoeg, wat die tetragonale fase stabiliseer en omskakeling na die monokliniese polimorf teenwerk (Guo & Chen 2004).

Hoëdrywing-ultraklankbehandeling is deur Yapyrintsev et al. (2012) gebruik om nanokristallyne sirkoniumoksied te berei. Groot verskille tussen behandelde en onbehandelde monsters is met behulp van termogravimetriele analise TGA waargeneem. Die verskil in TGA-massaverliese is toegeskryf aan minder onsuiverhede wat deur die behandelde sirkoniumhidroksied geadsorbeer is, vergeleke met die onbehandelde monsters. Xerojel, berei by 'n suur pH, was byna 100% in die tetragonale fase tot 600 °C, terwyl die verwysingsmonsters mesomorfies was, met ongeveer 90% tetragonale fase tot 600 °C.

Tabel III: Kristalgrootte en -fase uit die termiese ontbinding van sirkoniumoksihidroksi-asetaat (Guo & Chen 2005)

Temperatuur (°C)	Kristallietgrootte (nm)	Monokliniese fase (%)	Tetragonale fase (%)	Kubiese fase (%)
396	24,3	0	34	66
545	30,4	7	41	52
710	113,1	61	12	27

Ultraklank het by lae temperature ook sirkonia met 'n baie groter spesifieke oppervlakte as die verwysingsmonsters geproduseer, spesifiek tydens suurhidrolise. Wanneer die hidrolisetemperatuur verhoog is, het die kontrole- en ultrasone behandelde monsters soortgelyke spesifieke oppervlaktas vanaf ongeveer 600 °C gehad. Daar word vermoed dat polimerisasie lei tot die vorming van OH-brugpare in die vlak van die sirkoniumatome. Suurhidrolise het normaalweg 'n hoër kondensasietempo, sodat die vlakke wat vorm tipies 'n lineêre struktuur het. Deur die pH te verhoog, neem die polikondensasietempo relatief tot die hidrolisetempo toe. Daarom het sirkoniumhidroksied wat onder alkaliese toestande gesintetiseer is, 'n vertakte struktuur met 'n groot spesifieke oppervlakte. Ultraklankbehandeling lei tot 'n aansienlike toename in spesifieke oppervlakte en hou verband met die kenmerke van jelstruktuurvorming. Onder aktiewe kavitasietoestande lei die intense plaaslike vloeistofmikrovloei en skokgolwe tot die vorming van 'n jel met 'n losser struktuur en groot spesifieke oppervlakte. Ultraklank laat presipitasie van sirkoniumhidroksied met 'n groot oppervlakte in suur toestande toe, in teenstelling met ander tegnieke (Yapryntsev et al. 2012).

Uit bogenoemde literatuur kan gesien word dat talle faktore 'n rol kan speel in die vervaardiging van suiwer monokliniese of tetragonale sirkonia. Die voermateriaal, presipitasieprosedure, pH-bedryfstoeestande sowel as die ontbindingsproses bepaal die fase en stabiliteit van die vervaardigde sirkonia.

Sirkoniumgebaseerde chemikalieë

Figuur 10 gee 'n skematiese oorsig van die produksieroetes na die verskillende sirkoniumchemikalieë.

Sirkoniumoksiechloried-oktahidraat ($\text{ZrOCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, ZOC)

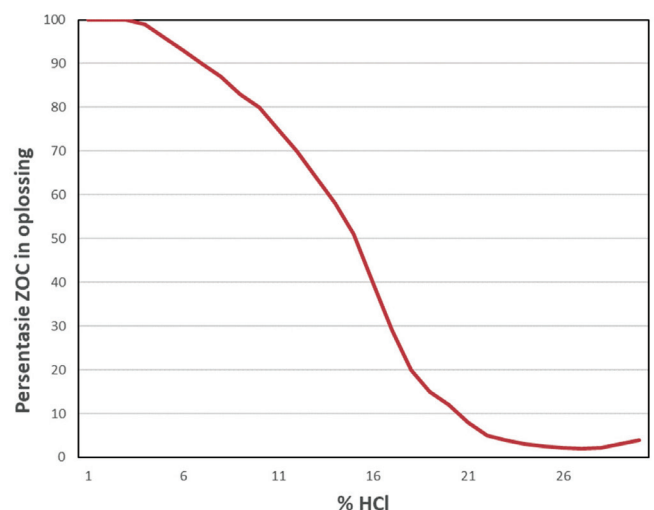
Die oplosbaarheid van sirkonielchloriedoktahidraat in gekonsentreerde HCl is 690 g/L by 90 °C en dit neem af tot 8 g/L by 40 °C (Abdelkader & Daher, 2008). As onsuier sirkonielchloriedkristalle by hoë temperatuur in HCl opgelos word, sal suiwer kristalle presipiteer sodra die temperatuur van die

oplossing toegelaat word om tot kamertemperatuur te daal. In water is die oplosbaarheid van ZOC 1 700 g/L by 20 °C. Wanneer ZOC-kristalle in water opgelos word, kan die oplossing gebruik word om verskeie ander sirkoniumchemikalieë te presipiteer (Lubbe et al. 2012).

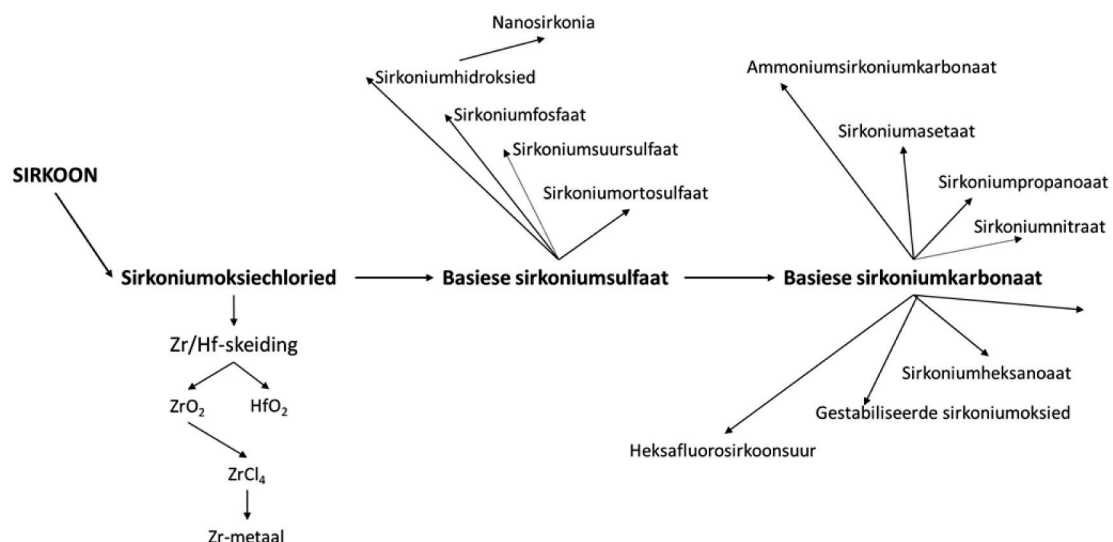
Chou & Chou (1988) het die oplosbaarheid van ZOC ondersoek. Die minimum oplosbaarheid is in 25% HCl (Figuur 9).

Wanneer ZOC uit oorversadigde oplossings gekristalliseer word, presipiteer dit altyd as naaldagtige kristalle. Die induksieperiode vir kristallasie word veroorsaak deur die groei van 'n kritieke kern tot 'n visueel waarneembare grootte en die vorming van 'n oppervlakkern as die bepalende beheerstap.

Clearfield & Vaughan (1956) en Mak (1968) het gevind dat die sirkonielspesie 'n komplekse tetrameer is, $[\text{Zr}_4(\text{OH})_8 \cdot 16\text{H}_2\text{O}]^{8+}$ waarin die sirkoniumatome in 'n vierkant gerangskik is en langs elke rand van die vierkant verbind is deur 'n paar OH-groepe. Daar is vier bykomende watermolekules wat aan elke Zr-atoom



Figuur 9: Oplosbaarheid van ZOC in waterige HCl (Chou & Chou 1988)



Figuur 8: Produksieroetes

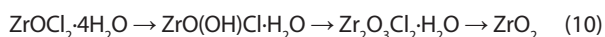
gebind is op so 'n manier dat dit 'n verwronge vierkantige antiprisma vorm. Die oorblywende watermolekules en die chloriedione vorm 'n matriks wat die sirkoniëkompleks bymekaar hou. Die gemiddelde Zr–O-afstand is 2,4 Å en die som van al die radiusse is 2,20 Å.

Henderson & Higbie (1954) het daaraan gewerk om die ZOC-presipitasieopbrengs te verhoog deur aseton by 'n versadigde ZOC-oplossing te voeg. Die aseton verminder die oplosbaarheid van die oksichloried in soutsuur, waardeur die presipitasieopbrengs verhoog word. Hulle het gevind dat die optimale verhoudings vir bevredigende herkristallisatie ongeveer 1 mL van 'n versadigde sirkoniëchloriedoplossing, 5 mL aseton en 1 mL gekonsentreerde HCl is. ZOC-opbrengste van 96–99% is verkry.

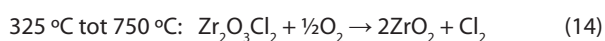
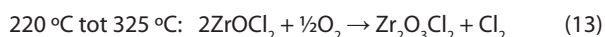
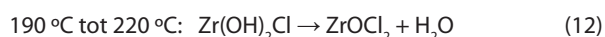
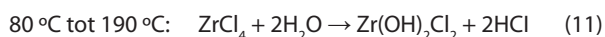
Castor & Basolo (1953) het asetoongedroogde ZOC oor magnesiumperchloraat en natriumhidroksied gedroog, en sodoende hidrate met 8, 7,75, 7,5, 7,25, 7, 6,5 en 6 mol water geïdentifiseer.

Biswas et al. (2012) het ZOC presipiteer deur 'n saadkristal by te voeg en dan oornag te laat om te presipiteer. Die kristalle is gefiltreer, met etanol gewas en by kamertemperatuur gedroog. Die opbrengs was 85%. Deur middel van TGA is die produk as sirkoniëchloriedheksahidraat geïdentifiseer. 'n Totale massaverlies van 57% is tot by 700 °C waargeneem. Die 38% massaverlies tot en met 400 °C is toegeskryf aan die verwydering van ses kristalwatermolekules. Tot by 700 °C is die verlies a.g.v. die vervanging van chloor deur suurstof om ZrO_2 te vorm.

Beden et al. (1969) en Beden & Guillaume (1970) het ZOC isotemies by lae temperature ontbind om die ontbinding tot ZrO_2 te bevestig. Volgens hul resultate word water tot by 90 °C verwyder om 'n anhidriese sout te produseer. Hulle het volledige ontbinding voorspel, met die vorming van ZrO_2 by ongeveer 450 °C.



Navorsers verskil klaarblyklik met betrekking tot die ontbindingstemperature van ZOC na sirkonia. Barraud postuleer dat dit verband kan hou met die onsekerhede oor die hidrasietoestand van die aanvangsmateriaal. Barraud et al. (2006) het die ontbindingsreaksies soos volg aangehaal:



Atherton & Sutcliffe (1988) herhaal die werk deur aseotropiese dehidrasie met toluen, benseen, heksaan en pentaan as oplosmiddels te gebruik. Dehidrasie met behulp van pentaan by 37 °C lei tot die gedeeltelike verlies van interstisiële water. Met behulp van heksaan by 62 °C is 'n verdere verlies van water

waargeneem, maar daar was nog 'n klein hoeveelheid van die interstisiële water oor. By hierdie temperatuur is die eerste chloriedverlies ook waargeneem. Dehidrasie met benseen bring die mees beduidende veranderinge by 80 °C teweeg. Die tetrameer begin ioniseer met die verlies van protone van die gekoördineerde watermolekules. Die vorming van oksobindings volg en 'n polimeriese struktuur word gevorm. Die graad van polimerisasie hang uiteindelik af van die aantal chloriedione wat uitgeskakel word. Met dehidrasie by 110 °C word dehidrochlorering en olasie verder uitgebrei en uitgebreide polimerisasie word verwag.

Die resultate van Powers & Gray (1973) stem nie ooreen met voorheen gerapporteerde termiese dehidrasie van sirkoniëchloried nie en hulle het voorgestel dat dehidrasie in vier stappe plaasvind:

- Die eerste en tweede, by 46 °C en 77 °C, behels die verlies van twee ekwivalente water onderskeidelik;
- Die derde stap by 117 °C behels die verlies van twee ekwivalente water plus een ekwivalent waterstofchloried. Na die derde stap volg 'n tydperk van stadige waterstofchloried- en waterverlies, maar geen stoïgiometriese fases kon opgespoor word nie. Hulle het tot die gevolgtrekking gekom dat bo 150 °C die meeste van die strukturele kenmerke van die voer-ZOC verlore gaan en dus geformuleer kan word as ZrO_2 , maar nog met chloried en water gekontamineer is. Die skerp gewigsverlies by 500 °C kan blykbaar hoofsaaklik aan haliedverwydering toegeskryf word; en
- Die vierde stap by 650 °C word toegewys vir die dehidrasie na ZrO_2 , met geen verdere waarneembare gewigsverlies by hoër temperature nie.

Inoue et al. (1975) het hul ontbindingseksperimente in 'n elektriese oond uitgevoer. Hulle het met $\text{ZrOCl}_2 \cdot 6.3\text{H}_2\text{O}$ begin en 'n gewigsverlies van 53,3% tot 300 °C, 57,3% by 400 °C, 57,4% by 500 °C en 57,6% by 600 °C aangeteken. Die fisiese eienskappe soos poriegrootteverspreiding neem met verhoogde ontbindingstemperature toe tot baie groter porieë. Hierdie data is ook vergelyk met die ontbinding van $\text{ZrO(NO}_3)_2 \cdot 2.4\text{H}_2\text{O}$ onder dieselfde eksperimentele toestande. Die gemiddelde kristallietgrootte het toegeneem van ongeveer 15 nm by 400 °C tot ongeveer 24 nm by 800 °C. Die hoogste sinterdigtheid wat vir ZOC by 1 600 °C behaal is, was 5,34 g/cm³, wat ooreenstem met ongeveer 92% van die teoretiese digtheid.

Dit is duidelik dat daar geen ooglopende ooreenstemming tussen verskillende navorsers is met betrekking tot die ontbindingsroete van sirkoniëchloried na sirkonia nie. Huidige instrumentasie het beter resolusie en opsporingslimiete en die ontbinding moet in weer in oënskou geneem word om die ontbindingsmeganisme te bevestig.

Basiese sirkoniumsulfaat (ZBS n.a.v. die Engels) en sirkoniumsulfaat-tetrahidraat (AZST n.a.v. die Engels)

Basiese sirkoniumsulfaat (ZBS) word vanuit 'n ZOC-oplossing gepresipiteer. ZBS word dan gebruik om sirkoniumsulfaat-tetrahidraat (AZST) of basiese sirkoniumkarbonaat (ZBC) te

berei. Verskillende grade ZBS kan gepresipiteer word deur die $\text{ZrO}_2\text{:H}_2\text{SO}_4$ -molverhouding te verander. Die optimale verhoudings is tussen 1:0.45 en 1:0.85. Hierdie variasies lei ook tot verskillende partikelgrootteverspreidings sowel as kristallietgroottes. Met streng eksperimentele beheer oor toestande soos presipitasieverhittingstempo, molêre sulfaatverhouding en begin-pH van presipitasie kan die ZBS-produk se kristalliet- en partikelgrootteverspreiding binne nou grense beheer word. Partikelgrootteverspreiding is belangrik in industriële toepassings om verskillende sirkoniumchemikalieë met ZBS as voermateriaal te produseer. Kristallietgrootte het 'n groot invloed as ZBS gebruik word om hoëtemperatuurontbinding-sirkoniumoksied vir nismarktoepassings te produseer.

Sirkoniumsulfaat kan geklassifiseer word as anionies, neutraal of basies. Neutrale verbindings het 'n Zr:SO_4 -molverhouding van 1:2, terwyl die basiese soute 'n laer verhouding SO_4^{2-} het, met die oorblywende deel as OH-groepe. Anioniese komplekse bevat meer as twee sulfaatone per sirkoniumioon (Squattrito et al. 1987). Die drie basiese strukture kan geskryf word as:

- $\text{Zr}_n(\text{OH})_{2n+2}(\text{SO}_4)_{n-1}$ ($n > 1$)
- $\text{Zr}_n(\text{OH})_{2n}(\text{SO}_4)_n$ ($n = 2$)
- $\text{Zr}_n(\text{OH})_{2n-2}(\text{SO}_4)_{n+1}$ ($n > 2$)

Dirksen (1992) het die presipitasie van ZBS ondersoek deur nege deurslaggewende parameters tydens die presipitasieproses te monitor. Hy het tot die gevolgtrekking gekom dat klein prosesveranderinge uiteenlopende veranderinge in die gepresipiteerde produk veroorsaak. Hy het die belangrikste faktore wat ZBS-presipitasie bepaal soos volg gelys:

- 'n Konstante reaksie-pH;
- 'n Verandering in pH gee 'n toename in spesifieke oppervlakte;
- Oplosbaarheid neem af met verhoogde presipitasietemperatuur, en dus hoër opbrengs;
- Verhoogde reaksietemperatuur lewer groter aggregate met vinniger filtrasiestempo's;
- Reaksieopbrengs kan gemaksimeer word deur hoëtemperatuurpresipitasie met byvoeging van gekonsentreerde ammoniak by die oplossing;
- 'n Reaksie-pH $> 1,5$ verseker 'n Zr:sulfaat -molverhouding $> 2,3:1$. Dit beheer ook die hoeveelheid onsuiverheid wat word tydens presipitasie verwyder kan word;
- Toename in mengspoed verhoog die gemiddelde partikelgrootteverspreiding, gepaard met 'n afname in spesifieke oppervlakte;
- Reaktorontwerp behoort konsentrasiegradiënte binne die reaktor te voorkom om sodoende veranderinge in partikelgrootte te vermy; en
- Afskuif-aggregaatvorming is die dominante groeimechanisme vir deeltjies groter as $1\text{ }\mu\text{m}$.

Strydom & Pretorius (1993) het die termiese ontbinding van sirkoniumsulfaatetrahidraat (AZST) na ZrO_2 bestudeer en die ontbindingsenergie bepaal. Analise het getoon dat die uitgangsmateriaal $\text{Zr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 5,5\text{H}_2\text{O}$ in plaas van $\text{Zr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ was. Hulle het bevind dat die materiaal higroskopies is en dat

water tydens die hantering van die monster geabsorbeer word, waarskynlik as gevolg van die oormaat swaelsuur wat teenwoordig was. Die Zr:SO_4 -molverhouding is egter nie ontleed om te bepaal of enige vry H_2SO_4 teenwoordig was vir waterabsorpsie nie. 'n Totale energie van $2\,505\text{ Jg}^{-1}$ is nodig vir monokliniese ZrO_2 bo $900\text{ }^\circ\text{C}$ en $2\,306\text{ Jg}^{-1}$ om tetragonale ZrO_2 te verkry. Tetragonale ZrO_2 word waargeneem tydens laetemperatuurontbinding, en dit skakel oor na monokliniese ZrO_2 by temperature hoër as $900\text{ }^\circ\text{C}$.

Oplossings wat Zr^{4+} en SO_4^{2-} bevat, bestaan uit 'n veelheid van verskillende spesies, eerder as 'n enkele voorkeursstruktuur. Sulke oplossings bereik amper nooit presipitasie-ewewig nie. Klein veranderinge in geleidingsvermoë en/of vaste stowwe wat presipiteer, is oor lang tydperke waargeneem (Squattrito et al. 1987). Squattrito et al. (1987) het die kristalstruktuur van ZBS met hoë sirkonium:sulfaat- molare verhoudings deur middel van Xstraalkristallografie bepaal. Hulle het $\text{Zr}_{18}\text{O}_4(\text{OH})_{38,8}(\text{SO}_4)_{12,6} \cdot 33\text{H}_2\text{O}$ gepresipiteer en die struktuur met ander bekende strukture vergelyk. Empiries kan die formule ook geskryf word as $\text{ZrO}_2 \cdot 0,75\text{SO}_3 \cdot 3,1\text{H}_2\text{O}$. Hulle het 'n stel reëls geformuleer om die kristalstruktuur van verskeie basiese sirkoniumsulfaatverhoudings te verduidelik:

- Sulfaatone verkies oorbrugging oor sirkoniumatome in toestande waar neutrale en basiese sulfaatstrukture vorm, dit wil sê die molverhouding minder as 1 is;
- By hoë suur- en sulfaatkonsentrasies kan die sulfaatioon as bidentaatchelate presipiteer;
- Die voorkeursirkoniumkoördinasiegetal in die vaste fase is 7 en 8;
- Monodentate of nie-oorbrugde sulfaatone verteenwoordig onstabiele situasies, en sal verder polimeriseer deur oorbrugging of verplasing van hidroksielgroepe;
- Nie-oorbrugde hidroksielgroepe is ook onstabiel en sal deur water of sulfaat verplaas word, of kan selfs in verdere olasie met ander hidroksielbevattende fragmente presipiteer;
- Twee hidroksielgroepe verplaas een sulfaatgroep, gevolg deur olasie; en
- Oksolering vind plaas tussen olaatkettings deur water af te splyt om 'n suurstofatoom te produseer wat deur vier sirkoniumatome gekoördineer word.

Matijevic et al. (1969) het die oplosbaarheidsgrense van sirkoniumsulfaat as 'n funksie van pH bepaal deur oplossings van litium-, kalium- en magnesiumsulfaat teen verskillende konsentrasies by oplossings van sirkoniumnitraat te voeg, eerder as om swaelsuur by 'n sirkoniumsout te voeg. Hul resultate word opgesom in verskeie oplosbaarheidsdiagramme wat nie in hierdie oorsig bespreek sal word nie.

Nielsen & Govro (1956) het 'n metode ontwikkel wat baie soortgelyk aan dié van Dirksen is om ZBS uit ZOC teen 'n molverhouding van 1 Zr:0,4 SO_4 te presipiteer. Die oplossing word tot $90\text{ }^\circ\text{C}$ verhit, met warm water verdun en die pH met ammoniak aangepas, waarop ZBS dadelik presipiteer. Hulle het aanspraak gemaak op 'n opbrengs van 99% deur hierdie proses te gebruik. Suiwer sirkoniumoksied is berei, met 'n ignoreerbare verlies aan sirkonium.

Chatterjee et al. (1989) het ZBS by hoë temperatuur ontbind om sirkoniumoksied te produseer. Hulle het ZBS by verskillende sirkonium:sulfaat- molêre verhoudings gepresipiteer en ontbind. Hulle het waterverlies by minder as 600 °C waargeneem, en die ontbinding van die sulfaatgroepe by ongeveer 780 °C. Na gelang van van die verskillende sirkonium:sulfaat- molêre verhoudings, het die partikelgrootteverspreiding van die sirkonia, ná ontbinding by 1 100 °C, tussen 60 nm en 0,3 µm gewissel, gebaseer op TEM-analise. Die ZrO_2 was dominant monoklinies, ongeag die verhouding of presipitasietoestande.

Ahmen et al. (1999) het verskeie sirkoniumsulfate, hidrok-siedsulfate en oksiedsulfate gesintetiseer. ZrO_2 is in swaelsuur met konsentrasies van tussen 50% en 97% opgelos. Die resulterende presipitate is as $\alpha-Zr(SO_4)_2$, $Zr(SO_4)_2 \cdot 7H_2O$ en $Zr(SO_4)_2 \cdot 4H_2O$ geïdentifiseer. By gedeeltelike termiese ont-binding is ooreenstemmende oksiedsulfate as tussenprodukte verkry. TGA- en DTA-analise is op alle produkte uitgevoer en die resultate is in besonderhede bespreek.

Basiese sirkoniumkarbonaat (ZBC, n.a.v. die Engels)

Basiese sirkoniumkarbonaat (ZBC) word normaalweg vervaardig van basiese sirkoniumsulfate en is 'n belangrike voermateriaal om ander sirkoniumchemikalieë te berei. Dit is oplosbaar in 'n verskeidenheid organiese sure om die geassosieerde sirkoniumverbindings te vorm. Tydens sulke reaksies word die karbonaat ontbind met die voordeel dat die resulterende metaalorganiese produk nie met addisionele anione soos chloriede en sulfate gekontamineer word nie. Die mees algemene industriële toepassings van sirkonium basiese karbonaat is in antiperspirante, katalisators, sirkonia en as voer-materiaal om addisionele sirkoniumchemikalieë te produseer.

Soos in die geval van sirkoniumsulfate, vorm sirkonium 'n verskeidenheid karbonaatkomplekse. Wanneer die $Zr:CO_3^{2-}$ molverhouding 1:<0,8 is, is die produk 'n amorfte vastestof wat geredelik in suur oplosbaar is. Sodra die verhouding tot 1:>1 verhoog word, begin die sirkoniumkarbonaat in sy eie geadsorbeerde water tot 'n helder sirkoniumkarbonaatoplossing oplos. Die oplosreaksie is stadig by 1:1- molêre verhoudings, maar neem toe by hoër verhoudings. Industriële is die mees algemene sirkoniumkarbonaatoplossing bekend as ammonium-sirkoniumkarbonaat ("AZC" n.a.v. die Engels), met toepassings hoofsaaklik in die papiervervaardigingsbedryf. Die viskositeit van die produkoplossing kan gemanipuleer word deur die sirkonium:karbonaat-molverhouding in die oplossing te verander. Die oplossing het 'n raklewe van ongeveer 1 jaar, waarna die viskositeit mettertyd begin toeneem. Beperkte literatuur is beskikbaar oor die polimerisasieproses tydens die verhoging in viskositeit van die oplossing.

In die geval waar 'n ZOC-oplossing direk met 'n karbonaatbevattende materiaal soos natriumkarbonaat behandel word, word 'n gelatienagtige neerslag gevorm wat in wese onfiltreerbaar is (Bell 1970). Pokhodenko & Tselik (1976) en Fenner (1981) het prosesse gepatenteer om 'n geredelik filtreerbare sirkoniumkarbonaat uit ZOC-oplossings te berei. Die prosesse behels die presipitasie van basiese sirkoniumsulfate uit

ZOC-oplossing deur swaelsuur by die kookpunt by te voeg. Die basiese sirkoniumsulfate word weer in water opgelos en 'n geskikte karbonaatreagens word by 80 °C bygevoeg. Die amorfte koolsuurhoudende hidraatpartikels wat op hierdie manier berei is, behou die vorm van die oorspronklike sirkonium-sulfatepartikels. 'n Effens gewysigde proses word industrieel gebruik om basiese sirkoniumkarbonaat te presipiteer.

Pokhodenko et al. (1972) het ook basiese sirkoniumkarbonaat vanuit basiese sulfate berei, die produk met alkohol gewas en lugdroog gemaak. Ná ontleding van die verskillende spesies het hulle bepaal dat die formule $Zr_2O(OH)_4CO_3 \cdot nH_2O$ is en waargeneem dat die gewigsverlies tydens verhitting met veroudering van die produk afneem. Die verskillende verbindings tydens droging en veroudering is geïdentifiseer as:

- Vars $\rightarrow Zr_2O(OH)_4CO_3 \cdot mH_2O$
- Na 24 uur $\rightarrow Zr_2O(OH)_4CO_3 \cdot nH_2O$
- Na 1 week $\rightarrow Zr_2O_x(OH)_{6-2x}CO_3 \cdot pH_2O$
- Na 1 jaar $\rightarrow Zr_2O_{2,5}(OH)CO_3 \cdot qH_2O$

Ontbinding van die lugdroog produk word beskryf as:

- Vars: $\rightarrow Zr_2(OH)_4CO_3 \cdot nH_2O$
- 60 °C–170 °C: $\rightarrow \approx Zr_2O_x(OH)_{6-2x}$
- 300 °C–500 °C: $\rightarrow \approx ZrO_2$ (amorf)
- >500 °C: $\rightarrow ZrO_2$ (kristallyn)

Die karbonaatioon word by lae temperatuur ontbind tot 'n amorfte sirkoniumhidroksied en dan na sirkonia by ongeveer 500 °C.

Kerina et al. (1984) het 'n goed beplande opvolgstudie van Fenner se werk uitgevoer oor die vorming van basiese sirkoniumkarbonaat uit sirkonium basiese sulfate. Daar is tot die gevolgtrekking gekom dat 'n oormaat van ongeveer 30% karbonaat nodig is vir volledige verwydering van sulfatione tydens omskakeling na sirkoniumkarbonaat. Die oortollige karbonaat reageer nie met die produk nie en kan met water uitgewas word. Die molêre verhouding karbonaat in die finale sirkoniumkarbonaat is dieselfde as die molverhouding sulfaat wat gebruik word om die oorspronklike ZBS te presipiteer.

Gimblett et al. (1988) het verskillende sirkoniumsoute met behulp van TGA ontbind en 'n volgorde van ligandverwydering met toenemende temperatuur bepaal. Die volgorde was: geadsorbeerde $H_2O > CO_3^{2-} \sim C_2O_4^{2-} > NO_3^- > OH^-$ of 'sterk gebonde' $H_2O > SO_4^{2-}$. Oor die algemeen het die ligand-verwydering gelei tot die vorming van kubiese sirkoniumoksied wat omskakel na monokliniese sirkoniumoksied by ongeveer 1 000 °C.

Ammoniumsirkoniumkarbonaat (AZC) en kaliumsirkoniumkarbonaat ("KZC" n.a.v. die Engels)

AZC word kommersieel gebruik wanneer 'n sirkoniumoplossing in 'n alkaliese omgewing benodig word. Die oplossings word berei deur basiese sirkoniumkarbonaat (ZBC) by kamertempe-

ratuur in 'n oplossing van ammoniumkarbonaat of 'n mengsel van ammoniumbikarbonaat en ammoniumhidroksied op te los (Phillips 1977; Phillips 1978). Die hooftoepassing vir AZC is as 'n oplosbaarheidsonderdrukker vir die styselbinders in papierbedekkingsformulerings. ZBC met 'n sirkonium:karbonaat-molverhouding van ongeveer 1:0,5 word as voermateriaal gebruik. Hierdie verhouding kan met behulp van reagense soos ammonium- of kaliumkarbonaat tot 2:1 verhoog word.

Die raklewe van AZC is streng afhanklik van die sirkonium:karbonaat-molverhouding. Pogings om "droë" AZC-poeier te berei was tot dusver onsuksesvol.

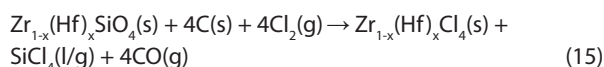
Kaliumsirkoniumkarbonaat (KZC) word vervaardig deur ZBC by kamertemperatuur in 'n kaliumkarbonaatoplossing op te los. KZC kan, in teenstelling met AZC, sonder enige verlies aan effektiwiteit gesproeidroog word. Die KZC-poeier kan in water opgelos word, indien nodig.

Sirkoniummetaal en -legerings

Die prosessering van sirkoon vir die vervaardiging van kerngraadsirkoniumspons

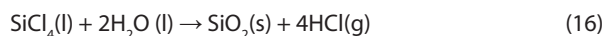
Alle sirkoon bevat hafnium in 'n verhouding van ongeveer 50:1. Hafnium is teenwoordig in die kristalstruktuur van sirkoon. Die chemiese eienskappe van sirkonium en hafnium is byna identies. Ten spyte van hul groot verskil in atoommassa, maak die verskynsel van lantaniedsametrekking hul atoomradius byna identies, wat daartoe lei dat hafnium maklik in die kristalstruktuur van alle sirkoniumverbindings geakkommodeer word.

Die vervaardiging van kerngraadsirkoniumspons begin gewoonlik met die karbochloring van gemaalde sirkoon by temperature van hoër as 1 000 °C. Dit word in 'n sweefbedreaktor onder 'n inerte gasatmosfeer gedoen. Die reaksie word in Vergelyking 15 weergegee. Die teenwoordigheid van hafnium word tussen hakies aangedui.



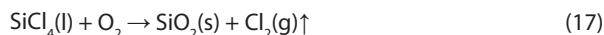
Die $\text{Zr}_{1-x}(\text{Hf})_x\text{Cl}_4$ en SiCl_4 word geskei deur middel van fraksionele distillasie en selektiewe kondensasie, gebaseer op hul verskil in kookpunt. $\text{Zr}_{1-x}(\text{Hf})_x\text{Cl}_4$ het 'n kookpunt van 123 °C en SiCl_4 'n kookpunt van 56 °C. Die SiCl_4 is 'n nuwe produk wat verder gesuiwer kan word deur veelvuldige distillasiestappe om as voerstof vir die vervaardiging van optiese graad-, elektroniese graad- en epitaksiale graad- SiCl_4 gebruik te word.

Dit kan ook as 'n voermateriaal gebruik word om amorfe of pirogeniese silika te vervaardig, soos voorgestel in Vergelyking 16. Pirogeniese silika word in 'n plasma- of vlamreaktor vervaardig.

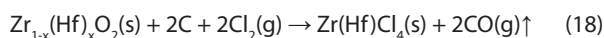


By Necsa in Suid-Afrika is amorfe, of pirogeniese, (Engels: "fumed") silika op loodsaanleg skaal in 'n plasmastelsel uit SiCl_4

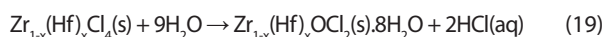
met suurstof eerder as water vervaardig (Vergelyking 17). Dit het die herwinning van chloorgas eerder as die meer stabiele $\text{HCl}(\text{g})$, moontlik gemaak. Die chloorgas kan na die aanvanklike karbochloringstap hersirkuleer word, wat bydra tot die algemene ekonomiese doeltreffendheid van die proses. Amorfe silika is 'n hoëwaardeproduk met verskeie toepassings.



In die kernindustrie word die SiCl_4 -nuwe produk as 'n afvalstroom beskou. Die kernindustrie verkoop dit dus aan die silikonbedryf, of gebruik nie sirkoon as voermateriaal nie, maar koop eerder chemies suiwer sirkonia (ZrO_2) aan vir die karbochloringstap volgens Vergelyking 18. Dit is egter minder koste-effektief as gevolg van die toename in grondstofkoste, maar behels minder produksiestappe.



Die $\text{Zr}_{1-x}(\text{Hf})_x\text{Cl}_4(\text{s})$ word omgeskakel in sirkonielchloried (ZOC) deur hidrolise in water volgens Vergelyking 19. Dit is 'n hewig eksotermiese reaksie en uiters gevaarlik as dit nie goed beheer word nie. Noukeurige beheer van die reaksieparameters soos pH, temperatuur, ens. is nodig om die presipitasie van $\text{Zr}_{1-x}(\text{Hf})_x(\text{OH})_4$ te voorkom.



Tydens die presipitasie van sirkonieloksichloriedoktahidraat (ZOC) bly al die onsuiverhede in oplossing as gevolg van die hoë suurkonsentrasie. Die gepresipiteerde ZOC word gewas en gefiltreer. Dit kan ook uit HCl -oplossings herkristalliseer word om die suiwerheid te verbeter. ZOC word as voermateriaal vir Zr- en Hf-skeiding gebruik. Vir gewone industriële toepassings van sirkoniummetaal het die teenwoordigheid van Hf geen nadelige effek nie. Vir kerntoepassings is dit egter noodsaaklik om die Hf te verwyder as gevolg van die groot neutronabsorpsie-dwarsdeursnee daarvan.

Tabel IV toon die ASTM B349-spesifikasie vir kerngraad-sirkoniummetaal (B349/B349M-03) en Tabel V die neutronabsorpsie-kansvlak van termiese neutrone in barn-eenhede (Schemel, 1977) (kyk Tabel V hier onder). Uit Tabelle IV en V kan gesien word dat daar vir die elemente met 'n hoë termiese neutronabsorpsiedeursnee baie streng spesifikasies is wat betref maksimum toelaatbare konsentrasie (bv. B <0,00005% (m/m), Cd <0,00005% (m/m) en Hf <0,01% (m/m)). Hoewel die ASTM-spesifikasie vir hafnium <0,01% (m/m) is, is die huidige tendens in die kernindustrie om die hafniumkonsentrasie nog verder te verlaag tot <0,005% (m/m). Die rede hiervoor is om die neutronekonomie van 'n kernreaktor te verbeter sowel as om langer verbrandingstye in kernreaktors te behaal.

Die skeiding van hafnium vanuit sirkonium is 'n moeilike en komplekse proses (Kok 2009; Miller 1957; Poriel et al. 2006), as gevolg van die baie soortgelyke chemiese eienskappe van sirkonium en hafnium. Daar is verskeie skeidingsprosesse in die literatuur beskryf, waarvan verskeie gepatenteer is. Die maatskappye wat hierdie tegnologie bemeester het, hou dit gewoonlik streng geheim.

Tabel IV: ASTM B350 spesifikasie vir primêre reaktorgraadsirkoniummetaal

Element	Maksimum (massa%)	mg/kg metaal (dpm)
Al	0,0075	75
B	0,00005	0,5
Cd	0,00005	0,5
C	0,027	270
Cr	0,020	200
Ce	0,002	20
Cu	0,005	50
Hf	0,010	100
Fe	0,1500	1500
H	0,0025	25
O	0,1400	1400
Mg	0,002	20
Mn	0,005	50
Mo	0,005	50
Ni	0,007	70
Si	0,012	120
Ti	0,005	50
W	0,01	100
	0,00035	3.5

Die volgende prosesse word slegs algemeen beskryf: oplosmiddelektaksie, selektiewe presipitasie, ekstraktiewe distillasie, sublimasie, vakuumbdistillasie en ionuutruiling. Die mees algemene oplosmiddels vir ekstraksie is metielisobutielketoon (MIBK) en tributielfosfaat (TBP, n.a.v. die Engels). Oplosmiddelektaksie begin met sirkonium-hafniumoksichloried as 'n wateroplosbare voermateriaal. Selektiewe presipitasie is gebaseer op die geringe verskil tussen die oplosbaarheid van K_2ZrF_6 en K_2HfF_6 (Westhuizen 2010; Branken 2009).

Sublimasie is gebaseer op die verskille in sublimasietemperatuur van $ZrCl_4/HfCl_4$ of ZrF_4/HfF_4 . Hierdie skeidingstegniek behels verskeie opeenvolgende stappe, totdat die spesifikasie van $<100 \text{ mg/kg}^{-1} \text{ Hf}$ bereik word.

Tydens die vervaardiging van kerngraad-sirkoniummetaal word die skeiding van Zr en Hf as die duurste stap in die proses beskou. Voorgesette navorsing word gedoen om alternatiewe skeidingstegnieke te vind, of om bestaande tegnieke te verbeter. Die ekstraksieprosedure is berug daarvoor dat dit die hoë volumes chemiese afval oplewer.

Pogings word ook aangewend vir skeiding deur middel van verskille in hul koördinasiechemie (Viljoen 2007; Steyn 2007).

Ná skeiding word die hafniumverrykte stroom gebruik om hafniummetaal te vervaardig, min of meer op dieselfde manier as wat sirkoniummetaal vervaardig word. Die prys van hafniummetaal is tussen VS\$3 000 en VS\$5 000 per kg, en die vraag daarna is oor die algemeen klein, waarskynlik as gevolg van die hoë verkoopprijs. Hafniummetaal- en hafniumchemikalieë vind egter steeds meer toepassings in gevorderde elektronika, optiese stelsels en die lugvaartindustrie. As gevolg van die relatief hoë termiese neutronabsorpsiedeursnee, word

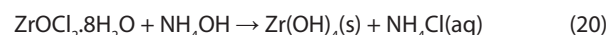
Tabel V: Termiese neutronabsorpsiekansvlak vir sommige elemente en verbindinge (Schemel, 1977)

Spesie	Termiese neutronkansvlak (Barn*)
Magnesium	0,059
Lood	0,17
Sirkonium	0,18
Zircaloy 4	0,22
Aluminium	0,23
Yster	2,56
Austenitiese vlekvrystaal	3,1
Nikkel	4,5
Titaan	6,1
Hafnium	115
Boor	750
Kadmium	2 520
Gadolinium	48 890

*Barn: Eenheid vir die meet van atoomkern-dwarsdeursnee – 1 barn is gelyk aan 10^{-24} cm^2 .

dit ook as beheerstawe in kernreaktors gebruik (MBM 2007; Keller et al. 1982; SMA 2011). Die beheerstawe in sekere kernreaktors word van disprosiumhafnaat ($Dy_2O_3 \cdot HfO_2$) vervaardig.

Die hafniumvrye sirkoniumstroom word met ammoniak as $Zr(OH)_4$ volgens Vergelyking 20 presipiteer. Die presipitasietoestande word noukeurig beheer as gevolg van moontlike polimerisasie en jelvorming, wat baie stadige filtrasie en wassing van die presipitaat kan veroorsaak. Alle oorblywende spoor-elementkontaminasie word tydens hierdie stap verwyder.



Na filtrasie word die $Zr(OH)_4$ by hoë temperatuur volgens Vergelyking 21 tot ZrO_2 gekalsineer.



Hierdie ultrasuiwer ZrO_2 word dan uiteindelik deur middel van karbochlorering in $ZrCl_4$ omgeskakel om as voermateriaal vir sirkoniummetaalproduksie via die Kroll-proses gebruik te word. $ZrCl_4$ is higroskopies en moet te alle tye in 'n inerte atmosfeer hanteer word. Die teenwoordigheid van H en O is nadelig in die vervaardigingsproses van sirkoniummetaal.

Kerngraadsirkoniumspons

Die Kroll-proses, soos ontwikkel deur die Amerikaanse Buro vir Mynwese, is welbekend en word al vir meer as 50 jaar gebruik, veral in die vervaardiging van titaan- en sirkoniummetaal ((Kroll et al. 1946; Miller 1957). Die Van Arkel-De Boer-proses (Nielsen et al. 2001) is 'n ander metaalreduksieproses. Die Kroll-proses is egter steeds die voorkeurmethode op industriële skaal. Magnesium word as reduktant gebruik, maar kalsium kan ook gebruik word. Die reaksie is eksotermies, maar benodig aktiveringsenergie om te begin en word gewoonlik in enkelladingsreaktors tussen 800°C en $1\,200^\circ\text{C}$ uitgevoer (Vergelyking 22):



Hierdie afgekoelde, soliede gietstaaf bevat steeds MgCl_2 as 'n nuwe produk, wat deur hoëtemperatuur-vakuumboogsmelting of in 'n elektronbundeloond verwyder kan word. Tydens hierdie proses word die MgCl_2 verdamp (kookpunt = 1 412 °C), wat 'n sponsagtige suiwer sirkoniummetaal, sogenaamde sirkoniumspons, agterlaat. Hierdie primêre sirkoniummetaal, wat nou aan kernspesifikasies voldoen wat suiverheid betref, word gebruik vir die vervaardiging van sirkoniumlegerings.

Al die bogenoemde prosesse word in 'n inerte atmosfeer uitgevoer om kontaminasie deur C, H en O te vermy. Sirkoniummetaal het 'n groot affiniteit vir suurstof en koolstof (Blumental 1958). Die teenwoordigheid van hierdie elemente het nadelige metallurgiese effekte op die finale metaal, veral in 'n kernreaktormgewing. Die teenwoordigheid van waterstof sal waterstofverbrossing veroorsaak, wat vererger word deur blootstelling aan straling (Kok 2009). Suurstofvlakke moet tussen 500 en 2 000 mg/kg⁻¹ beheer word. Wanneer sirkoniummetaal by omgewingstemperatuur aan lug of water blootgestel word, vorm daar onmiddellik 'n selfbeskermende sirkoniumoksiedlaag op die oppervlak. Sirkoniumkarbid vorm by die korrelkoppelvlakke en het 'n effek op die meganiese sterkte van die sirkoniumkomponent.

Vervaardiging van sirkoniumlegerings

Suiwer sirkoniummetaal het nie die metallurgiese eienskappe wat in kernkomponente vereis word nie. Onder normale toestande is sirkoniummetaal chemies inert en korrosiebestand as gevolg van sy stabiele beskermende oksiedlaag. In die aggressiewe toestande in 'n kernreaktor, waar dit blootgestel word aan watertemperature van 300 °C tot 400 °C, of selfs

superverhitte stoom (na gelang van van die tipe reaktor), is dit egter geneig tot oksidasie. Oor die algemeen is 'n kernreaktor gelisensieer om 'n maksimum sirkoniumoksiedlaag van minder as 100 µm toe te laat.

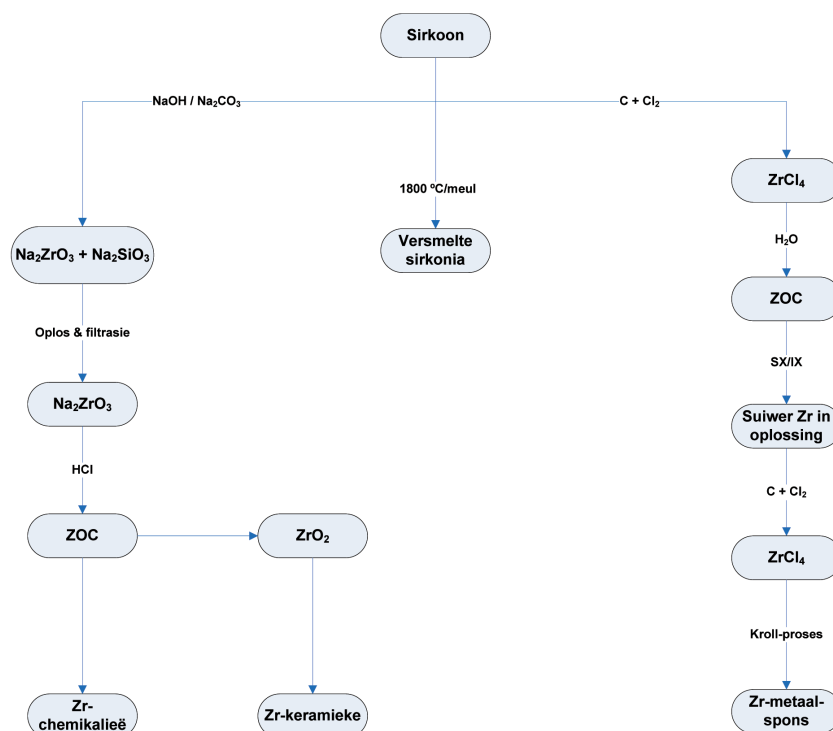
Sirkonium en die legerings daarvan vertoon sterk anisotropiese gedrag. Gevolglik sluit legering van sirkonium die byvoeging van alfa- en betastabiliserings-elemente in (Davis 2008). Onder bestralingstoestande neem die korrosietempo van sirkonium eksponensieel toe met verbrandingstyd in die kernreaktor. Om die korrosiebestandheid en meganiese en metallurgiese eienskappe te verbeter, word die sirkoniummetaal geleger. Gedurende die afgelope paar dekades is verskeie sirkoniumlegerings ontwikkel om aan streng kernspesifikasies te voldoen. Die bekendste sirkoniumlegering is die Zircaloy™-reeks, en die Zr-2.5Nb-legering.

Zircaloy™ 1 en 2 is ontwikkel om meganiese en metallurgiese eienskappe te verbeter deur Sn by die legering te voeg. Daar is later ontdek dat Sn 'n nadelige effek op die korrosiebestandheid van sirkoniumlegerings teen hoër kernverbrandingstempo's het, en Sn is deur Nb vervang – die byvoeging van Nb verbeter die korrosiebestandheid van sirkoniumlegerings. Baie ander vervaardigers het die voorbeeld gevolg en daar is tans talle sirkoniumlegerings beskikbaar. Sommige van hierdie handelsname is Zirlo, Ziron, HIFI, Dx, E115, ens. Daar moet in gedagte gehou word dat verskillende tipes kernreaktore gewoonlik verskillende sirkoniumlegerings benodig. Oor die algemeen word niobiuminhoud van 0,8 tot 1,2% vir kernbekledingsmateriaal gespesifiseer, hoewel sommige legerings 'n niobiuminhoud van tot 2,5% het. Die vervaardigers van sirkoniumlegerings hou gewoonlik hul finale samestelling geheim.

Om die legerings te berei, word die soliede sirkoniumsponsblok in stukke van 10–20 mm fyngemaak. Herwonne sirkoniumafval word ook bygevoeg. Die legeringselemente word bygevoeg, materiaal geper en in vakuumbooggoonde gesmelt. Hierdie proses word drie tot vier keer herhaal om volledige homogeniteit van die legering te verseker. Dit produseer 'n gietstaaf van tot 6 m lank en 400–500 mm in deursnee, wat 'n paar ton weeg. Hierdie gietstaaf word gebruik om sirkoniumlegeringskomponente vir die kernindustrie vervaardig.

Opsomming

Die blokdiagram in Figuur 10 bied 'n breë oorsig van die verwerkingstappe van sirkoon tot verskillende eindprodukte. Verskeie variasies op hierdie prosesse word in die tegniese en patentliteratuur beskryf. Industrieel impliseer elk van die prosesse gewoonlik 'n afsonderlike chemiese aanleg, elk met verskeie tussenstappe of afsonderlike eenheidsbedrywighede.



Figuur 10: Oorsigtelike prosesseringstappe vir die veredeling van sirkoon

Daar is verskeie goed ontwikkelde prosesse vir die vervaardiging van 'n reeks sirkoniumchemikalieë. Hierdie chemikalieë kan op hul beurt gebruik word om monokliniese sowel as gestabiliseerde sirkoniumoksiede te berei. In die meeste van die prosesse wat hierbo beskryf word, word ZOC as voerstof gebruik. Sirkoniumhidroksied kan onder verskillende toestande gepresipiteer en termies tot sirkonia ontbind word. Dit is duidelik uit die literatuur dat daar geen enkele en eenvoudige proses is om nanosirkonia te vervaardig nie. Na gelang van van toestande soos pH, temperatuur, konsentrasie en veroudering word mengsels van monokliniese en tetragonale sirkoniumoksiede produseer. Dit is egter duidelik dat resultate van laboratorium tot laboratorium kan verskil, na gelang van van die prosesse wat gebruik word.

Meer as 85% van alle sirkoniummetaal wat vervaardig word, word as kernkomponente en as kernbrandstofbekledingsmateriaal gebruik. Verskeie chemiese stappe en prosesse is nodig om kerngraadsirkoniummetaal te vervaardig. Die aanvanklike verwerkingstap is karbochlorering. Skeiding van Zr en Hf is die duurste en mees komplekse van die prosesse. In die legerings- en vervaardigingsproses van metale word streng beheer oor verskeie parameters vereis vir voldoening aan metallurgiese en meganiese spesifikasies vir gebruik in 'n kernreaktoromgewing.

Hoewel Suid-Afrika die tweedegrootste produsent van sirkoon ter wêreld is, word byna geen plaaslike veredeling gedoen nie.

Dankbetuigings

Die skrywers bedank dr. Johann Nel vir tegniese insette, en mnr. Nols Jansen vir taalkundige versorging.

Datums:

Ontvang 25/03/2023
Aanvaar: 27/06/2023
Gepubliseer: 21/08/2023

Bibliografie

Abdelkader, A.M. & Daher, A., 2008, Studies on the preparation of pure zirconia from Rosetta zircon via two alternative hydrometallurgical processes, *Isotope and Radiation Research* 40, 73-90.

Abdelkader, A.M., Daher, A., El-Kashef, E., 2008, Novel decomposition method for zircon, *Journal of Alloys and Compounds* 460, 577-580. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2007.06.032>

Adamski, A., Jakubus, P., Sojka, Z., 2006, A synthesis of nanostructured tetragonal ZrO₂ of enhanced thermal stability, *Nukleonika* 51, S27-S33.

Ahmen, M.A.K., Fjellvag, H., Kjekshus, A., 1999, Synthesis and characterization of zirconium and hafnium sulfates hydroxide sulfates and oxide sulfates, *Acta Chemica Scandinavica*, 53, 24-33. <https://doi.org/10.3891/acta.chem.scand.53-0024>.

Al-Hazmi, M.H., Choi, Y., Apblett, A.W., 2014, Preparation of zirconium oxide powder using zirconium carboxylate precursors, *Advances in Physical Chemistry* 2014, 1-8. <https://doi.org/10.1155/2014/429751>.

ASTM B349/B349M-03. Standard specification for zirconium sponge and other forms of virgin metal for nuclear application.

Atherton, M.D., Sutcliffe, H., 1988, The azeotropic dehydration and dehydrochlorination of ZrOCl₂·8H₂O, *Journal of the Less-Common Metals*, 138, 63-70. [https://doi.org/10.1016/0022-5088\(88\)90235-4](https://doi.org/10.1016/0022-5088(88)90235-4).

Ayala, J.M., Verdeja, L.F., Garcia, M.P., et al., 1992, Production of zirconia powders from the basic disintegration of zircon, and their characterization, *Journal of Materials Science* 27, 458-463. <https://doi.org/10.1007/BF00543938>.

Ayral, A., Assih, T., Abenoza, M., et al., 1990, Zirconia by the gel route, *Journal of Materials Science* 25, 1268-1274. <https://doi.org/10.1007/BF00585435>.

Barawy, K.E.E., Tawil, S.Z.E., Francis, A.A., 2000, Alkali fusion of zircon sand, *Mineral Processing and Extractive Metallurgy* 109(1), C49-C56. <https://doi.org/10.1179/mpm.2000.109.1.49>.

Barraud, E., Bègin-Colin, S., Le Caër, G., et al., 2006, Thermal decomposition of HfCl₄ as a function of its hydration state, *Journal of Solid State Chemistry* 179, 1842-1851. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2006.02.027>.

Beden, B. & Guillaume, I., 1970, Decomposition thermique a l'air ambiant du tetrachlorure de zirconium, *Comptes Rendus Hebdomadaires des Seances de l'Academie des Science Paris. Serie C, Sciences Chimiques* C270, 198-201.

Beden, B., Guillaume, I. & Laffitte, P., 1969, Decomposition thermique a l'air ambiant du chlorure de zirconyle octohydrate. *Comptes Rendus de l'Academie des Science Paris T*(269), 1629-1632.

Bell, R.N., 1970, Preparation of carbonated zirconium hydrate in readily filterable form from zirconium chloride, *United States Patent Application* 3 510 254.

Berry, F.J., Skinner, S.J., Bell, I.M., et al., 1999, The influence of pH on zirconia formed from zirconium(IV) acetate solutions: Characterization by X-ray diffraction and Raman spectroscopy, *Journal of Solid State Chemistry* 145, 394-400. <https://doi.org/10.1006/jssc.1998.8095>.

Biswas, R.K., Habib, M.A., Karmakar, A.K., et al., 2010, A novel method for processing of Bangladeshi zircon Part I: Baking, and fusion with NaOH, *Hydrometallurgy* 103, 124-129. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2010.03.009>.

Biswas, R.K., Habib, M.A., Kakmakar, A.K., et al., 2012, Preparation of some useful compounds of zirconium from Bangladeshi zircon, *Industrial & Engineering Chemistry Research* 51, 13552-13561. <https://doi.org/10.1021/ie301412b>.

Blumenthal, W.B., 1958, The Chemical Behaviour of Zirconium, Princeton New Jersey, D. Van Nostrand Company Inc.

Branken, D.J., 2009, Separation of Zr and Hf via fractional crystallization of K₂Zr(Hf)F₆: A Theoretical and Experimental Study. MSc Thesis, North-West University.

Castor, W.S., & Basolo, F., 1953, Properties of hydrates. I. Kinetic identification of compounds formed between salt and water, *Journal of American Chemical Society* 75, 4804-4807. <https://doi.org/10.1021/ja01115a054>.

Chatterjee, M., Ray, J., Chatterjee, A., et al., 1989, Characterisation of basic zirconium sulphate, a precursor to zirconia, *Journal of Materials Science Letters* 8, 548-550. <https://doi.org/10.1007/BF00720293>.

Chou, K.S., & Chou, Y.S., 1988, Crystallization behaviour of zirconyl oxychloride octahydrate, *Journal of the Chinese Institute of Chemical Engineers* 19, 250-254.

Chuah, G.K., Jaenicke, S., Cheong, S.A., et al., 1996, The influence of preparation conditions on the surface area of zirconia, *Applied Catalyst A: General* 145, 267-284. [https://doi.org/10.1016/0926-860X\(96\)00152-4](https://doi.org/10.1016/0926-860X(96)00152-4).

Clearfield, A., & Vaughan, P.A., 1956, The crystal structure of zirconyl chloride octahydrate and zirconyl bromide octahydrate, *Acta Crystallographica* 9, 555-558. <https://doi.org/10.1107/S0365110X56001558>.

Da Silva, R.J.F., Dutra, A.J.B., Afonso, J.C., 2012, Alkali fusion followed by a two-step leaching of a Brazilian zircon concentrate, *Hydrometallurgy* 117-118, 93-100. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2012.02.011>.

Davis, J.R., 2008, Metals Handbook, Desk Edition, ASM International, Fourth Printing.

Denkewicz, R.P., Tenhuisen, K.S., Adair, J.H., 2011, Hydrothermal crystallization kinetics of m-ZrO₂ and t-ZrO₂, *Journal of Materials Research* 5, 2698-2705. <https://doi.org/10.1557/JMR.1990.2698>.

Dirksen, J.A., 1992, The precipitation of basic zirconium sulfate in a continuous stirred tank reactor as a precursor to zirconia ceramics. PhD Thesis, University of Utah.

DMR., 2011, A Beneficiation Strategy for the Minerals Industry of South Africa. In: Resources, DOM. (ed.). Republic of South Africa.

Fenner, J., 1981, Process for the preparation of basic zirconium carbonate of high purity, *Republic of Germany Patent Application* 163, 406.

Gavrilov, V.Y., & Zenkovets, G.A., 2000, Formation of the pore structure of zirconium dioxide at the stage of gel aging, *Kinetics and Catalysis* 41, 561-565. <https://doi.org/10.1007/BF02756076>.

George, A., & Seena, P.T., 2011, Thermal studies on zirconium hydroxide gel formed by aqueous gelation, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 110, 1037-1041. <https://doi.org/10.1007/s10973-011-2042-3>.

Gimblett, F.G.R., Hussain, A., Sing, K.S.W., 1988, Thermal and related studies of some basic zirconium salts, *Journal of Thermal Analysis* 34, 1001-1013. <https://doi.org/10.1007/BF01913505>.

Guo, G.Y., & Chen, Y.L., 2004, Preparation and characterization of a novel zirconia precursor, *Ceramics International* 30, 469-475. [https://doi.org/10.1016/S0272-8842\(03\)00133-0](https://doi.org/10.1016/S0272-8842(03)00133-0).

Guo, G.Y., & Chen, Y.L., 2005, A nearly pure monoclinic nanocrystalline zirconia, *Journal of Solid State Chemistry* 178, 1675-1682. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2005.03.005>.

Helgi. 2023. Zircon Minerals Production [Online]. Available from: <https://www.helgilibrary.com/indicators/zirconium-minerals-production/>. Accessed 11 January 2023.

Henderson, A.W., & Higbie, K.B., 1954, An improved method for obtaining high-purity zirconium and hafnium oxides, *J Am Chem Soc* 76(22), 5878-5879. <https://doi.org/10.1021/ja01651a103>.

Hollitt, M.J., MacLelland, R.A., Liddy, M.L., et al., 1995, Removal of radioactivity from zircon.

IndustryARC., 2023, Zircon Market - Forecast (2023-2028) [Online]. Available from: <https://www.industryarc.com/Research/Zirconium-Market-Research-509372>. Accessed 11 January 2023.

- Inoue, S., Oki, H., Hagiwara, Z., 1975, The nature of the thermal decomposition products of zirconium salts, *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry* 37, 929-936. [https://doi.org/10.1016/0022-1902\(75\)80674-9](https://doi.org/10.1016/0022-1902(75)80674-9).
- Jakubus, P., Adamski, A., Kurzawa, M., et al., 2003, Texture of zirconia obtained by forced hydrolysis of ZrOCl₂ solutions, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 72, 299-310. <https://doi.org/10.1023/A:1023952627054>.
- Judes, J., & Kamaraj, V., 2008, Sol-gel preparation and characterization of ceria stabilized zirconia minispheres, *Journal of Sol-Gel Science and Technology* 49, 159-165. <https://doi.org/10.1007/s10971-008-1853-6>.
- Judes, J., & Kamaraj, V., 2009, Preparation and characterization of yttria stabilised zirconia minispheres by the sol-gel drop generation method, *Material Science-Poland* 27, 407-415.
- Keller, H.W., Ballenberger, J.M., Hollein, D.A., et al., 1982, Development of hafnium and comparison with other pressurized water reactor control rod materials, *Nuclear Technology* 59, 476. <https://doi.org/10.13182/NT82-A33005>.
- Kernia, V.R., Baryshnikov, N.V., Nekhamkin N.L.G., 1984, Formation of basic zirconium carbonate from the basic sulfate, *Zhurnal Prikladnoj Khimii* 57, 1214-1216.
- Kok, K.D., 2009, Nuclear Engineering Handbook, CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9781420053913>.
- Kostrikin, A.V., Spiridonov, F.M., Komissarova, L.N., et al., 2010, On the structure and dehydration of hydrous zirconia and hafnia xerogels, *Russian Journal of Inorganic Chemistry* 55, 866-875. <https://doi.org/10.1134/S0036023610060070>.
- Kroll, W.J., Schlechten, A.W., Yerkes, L.A., 1946, Ductile zirconium from zircon sand *Journal of the Electrochemical Society*, 89, 263. <https://doi.org/10.1149/1.3071711>.
- Levins, D.M., Day, R.A., McGlinn, P.J., et al., 1995, Characterization and removal of radioactivity in mineral sand concentrates, *Sydney Australia: Australian Nuclear Science and Technology Organisation (ANSTO)*.
- Liu, D.M., 1998, Desilication of zirconia from submicron-sized to nano-sized powder particles, *Journal of Materials Science Letters* 17, 467-469.
- Liu, R., Qu, J., Song, J., et al., 2014, Analysis of water leaching and transition processes in zirconium oxychloride octahydrate production, *Ceramics International* 40, 1431-1438. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2013.07.026>.
- Lubbe, S., Munsami, R., Fourie, D., 2012, Beneficiation of zircon sand in South Africa. *Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*, 7A, 583-588.
- Lubbe, S.J., 2023, Eie data.
- Mak, T.C.W., 1968, Refinement of the crystal structure of zirconyl chloride octahydrate, *Canadian Journal of Chemistry* 46, 3491-3497. <https://doi.org/10.1139/v68-579>.
- Manhique, A., Kwela, Z., Focke, W.W., 2003, De Wet process for the beneficiation of zircon: Optimization of the alkali fusion step, *Ind Eng Chem Res* 42, 777-783. <https://doi.org/10.1021/ie020140c>.
- Matijevic, E., Watanabe, A., Kerker, M., 1969, Precipitation and complex solubility of zirconium sulfate, *Kolloid-Zeitschrift und Zeitschrift fur polymere* 235, 1200-1203. <https://doi.org/10.1007/BF01542529>.
- MBM., 2007, Hafnium. *Metals Bulletin Monthly*.
- Miller, G.L., 1957, Metallurgy of the Rarer Metals - Zirconium, Butterworth Publications.
- Nel, J.T., Du Plessis, W., Nhlabathi, T.N., et al., 2011, Reaction kinetics of the microwave enhanced digestion of zircon with ammonium acid fluoride, *Journal of Fluorine Chemistry* 132, 258-262. <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2011.01.012>.
- Nielsen, R.H., & Govro, R.L., 1956, Zirconium purification using basic sulphate precipitation, *Bureau of Mines, Report of Investigation. United States Department of the Interior*.
- Nielsen, R.H., Schlewit, J.H., Nielsen, H., 2001, Zirconium and Zirconium Compounds, John Wiley and Sons. https://doi.org/10.1002/14356007.a28_543.
- Petrinin, V.F., Popov, V.V., Hongzhi, Z., et al., 2004, Synthesis of nanocrystalline high-temperature zirconia phases, *Inorganic Materials* 40, 251-258. <https://doi.org/10.1023/B:INMA.0000020523.89340.46>.
- Phillips, R.F., 1977, Preparation of ammonium and potassium carbonates, *England Patent Application* 623, 992.
- Phillips, R.F., 1978, Aqueous polymeric dispersion made thixotropic by certain ammonium or potassium carbonates, *England Patent Application* 713, 637.
- Pokhodenko, V.N., Fedoryako, L.I., Tselik, I.N., et al., 1972, The properties of basic zirconium carbonates, *Russian Journal of Inorganic Chemistry* 17, 1359-1362.
- Pokhodenko, V.N., & Tselik, I.N., 1976, Method of producing basic zirconium carbonate. *Odessa USSR Patent Application* 497,149.
- Poriel, L., Favre-Reguillon, A., Pellet-Rostaing, S., et al., 2006, Zirconium and hafnium separation, Part 1, *Separation Science and Technology* 41, 1927-1940. <https://doi.org/10.1080/01496390600725802>.
- Powers, D.A., Gray, H.B., 1973, Characterization of the thermal dehydration of zirconium oxide halide octahydrates, *Inorganic Chemistry* 12, 2721-2726. <https://doi.org/10.1021/ic50129a045>.
- Puclin, T., Kaczmarek, W. A. & Ninham, B. W. 1995. Mechanochemical processing of ZrSiO₄. *Materials Chemistry and Physics*, 40, 73-81. [https://doi.org/10.1016/0254-0584\(94\)01471-R](https://doi.org/10.1016/0254-0584(94)01471-R)
- Roskill, 2011, Zirconium, Global Markets and Outlook. 13th Edition.
- Rubio, E., Rodriguez-Lugo, V., Rodriguez, R., et al., 2009, Nano zirconia and sulfated zirconia from ammonia zirconium carbonate, *Reviews on Advanced Materials Science* 22, 67-73.
- Ryu, T., Choi, Y.J., Hwang, S., et al., 2010, Synthesis of yttria-stabilized zirconia nanopowders by a thermal plasma process, *Journal of the American Ceramic Society* 93, 3130-3135. <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2010.03843.x>.
- Sato, T., 2002, The thermal decomposition of zirconium oxyhydroxide, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 69, 255-265. <https://doi.org/10.1023/A:1019962428910>.
- Sato, T., Ozawa, F., Nakamura, T., et al., 1979, Thermal decomposition of zirconium hydroxide, *Thermochimica Acta* 34, 211-220. [https://doi.org/10.1016/0040-6031\(79\)87110-5](https://doi.org/10.1016/0040-6031(79)87110-5).
- Schemel, J.H., 1977, ASTM Manual on Zirconium and Hafnium. <https://doi.org/10.1520/STP639-EB>.
- Shiaw-Tseh Chiang, A., 2015a, The production of dispersible zirconia nanocrystals: A recent patent review, *Recent Innovations in Chemical Engineering* 7, 76-95. <https://doi.org/10.2174/2405520407666150425003612>.
- Shiaw-Tseh Chiang, A., 2015b, The production of dispersible zirconia nanocrystals: A recent patent review, *Recent Innovations in Chemical Engineering* 7, 76-95. <https://doi.org/10.2174/2405520407666150425003612>.
- Skidmore, C., 2010, Personal communication.
- SMA, 2011, Hafnium - Small Supply, Big Applications. In: Assets, S. M. (ed.).
- Snyder, M., Frogatt, A., Thomas, S., 2011, The World Nuclear Status Report.
- Snyders, E., 2005a, Production of inorganic doped-zircon pigments. South Africa Patent Application.
- Snyders, E., 2005b, Upgrading of zircon. South Africa Patent Application.
- Snyders, E., 2007, The upgrading of zircon to a superior opacifier. DTech Thesis, Tshwane University of Technology, Pretoria.
- Squatrinio, P.J., Rudolf, P.R., Clearfield, A., 1987, Crystal structure of a complex basic sulphate, *Inorganic Chemistry* 26, 4240-4244. <https://doi.org/10.1021/ic00272a020>.
- Srinivasan, R., & Davis, B.H., 1997, Zirconia: A review of a super ceramic. In: Perry, D. L. (ed.) *Material Synthesis and Characterization*. https://doi.org/10.1007/978-1-4899-0145-3_8.
- Štefanić, G., Popović, S., Musić, S., 1997, Influence of pH on the hydrothermal crystallization kinetics and crystal structure of ZrO₂, *Thermochimica Acta* 303, 31-39. [https://doi.org/10.1016/S0040-6031\(97\)00243-8](https://doi.org/10.1016/S0040-6031(97)00243-8).
- Stevens, R., 1986, Zirconia and Zirconia Ceramics, Magnesium Elektron Ltd.
- Steyn, M., 2007, Speciation and interconversion mechanism of mixed fluoro O,O'- and O,N-bidentate ligand complexes of zirconium. MSc Dissertation, University of the Free State.
- Strydom, C.A., & Pretorius, G., 1993, The thermal decomposition of zirconium sulphate hydrate, *Thermochimica Acta* 223, 223-232. [https://doi.org/10.1016/0040-6031\(93\)80138-Z](https://doi.org/10.1016/0040-6031(93)80138-Z).
- US Geological Survey (USGS), 2011, Mineral Commodity Summaries 2011. <https://doi.org/10.3133/mineral2011>.
- Tanabe, K., 1985, Surface properties of ZrO₂, *Materials Chemistry and Physics* 13, 347-364. [https://doi.org/10.1016/0254-0584\(85\)90064-1](https://doi.org/10.1016/0254-0584(85)90064-1).
- Tredici, I.G., Maglia, F., Dapiaggini, M., et al., 2012, Synthesis of bulk tetragonal zirconia without stabilizer: The role of precursor nanopowders, *Journal of the European Ceramic Society* 32, 343-352. <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2011.09.022>.
- UxC Consulting Services., 2011, Nuclear Zirconium Market.
- Viljoen, J.A., 2007, Speciation and interconversion mechanism of mixed fluoro O,O'- and O,N-bidentate ligand complexes of hafnium. MSc Dissertation, University of the Free State.
- Vivekanandhan, S., Venkateswarlu, M., Rawls, H.R., et al., 2007, Novel acrylamide assisted polymeric citrate route for the synthesis of nanocrystalline ZrO₂ powders for dental applications, *NSTI-Nanotech* 2007, 4, 293-296.
- Wang, C., Zinkevich, M., Aldinger, F., 2007, Phase diagrams and thermodynamics of rare-earth-doped zirconia ceramics, *Pure and Applied Chemistry* 79(10). <https://doi.org/10.1351/pac200779101731>.
- Welham, N.J., Walmsley, L., 2000, Solubilization of zircon by mechanically induced solid-state cation exchange with alkaline earth oxides, *Mineral Processing and Extractive Metallurgy* 109, 57-60. <https://doi.org/10.1179/mpm.2000.109.1.57>.
- Van der Westhuizen, D.J., 2010, Separation of zirconium and hafnium via solvent extraction. MSc Dissertation, North-West University.
- Xu, X., & Wang, X., 2009, Fine tuning of the sizes and phases of ZrO₂ nanocrystals, *Nano Research* 2, 891-902. <https://doi.org/10.1007/s12274-009-9092-x>.
- Yanaguchi, T., 1994, Application of ZrO₂ as a catalyst and a catalyst support, *Catalyst Today* 20, 199-218. [https://doi.org/10.1016/0920-5861\(94\)80003-0](https://doi.org/10.1016/0920-5861(94)80003-0).
- Yapryntsev, A.D., Baranchikov, A.E., Gubanov, N.N., et al., 2012, Synthesis of nanocrystalline ZrO₂ with tailored phase composition and microstructure under high-power sonication, *Inorganic Materials* 48, 494-499. <https://doi.org/10.1134/S0020168512050214>.
- Zircomet, 2023, Zircon sand pricing [Online]. Available from: <http://www.zircomet.com/>. Accessed 12 January 2023.

Telepraktyk en die behandeling van volwassenes met primêre en sekondêre spierspanningsdisfonie: 'n Omvangsbepaling

M Theron,¹ D Klop,¹ H Theron²

¹Afdeling Spraak-Taal- en Gehoortherapie, Fakulteit Geneeskunde en Gesondheidswetenskappe, Universiteit van Stellenbosch, Suid-Afrika

²De Mist Praktyk, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: M Theron **E-pos:** therontherapy@gmail.com

Agtergrond: Spierspanningsdisfonie (SSD) verwys na 'n stemprobleem (disfonie) wat veroorsaak word deur die wangebruik van 'n persoon se stembande. Die COVID-19-pandemie het die gebruik van telepraktyk in gesondheidsorg na vore gebring. Hierdie artikel het die behandeling van spierspanningsdisfonie in volwassenes deur die gebruik van telepraktyk ondersoek.

Doelstellings: Om die bestaande literatuur sistematies te ondersoek deur middel van 'n omvangsbepaling en te bepaal wat bekend is oor die onderwerp; en om spraakterapeute bekend met telepraktyk vir stemprobleme te raadpleeg om die bevindinge te kontekstualiseer in die Suid-Afrikaanse gesondheidsorgkonteks.

Metode: 'n Omvangsbepaling is volgens die PRISMA-ScR-raamwerk uitgevoer. Slegs studies oor telepraktyk vir die behandeling van primêre SSD wat tussen 2000 en 2022 gepubliseer is, is ingesluit. Ses spraakterapeute wat tans in privaat praktyke in die Wes-Kaap en Gauteng werksaam is, is geraadpleeg oor die bevindinge.

Resultate: Die soektog van vyf databasisse het aanvanklik 121 studies opgelewer, maar slegs 4 artikels het aan die insluitingskriteria voldoen. Die deelnemers aan die konsultasiefase se response is ontleed ten opsigte van hulle menings oor die bevindinge in die artikels, toepassing daarvan op hul eie ervaring in hul praktykvoering, en implikasies vir die Suid-Afrikaanse konteks.

Gevolgtrekking: Telepraktyk vir primêre en sekondêre spierspanningsdisfonie bied potensieel baie voordele, en kan dienslewering in gesondheidsorg in Suid-Afrika bevorder en verbeter. Probleme met tegnologie, toegang tot die internet en elektrisiteitsvoorsiening, en weerstand deur pasiënte en terapeute kan egter juis die persone wat die meeste benadeel word deur ongelykhede in gesondheidsorg, nog verder benadeel.

Sleutelwoorde: telepraktyk; primêre en sekondêre spierspanningsdisfonie, stemprobleme; omvangsbepaling

Telepractice and the treatment of adults primary and secondary muscle tension dysphonia: A Scoping review:

Background: Muscle tension dysphonia (MTD) refers to a voice problem caused by the misuse of a person's vocal folds. The Covid-19 pandemic brought the use of telepractice in healthcare to the fore. This article investigated the treatment of MTB in adults through the use of telepractice.

Aims: To systematically investigate the current literature by means of a scoping review to determine what is known about the topic; and to consult speech therapists familiar with telepractice to contextualise the findings in the South African health care context.

Method: A scoping review was conducted according to the PRISMA-ScR framework. Only studies about telepractice for the treatment of MTB published between 2000 and 2022 were included. Six speech therapists currently working in the private sector in the Western Cape and Gauteng were consulted about the findings of the review.

Results: A database search yielded 121 studies, but only 4 articles complied with the inclusion criteria. Responses from the participants in the consultation phase were analysed in terms of their opinions regarding the findings reported in the selected articles, application to their own telepractice experiences in private practice, and implications for the South African context.

Conclusion: Telepractice for primary and secondary muscle tension dysphonia has many advantages and could enhance and improve service delivery in the South African health care context. However, problems with technology, internet access and electricity supply, and resistance from patients and therapists may aggravate the disadvantages of persons already disadvantaged by inequalities in health care.

Key words: telepractice; primary and secondary muscle tension dysphonia; voice disorders; scoping review

Agtergrond

Die COVID-19-pandemie het 'n drastiese uitwerking op die voorsiening van gesondheidsorgdienste in Suid-Afrika gehad. Sosiale inperking en veiligheidsbewustheid ten opsigte van COVID-19-voorkoming het noodgedwonge aanpassings in tradisionele maniere van mediese dienslewering en terapie meegebring. Hoewel telepraktyk reeds vóór die pandemie wêreldwyd in gesondheidsorg gebruik is, het die inperkings tydens grendeltyd hierdie vorm van gesondheidsorg in die kollig geplaas. Sommige pasiënte en gesondheidswerkers het telepraktyk as 'n koste-effektiewe en doeltreffende alternatief tot konvensionele terapie en dienslewering ervaar en toeneemend daarvan begin gebruikmaak, selfs nadat grendeltyd opgehef is. Ander gesondheidswerkers en pasiënte het met verligting weer teruggekeer na konvensionele aangesig-tot-aangesig-interaksie tydens dienslewering.

In Suid-Afrika het telepraktyk dikwels die voorkeurvorm van intervensie in spraaktaal terapie geword, aangesien die pasiënt en die spraakterapeut nie in direkte fisiese kontak tydens 'n terapiessessie hoef te wees nie. Die prosedures wat gevolg word in die assessering en behandeling van stemprobleme vereis stemgewing en aspirasie, wat die risiko aansienlik verhoog dat die COVID-19-virus deur druppelbesmetting tydens direkte kontak tussen pasiënt en spraakterapeut oorgedra kon word (Becker en Gillespie, 2021). Maatreëls vir persoonlike beskerming soos gesigsmaskers, selfs deursigtige maskers of skerms, belemmer egter die visualisering en ouditiewe kwaliteit van die prosedures en beïnvloed kliniese besluitneming en effektiewe behandeling (Cantarella et al., 2020). Hierdie artikel fokus op gebruik van telepraktyk in spraaktaal terapie vir die behandeling van 'n spesifieke tipe stemprobleem, naamlik primêre spierspanningsdisfonie.

Telepraktyk: Wat is dit en wat is die voor- en nadele daarvan?

Telepraktyk is die gebruik van tegnologie om gesondheidsorgdienste op enige ander manier as direkte kontak tussen terapeute en kliënte te lewer. Die Wêreldgesondheidsorganisasie (WHO, 2019) definieer telegesondheid as: "Die lewering van gesondheidsorgdienste, waar afstand 'n kritieke faktor is, deur gesondheidsorgpersoneel wat inligting- en kommunikasietegnologieë gebruik vir die uitruil van geldige inligting vir diagnose, behandeling en voorkoming van siektes en beserings, navorsing en evaluering, en vir die voortgesette opleiding van gesondheidsorgverskaffers, alles in die belang van die bevordering van die gesondheid van individue en hul gemeenskappe" (p9). Telegesondheid staan ook bekend as telegeneeskunde, telepraktyk en telerehabilitasie. Vir die doel van hierdie artikel sal die term "telepraktyk" gebruik word. Die Amerikaanse Spraak-Taal-Gehoorvereniging (ASHA, 2002) definieer telepraktyk as die toepassing van telekommunikasietegnologie om professionele dienste oor 'n afstand te lewer en kliënte en klinici, of klinici met klinici, te verbind vir assessering, intervensie en/of konsultasie.

Daar is drie maniere waarop telepraktyk in stemterapie aangebied kan word, naamlik sinkronies, asinkronies of 'n kombinasie

hiervan. Sinkroniese metodes van telepraktyk vind in die hede plaas deur middel van direkte audio- of videoverbindings, gewoonlik in die vorm van 'n webgebaseerde videokonferensie tussen die terapeut en die pasiënt, die terapeut en 'n groep pasiënte of die terapeut, 'n ander spesialis en die pasiënt. Met asinkroniese telepraktyk vind geen direkte kontak vind tussen die terapeut en die pasiënt plaas nie, maar diensverskaffing vind plaas in die vorm van gestoorde inligting wat deur die pasiënt of terapeut opgeroep kan word vir evaluering of toepassing. Inligting kan bestaan uit stemopnames, ouditiewe en visuele voorbeelde van stemoefeninge, daaglikse oefenskedules, stemhigiëneprogramme en stemevaluasierekords (Grillo, 2017). Asinkroniese aktiwiteite kan op verskillende wyses aangebied, byvoorbeeld deur e-pos, video-opnames of persoonlike tuisprogramme (Grillo, 2017). Met die gemengde metode van telepraktyk word 'n kombinasie van die sinkroniese en asinkroniese benaderings gebruik, byvoorbeeld 'n sinkroniese eerste onderhoud en stemevaluasie gevolg deur 'n asinkroniese stemoefeningsprogram.

Die tipe toerusting wat vir sinkroniese telepraktyk gebruik word, is belangrik vir doeltreffende dienslewering. Aanvanklik was hoofsaaklik rekenaars met 'n ingeboude of aparte kamera gebruik sodat die terapeut en die pasiënt mekaar tydens 'n sessie via 'n videokonferensieplatform kon sien. Deesdae maak tegnologie ook videokonferensieplatforms via 'n slimfoon of tablet moontlik. Behalwe vir die kamera, is die kwaliteit van die ouditiewe aspek van telepraktyk ook belangrik en die terapeut en pasiënt gebruik gewoonlik die toerusting se ingeboude mikrofoon en luidspreker of 'n eksterne mikrofoon en luidspreker tydens hul interaksie. Gewilde platforms vir aanlyninteraksie soos FaceTime, Skype en Google Hangouts is weens etiese redes minder geskik vir telepraktykgebruik omdat hierdie platforms se privaatheidskonfigurasies swak is en vertroulikheid nie gewaarborg kan word nie. Twee platforms met beter privaatheidskonfigurasies en wat gevolglik die meeste in telepraktyk gebruik word, is Webex (42%) en Zoom (35%).

Soos bewys tydens die COVID-19-pandemie, hou die gebruik van telepraktyk voordele in vir dienslewering in gesondheidsorg en stemterapie wat wyer strek as die noodsaaklikheid daarvan tydens die COVID-19-beperkings. Faktore soos kostebesparings as gevolg van die vermindering van reiskoste en reistyd vir die pasiënt (Krikheli et al., 2017), voorsiening van gesondheidsdienste in landelike of afgeleë gebiede waar 'n gebrek aan gesondheidswerkers of spesialisdienste bestaan (Mashima et al., 2003) en 'n groter keuse van diensverskaffers (Becker en Gillespie, 2021) is sommige van die ooglopende voordele van telepraktyk. Verder is telepraktyk besonder geskik vir aanwending in spraaktaal terapie weens die oudiovisuele aard van die interaksie wat gewoonlik tussen pasiënt en terapeut plaasvind (Fu et al., 2015).

Telepraktyk is egter nie sonder probleme nie. Die mees algemene beperkings is probleme met die tegnologie, pasiënte wat nie vertrou is met die proses en tegnologie nie, pasiënte wat nie toegang tot tegnologie soos 'n skootrekenaar, rekenaar of slimfoon het nie, probleme rakende vergoeding van diensverskaffers aangesien mediese fondse nie altyd bereid is om die

volle tarief vir telepraktykterapiesessies te betaal nie (Becker en Gillespie, 2021; Cantarella et al., 2020) en etiese kwessies oor die privaatheid van data en die veilige bewaring van vertroulike inligting (Cho et al., 2020). Om telepraktyk binne 'n gevestigde praktyk in te bring is ook uitdagend, aangesien die terapeut en pasiënte gewoon is aan die tradisionele manier van behandeling en weerstand kan ondervind om die skuif van konsvensionele terapie na 'n alternatiewe benadering te maak (Becker en Gillespie, 2021). Daar is ook beperkte navorsing oor die gebruik en effektiwiteit van telepraktyk vir die behandeling van stemprobleme. Vorige studies het meestal op die evaluering en behandeling van stemprobleme geassosieer met Parkinsonsiekte deur middel van telepraktyk gefokus en min is bekend oor die gebruik hiervan vir ander stemafwykings, byvoorbeeld primêre en sekondêre spierspanningsdisfonie (Fu et al., 2015)

Wat is spierspanningsdisfonie?

Die stembande of vokale voue is weefselvoue geleë in die larinks in die lugpyp. Dit vervul drie belangrike funksies, naamlik om die lugweë te beskerm en te voorkom dat 'n persoon stik as gevolg van materiaal in die lugpyp, om lugvloei van en na die longe te reguleer, en om stem vir spraak te produseer. Enige stembandprobleem kan dus 'n negatiewe uitwerking op effektiewe kommunikasie hê (Boone et al., 2013).

Spierspanningsdisfonie (SSD) is 'n kliniese en diagnostiese term wat verwys na 'n stemprobleem (disfonie) wat veroorsaak word deur die wangebruik van 'n persoon se stembande. SSD kan lei tot probleme soos byvoorbeeld gebuigde stembande en laringeale vernouing en sodoende stembandaktiwiteit negatief aantass sodat simptome soos beperkte toonhoogte, afwykende stemkwaliteit en swak stemvolume ontstaan (Altman et al., 2005).

Primêre SSD behels stemprobleme in die afwesigheid van organiese stembandprobleme en word geassosieer met oormatige, atipiese of abnormale laringeale bewegings en oormatige spanning in die vokale voue tydens stemproduksie. Sekondêre SSD dui op afwykings in stemproduksie wat gepaardgaan met 'n onderliggende organiese abnormaliteit in die larinks of 'n psigogene probleem wat stembandgebruik en stemproduksie aantass. Die normale bewegings van die stembande kan byvoorbeeld negatief beïnvloed word deur 'n toestand soos kroniese laringitis, stembandnodules of spanning in die nek en skouers as gevolg van langdurige emosionele stres en sodoende sekondêre SSD veroorsaak. Die afwykende bewegingspatrone kan voortduur selfs nadat die organiese of psigogene toestand opgehef is en kan aanleiding gee tot 'n langdurige stemprobleem (Van Houtte et al., 2009).

Die impak van stemprobleme op 'n persoon se alledaagse funksionering en lewenskwaliteit, en gepaardgaande mediese onkoste, moet nie onderskat word nie. Hoewel daar geen data oor die voorkoms van SSD in Suid-Afrika is nie, is dit bekend dat 10% van die Amerikaanse bevolking stemprobleme ondervind en dat hierdie getal tot 50% styg onder professionele stemgebruikers, byvoorbeeld onderwysers, sangers en predikers (Martins et al., 2016). Barkmeier-Kraemer en Patel (2016) meld

dat SSD byna 'n derde van die VSA se populasie in die ouderdomsgroep 20 tot 66 jaar in hulle leeftyd sal affekteer en dat in die ouderdomsgroep 45 tot 64 jaar, 39% van die bevolking SSD ondervind. 'n Interessante feit is dat vroulike persone 'n groter kans het om stembandletsels as gevolg van stemwangebruik en -misbruik te ontwikkel en dat 60% van persone met SSD vroulik is (Alegria et al., 2020).

'n Stemterapieprogram in samewerking met 'n spraakterapeut word aanvaar as die voorkeurbehandeling vir SSD en die effektiwiteit daarvan om die probleem op te hef is goed gedokumenteer (byvoorbeeld Boone et al., 2013; Fu et al., 2015). Studies het egter getoon dat in 'n groot persentasie van pasiënte nie professionele terapeutiese hulp vir hul stemprobleem sal soek nie (Cohen et al., 2012) en dat tot 65% van pasiënte wat wel met terapie begin, nie die program voltooi nie (Meerschman et al., 2020). Die redes hiervoor kan veelvuldig wees, maar beskikbaarheid van en toegang tot spraakterapiedienste speel 'n groot rol. Die toeganklikheid van spraakterapiedienste is 'n wesentlike probleem in Suid-Afrika. Volgens 2017-data is daar slegs 39 gekwalifiseerde spraaktaalterapeute per miljoen inwoners wat aktief by dienslewering in Suid-Afrika betrokke is. Ongelykhede te opsigte van toeganklikheid tot spraakterapeutiese dienste word verder veroorsaak deur die feit dat die meeste terapeute in stedelike areas gesentreer is en dat sekere provinsies soos die Noord-Kaap en Noordwes ondervoorsien is (Pillay et al., 2020). Die Suid-Afrikaanse Raad vir Gesondheidsberoepes («HPCSA») (2021) noem in hul riglyne oor die gebruik van telepraktyk dat die doel daarvan juis is om gesondheidsdienste aan ondervoorsiene gebiede te lewer.

Telepraktyk as 'n alternatiewe en koste-effektiewe metode van dienslewering kan dus beskou word nie net as 'n potensiële oplossing om toegang tot dienste vir pasiënte met SSD te verhoog nie, maar ook die kanse sal verhoog dat hulle die program sal volhou en voltooi en dus gouer herstel.

Uit bogenoemde inligting is dit duidelik dat die gebruik van telepraktyk in die behandeling van primêre en sekondêre SSD in die Suid-Afrikaanse konteks belangrik geword het vir verdere ondersoek. 'n Voorlopige literatuurstudie het aangetoon dat daar beperkte inligting oor die gebruik van telepraktyk in stemterapie bestaan. Geen navorsing is gevind wat in die Suid-Afrikaanse gesondheidsorgsisteem oor die gebruik van telepraktyk in stemterapie gedoen is nie.

Die doel van hierdie navorsingstudie was dus om die gebruik van telepraktyk in die behandeling van volwassenes met primêre en sekondêre SSD oor die afgelope 22 jaar te verken deur middel van 'n sistematiese omvangsbepaling («scoping review») van gepubliseerde navorsing en deur die raadpleging van kenners. Dit is bereik deur middel van twee hoofdoelwitte wat nagestreef is, naamlik (1) om vas te stel wat bekend is oor die gebruik van telepraktyk in die behandeling van SSD met betrekking tot die aard, omvang en uitkomst van die behandelingsproses, en (2) om die bevindinge van die omvangsbepaling te kontekstualiseer deur geselekteerde spraaktaalterapeute te raadpleeg oor die waarde en toepassing daarvan in die Suid-Afrikaanse gesondheidsorgkonteks.

Metode

Hierdie studie het 'n omvangsbepaling gebruik as die navorsingsontwerp om beskikbare inligting op 'n sistematiese wyse te versamel, om die beskikbare bewyse te identifiseer, en om leemtes in die bestaande literatuur te identifiseer (Peters et al., 2020). Dit is belangrik volgens Pollock et al. (2021) om te weet dat die fokus van omvangsbepalings nie is om kliniese riglyne daar te stel of om aanbevelings vir beter praktykvoering te maak nie, maar eerder die verkenning van beskikbare inligting. Die riglyne wat in hierdie studie se metodologie gevolg is, was die Joanna Briggs Institute-metodologie (Peters et al., 2020) en die Preferred Reporting Items for Systematic Reviews and Meta-Analyses Scoping Review extension (PRISMA-ScR) (Moher, Liberati, Tetzlaff & Altman, 2009).

Die studie het uit drie fases bestaan: Eerstens het die navorsers met behulp van 'n ervare bibliotekaris die PRISMA-ScR gebruik om 'n *a priori*-protokol saam te stel vir besluite oor toepaslike sleutelwoorde, identifisering van relevante databasisse, soekstringe en -strategieë, en die ontwikkeling van die voorlopige literatuursoektog. Die soektog is ontwikkel na aanleiding van die riglyn Populasie-Konsept-Konteks (PKK) (Peters et al., 2020). *Populasie* is gedefinieer as volwassenes met primêre SSD, *Konsept* as die gebruik van telepraktyk in behandeling, en *Konteks* is nie as enige gesondheidsorgkonteks of enige geografiese gebied gespesifiseer nie. Die oorsigvraag wat die studie gerig het, was: Wat is bekend in die bestaande navorsingsliteratuur oor die gebruik van telepraktyk vir die behandeling van primêre spierspanningsdisfonie?

Tweedens het die versameling en oorsig van die literatuur wat uit die onderskeie bronne verkry is, plaasgevind. Eweknie-beoordeelde en grys literatuur wat tussen 2000 en 2022 gepubliseer is, is vir insluiting oorweeg. In die finale fase is die data verkry uit die omvangsbepaling geanaliseer en met 'n groep vooraf geïdentifiseerde kundiges bespreek om die tweede doelwit van die studie te bereik.

In- en uitsluitingskriteria

Slegs studies oor telepraktyk vir die behandeling van primêre en sekondêre SSD wat tussen 2000 en 2022 gepubliseer is, is oorweeg. Studies oor pasiënte met stemafwykings wat veroorsaak word deur 'n organiese toestand, byvoorbeeld Parkinsonisme, is daarom uitgesluit. Die fokus van hierdie omvangsbepaling was op die behandeling van volwassenes met SSD en daarom is studies wat net op die assesseringmetodes vir SSD gefokus het en nie behandeling ingesluit het nie, uitgesluit. Studies wat slegs kinders as deelnemers gehad het, is ook uitgesluit. Slegs studies wat in Engels gepubliseer is, is vir insluiting oorweeg.

Bronne van inligting

'n Literatuursoektog is met vyf elektroniese databasisse gedoen, naamlik EbscoHost (wat Academic Search Premier & Africa-Wide Information & CINAHL & Health Source: Nursing/Academic Edition ingesluit het), MEDLINE en SCOPUS, asook databasisse wat grys literatuur insluit, naamlik Google Scholar en Opengrey. eu. Die finale soektog is op 12/10/2022 voltooi.

Soekstrategie

Die JBI-riglyne (Peters et al., 2020) is gevolg deur eers twee databasisse naamlik MEDLINE en Google Scholar te raadpleeg vir studies oor telepraktyk en stemprobleme om sleutelwoorde in titels en opsommings 9"abstracts") te identifiseer. Die soektog het aanvanklik nie die term "vocal" bevat nie, maar met die herhaling van die eerste soektog is "vocal" ook as 'n term ingesluit. Die finale soektog het die volgende sleutelterminologie bevat: "telemedicine OR telehealth OR telecare OR teletherapy OR ehealth OR mobile health OR mhealth AND muscle tension dysphonia OR dysphonia OR voice disorder OR voice therapy OR voice disturbance OR voice intervention OR voice treatment OR voice rehabilitation OR vocal disturbance OR vocal pathology OR voice pathology".

Die resultate wat vanaf die databasisse verkry is, is met behulp van Mendeley- en BibTeksagteware georganiseer. Duplikate is in hierdie stadium verwyder. Aan die einde van die seleksieproses is die verwysingslyste van die 19 voltekst-artikels wat vir insluiting oorweeg is ook nagegaan om moontlike bronne te vind wat nie deur die aanvanklike soekproses geïdentifiseer is nie.

Seleksie van studies

Die finale artikels is geselekteer deur sifting van die titels, opsommings en volledige tekste met behulp van die insluitings- en uitsluitingskriteria soos genoem in 2.1 deur die eerste twee outeurs, wat onafhanklik van mekaar gewerk het. Die resultate is bespreek en konsensus is bereik oor die finale insluiting van artikels.

Dataonttrekking en analise

'n Dataonttrekkingsdokument is opgestel sodat die inligting wat in die gekose studies van die omvangsbepaling voorkom, opgesom en geanaliseer kon word. Die dokument is opgestel na aanleiding van JBI-riglyne (Peters et al., 2020) en het die volgende inligting bevat: outeurs; publikasiedatum; land van studiedeelnemers; metodologie; en grootte, ouderdom en geslag van die studiestudiepopulasie (sien Bylae 1, Tabel 1). Die analises en beskrywende opsommings van die geselekteerde artikels ten opsigte van studiedeelnemers se diagnoses en assessering, die aard en duur van die stemterapie en die vernaamste uitkomstes daarvan word in Bylae 2, Tabel 2 verskaf.

Konsultasiefase

In die finale stap is die bevindinge van die studie met spraakterapeute bespreek wat as kundige belanghebbendes geïdentifiseer is. Hoewel die konsultasiefase nie 'n verpligte komponent van die oorspronklike metodologie vir omvangsbepalings is nie (Arksey en O'Malley, 2005), word dit deesdae beskou as 'n belangrike stap in die proses om bestaande navorsing te oorweeg en leemtes in kennis te identifiseer, en 'n geleentheid om kennis aan belanghebbendes in die veld oor te dra (Levac et al., 2010; Pollock et al., 2020). Deelnemers wat as belanghebbende kundiges geïdentifiseer is, moes aan die volgende kriteria voldoen: geregistreer wees by die Suid-

Afrikaanse Raad vir Gesondheidsberoep as spraakterapeute of spraakterapeute en oudioloë; ten minste 10 jaar kliniese ervaring in die behandeling van pasiënte met stemprobleme hê; en ondervinding in die gebruik van telepraktyk met pasiënte met stemprobleme hê. Navraag by twee provinsiale hospitale het getoon dat telepraktyk nie vir die behandeling van stemprobleme gebruik word nie en daarom is besluit om deelnemers uit die privaatsektor te werf.

Die eerste twee outeurs het agt persone wat aan hulle bekend was as ervare stemterapeute deur middel van doelgerigte homogene steekproefneming genader om aan die studie deel te neem. Twee persone is uitgesluit omdat hulle nie telepraktyk gebruik het nie. Ses terapeute, een manlik en vyf vroulik, het voldoen aan die seleksiekriteria en het ingestem om aan die studie deel te neem. Die deelnemers was almal Engelssprekend en alle kommunikasie met hulle het in Engels plaasgevind. Al die deelnemers was werksaam in privaatsektor, vier in die Wes-Kaap en twee in Gauteng. Almal het tydens die grendeltyd van telepraktyk gebruik gemaak om pasiënte met stemprobleme te behandel. Hulle ervaring met die verskaffing van stemterapie het van 10 tot 22 jaar gestrek.

Die bevindinge van die omvangsbepaling is as raamwerk vir 'n selfopgestelde onderhoudsgids gebruik en individuele onderhoude is met die deelnemers gevoer (sien Bylae 3 vir die Afrikaanse weergawe van die onderhoudsgids). Deelnemers het vooraf 'n omvattende informasiepakket ontvang wat hulle moes deurlees sodat hulle bekend was met die vier artikels wat die omvangsbepaling opgelewer het en voorbereid vir die onderhoud kon wees. Daarna het die eerste outeur 'n virtuele persoon-tot-persoon-onderhoud via Zoom met elke deelnemer gevoer wat 45–60 minute geduur het. Onderhoude is in Engels gevoer omdat dit die deelnemers se voorkeurtal was. Die onderhoudsgids het gefokus op die resultate van die omvangsbepaling, die deelnemers se menings oor die bevindinge in die artikels en die toepassing daarvan op hul eie praktykvoering. Opnames van die onderhoude is getranskribeer en geanaliseer om algemene temas te identifiseer en afleidings te maak.

Die verskillende fases van analise is op die prosedures soos beskryf deur Creswell (2014) en Braun en Clarke (2006) se tematiese analise gebaseer. Die inligting is verskeie kere gelees om herhalende frases en temas te identifiseer en saam te groepeer in betekenisvolle eenhede. Om die betroubaarheid van die koderingsbesluite te verhoog, het die eerste en laaste outeurs die data eers afsonderlik gekodeer en daarna ontmoet om ontluikende temas te bespreek en te vergelyk om sodoende te verseker dat prosedures tussen die navorsers eenvormig is. Die navorsers het oor hul eie partydigheid nagedink, sowel as oor hoe hul eie agtergrond en kliniese opleiding hul interpretasies sal beïnvloed (Creswell, 2014). Geloofwaardigheid is behou deur 'n verskeidenheid van deelnemers se aanhalings in te sluit. Die aanhalings in hierdie manuskrip is in Afrikaans vertaal deur die eerste outeur en vir korrektheid nagegaan deur die laaste outeur.

Etiese oorwegings

Die studie is deur die Universiteit van Stellenbosch se Gesondheidsnavorsingsetiekomitee (GNEK) goedgekeur (GNEK verwysingsnommer: S21/06/104).

Resultate

Soektogresultate

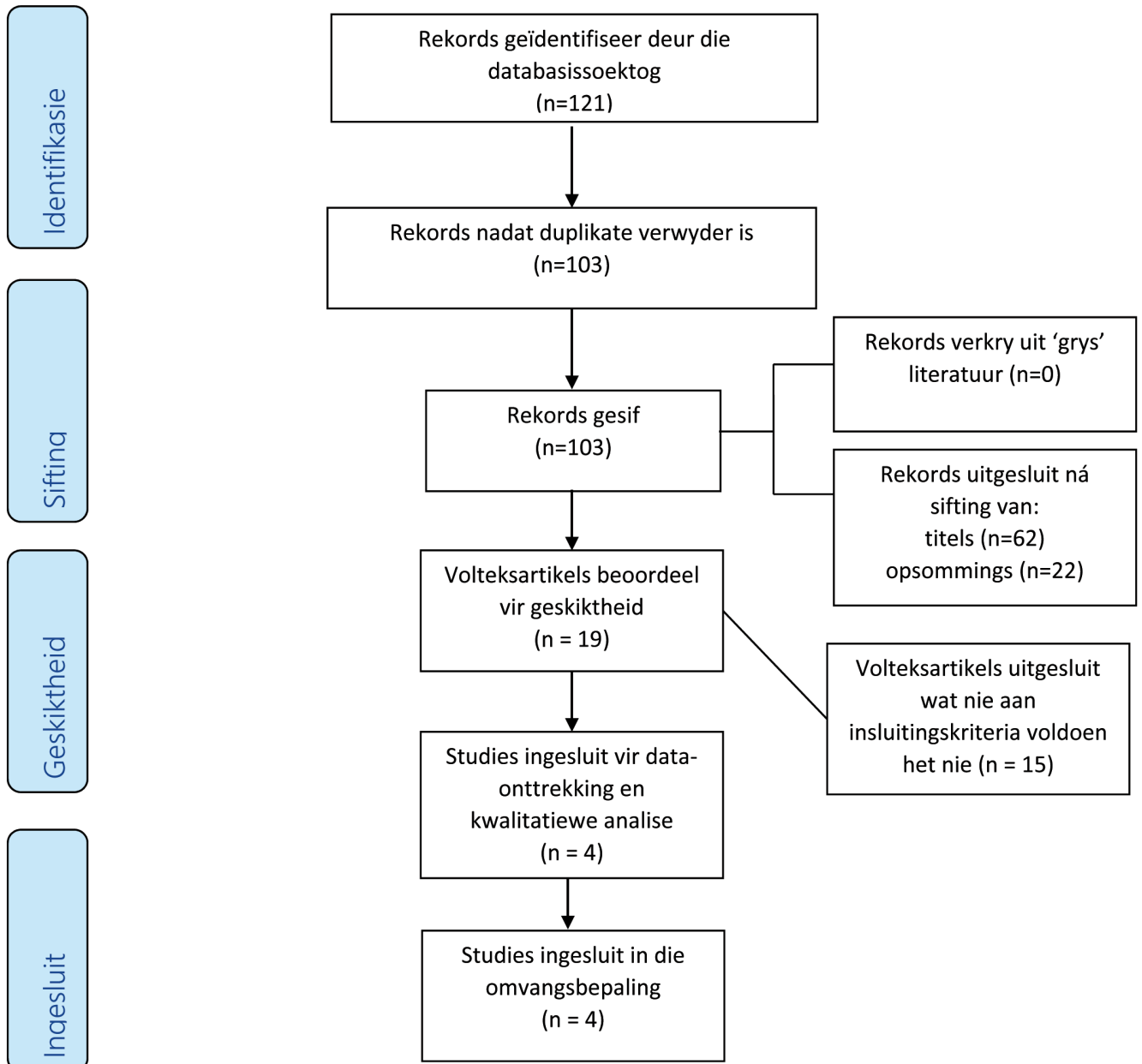
Stap 1 van die omvangsbepaling word in Figuur 1 uitgebeeld in 'n aangepaste PRISMA-Scr-vloeiagram, soos aanbeveel deur Moher et al. (2009). Die soektog deur vyf databasisse het aanvanklik 121 studies opgelewer. Nadat duplikate verwyder is, het 103 studies oorgebly. Geen bronne is uit die grys literatuur verkry nie. Die titelsiftingsproses het 62 artikels uitgesluit omdat die studie nie oor telepraktyk of SSD gehandel het nie. Opsommings van die oorblywende 41 studies is volgens die in- en uitsluitingskriteria gesif en 22 artikels is uitgesluit. Die 19 oorblywende artikels se volledige tekste is geëvalueer op grond van die in- en uitsluitingskriteria. Vyftien van die 19 artikels is hierna uitgesluit en slegs vier artikels het oorgebly. Die bronnelyste van die 19 artikels is ook nagegaan om nog artikels wat ingesluit kon word te identifiseer. Daar is geen verdere artikels in die bronnelyste gevind nie. Die finale getal studies wat aan al die kriteria voldoen het, was dus vier.

Beskrywende opsomming van die geselekteerde studies

Die beskrywende kenmerke van die vier artikels wat in hierdie studie ingesluit is, verskyn in Tabel 1 (Bylae 1). Die geselekteerde artikels is verder geanaliseer en beskryf aan die hand van die deelnemerdiagnoses, assessering wat gedoen is, behandelingsmetode, platform wat gebruik is, duur van terapie, en uitkomst en sleutelbevindinge (sien Bylae 2, Tabel 2).

Elke artikel het gefokus op die gebruik van telepraktyk in die behandeling van stemprobleme wat primêre en sekondêre SSD ingesluit het. Die artikels is tussen 2003 tot 2020 gepubliseer; een in 2003, twee in 2015 en een in 2020. Al die studies het in hoëinkomste en geïndustrialiseerde omgewings plaasgevind. Twee studies is in die VSA uitgevoer, een studie uit Australië het data-insameling in 'n studiepopulasie in Taiwan gerapporteer en een studie is in Taiwan uitgevoer. Drie van die studies het 'n ewekansig beheerde eksperimentele navorsingsontwerp gebruik en die ander studie het 'n kwasi-eksperimentele voor-toetsnatoetsontwerp gehad. Deelnemers aan die studies se ouderdomme het van 18 tot 85 jaar gestrek. Een studie het slegs vroulike deelnemers gehad, terwyl die ander ook mans ingesluit het.

Wat die aard van telepraktyk betref, het twee studies slegs sinkroniese telepraktyk gebruik en in die ander twee studies is beide sinkroniese en asinkroniese telepraktyk aangewend. Al die studies het van verskillende tipes telepraktykplatforms gebruik gemaak, naamlik Skype, 'n sosialemediatoepassing genaamd Line, Microsoft Windows NETmeeting en die Tandbergvideokonferensiesisteen. Stemterapie in al die studies het oor verskillende tydperke plaasgevind en van drie tot nege



Figuur 1: Die aangepaste PRISMA-Scr-vloeiendiagram van soektogresultate gebaseer op Moher et al. (2009)

weke geduur. Terapiesessies wat telepraktyk en konvensionele terapie gekombineer het, het gewissel van nege tot twaalf sessies en sessies waar slegs telepraktyk uitgevoer is, het van een tot sewe sessies gewissel. Wat uitkomst betref, het al die studies bevind dat verbetering van die deelnemers se stemprobleme plaasgevind het. By drie van die vier studies (met 'n ewekansig beheerde eksperimentele ontwerp) is daar egter gevind dat, ten spyte van algehele verbetering in die stemprobleme van alle deelnemers, daar nie 'n beduidende verskil was tussen die deelnemers wat telepraktyk ontvang het en diegene wat konvensionele terapie ontvang het nie.

Konsultasiefase

Die ses deelnemers se response is gekodeer en ontleed ten opsigte van hulle menings oor die bevindinge in die artikels, die toepassing daarvan op hul eie praktykvoering, en die implikasies vir die Suid-Afrikaanse konteks.

Die deelnemers se menings oor die resultate van die omvangsbepaling

Die gemiddelde getal sessies wat in die studies gerapporteer was, was twee tot nege sessies. Al die deelnemers het saamgestem dat hierdie 'n realistiese en gepaste tydperk vir 'n stemterapieprogram is. Die deelnemers het egter ook gemeld dat baie pasiënte geen of beperkte mediese fondsddekking het en dikwels net enkele sessies kan bekostig.

Daar is 'n groot verskeidenheid evaluasie metodes in die omvangsbepaling se studies gebruik. Hoewel die fokus van die omvangsbepaling op behandeling en nie evaluasie van stem was nie, is deelnemers gevra om daarop kommentaar te lewer. Almal het gerapporteer dat hulle 'n verwysing deur en verslag van 'n oor-, neus- en keelarts (ONK-arts) vereis voordat hulle 'n pasiënt sal spreek. Die ONK-arts doen gewoonlik 'n rigiede en/of 'n buigsame stroboskopies. Drie van die deelnemers sal hul

pasiënte die Voice Handicap Index (VHI) laat invul. Vier uit die ses het gerapporteer dat hulle ouditief-perseptuele evaluasies en aerodinamiese tellings met hul pasiënte sal uitvoer. Hierdie metodes stem ooreen met van die prosedures wat in die artikels gerapporteer is. Een deelnemer het egter gesê dat sy sal verkies om die evaluasiefase van aangesig tot aangesig te doen.

[Ek hou nie daarvan om die evaluasie via telepraktyk te doen nie. Ek vind dat dit nie baie akkuraat is nie. Dit hang af van die volume van die mikrofoon, hoe ver hulle van die mikrofoon af sit.] – D 6

Die omvangsbepaling se studies het 'n verskeidenheid van stemprobleme behalwe SSD ingesluit. Daar is aan die kenners gevra hoe hierdie stemprobleme vergelyk met die stemprobleme wat hulle via telepraktyk sien. Al ses het saamgestem dat die stemprobleme in die artikels ooreenstem met die stemprobleme wat hulle in hul privaatpraktyke vind. Drie van die ses kenners het dit duidelik gemaak dat SSD die stemprobleem is wat hulle tans die meeste in praktyk sien.

[Ek dink dit is heel moontlik die topdiagnose in die kliniek, veral na COVID. Daar is baie stemspanningsdisfonie na COVID.] – D 5,

[Daar is 'n toename in my gevallelading van pasiënte met stemspanningsdisfonie en ek dink dat dit gepaardgaan met die toename in stres en spanning in mense se lewens op die oomblik.] – D 6

Uitkomstes van die studies in die omvangsbepaling het gewys dat daar 'n verbetering in stem was ná telepraktyk. Maar die drie studies wat telepraktyk met konvensionele terapie vergelyk het, het gewys dat daar geen betekenisvolle verskil tussen die twee metodes was nie. Twee deelnemers het gesê dat hulle nie verbaas is dat daar geen verskil gevind is nie.

[Kyk, in Suid-Afrika word ons aangesig-tot-aangesig-terapie leer doen, intydse ("real time") kliniese assessering en terapie. Hoe ek dit sien, is dat ons dieselfde vaardighede gebruik, dieselfde kliniese vaardighede, maar net via 'n skerm. So vir my, ek was nie verbaas oor die bevindinge nie.] – D 2

Een deelnemer was verbaas oor die bevindinge.

[Ja, ek bedoel, dis interessant, want ons dink aan teleterapie as tweedebeste. Ek sou miskien verwag het dat, jy weet, aangesig-tot-aangesig-terapie beter is.] – D 3

Twee deelnemers het genoem dat hulle steeds konvensionele terapie verkies en een het gevoel die uitkomstes van telepraktyk afhang van die aard van die pasiënt se stemprobleem, maar nie aangedui watter tipe stemprobleem volgens haar nie geskik vir telepraktyk sou wees nie.

[Ja, ek sal konvensionele terapie verkies. Ek voel steeds dat aangesig-tot-aangesig-terapie my help om meer "hands-on" met my pasiënte te wees – wat teleterapie nie doen nie.] – D 5

Deelnemers is gevra hoekom hulle dink dat daar beperkte inligting oor telepraktyk vir die behandeling van stemprobleme

vir volwassenes is. Uit hul eie ondervinding van dienslewering in Suid-Afrika het deelnemers die volgende redes aangevoer: Terapeute is moontlik nie selfversekerd genoeg om telepraktyk uit te voer nie; min spraakterapeute in Suid-Afrika bied stemterapie in die privaat sektor aan en nog minder is bereid om stemterapie via telepraktyk te doen; stempasiënte is meestal ouer mense (bo 70 jaar) is, wat beteken dat hulle moontlik met tegnologie kan sukkel.

Die kenners se ervaring van telepraktyk by volwassenes met SSD

Volgens deelnemers het die prosedures vir telepraktyk wat in die resultate van die omvangsbepaling beskryf is, ooreengestem met die prosedures wat hulle volg. Drie uit die ses deelnemers het getuig dat hulle slegs die sinkroniese formaat gebruik en die ander dat hulle ook van asinkroniese metodes gebruik maak. Die asinkroniese formaat behels gewoonlik 'n tuisprogram met oefeninge wat hulle aan hul pasiënte per e-pos stuur. Volgens een van die deelnemers:

[... hulle waardeer die sinkroniese aspek daarvan – dat ek daar is, dat ek fisies voor my skootrekenaar sit en vir hulle intydse terugvoer gee. Ek dink die asinkroniese metode het nie vir hulle gewerk nie, want hulle kry nie die terugvoer wat hulle benodig nie.] – D 3

Slegs twee deelnemers het voor die koms van COVID-19 van telepraktyk gebruik gemaak het, hoofsaaklik vir terapie oor 'n afstand:

[Ek het terapie gedoen met mense wat nie maklik na my toe kon kom nie en wat terapie by my wou ontvang.] – D 4

[Dit het gebeur met 'n pasiënt van my wat geëmigreer het en wat steeds met terapie by my wou voortgaan.] – D 6

Met betrekking tot die platform of toepassing wat vir telepraktyk gebruik word, het deelnemers geantwoord dat hulle die Zoom-platform gebruik. Van die redes hiervoor was onbekendheid met ander platforms, gebruikersvriendelikheid, beter konneksies, dat pasiënte met Zoom vertrouwd is en dat dit op hulle rekenars beskikbaar is, en die enkripsieinstellings wat groter sekuriteit van inligting bied.

Die deelnemers het getuig dat hulle geen probleme met vergoeding vir hulle telepraktyksessies gehad het nie. Toe COVID-19 begin het en sommige van die kenners vir die eerste keer met telepraktyk begin het, het van die mediese fondse spesiale kodes vereis om die terapeute te vergoed. Dit het egter later verander en was nie meer nodig nie.

Toepaslikheid van telepraktyk vir die behandeling van volwassenes met SSD in die Suid-Afrikaanse konteks

Deelnemers is gevra of hulle dink dat die sinkroniese model van telepraktyk gepas is vir die Suid-Afrikaanse konteks en twee van die kenners het saamgestem:

[Ja, jy weet, ek's gelukkig, want ek werk in 'n privaat praktyk waar baie mense toegang tot wifi en ander toerusting het wat nodig is vir telepraktyk.] – D 1

[Ek sal beslis so sê. Die meeste Suid-Afrikaners, maak nie saak wat hulle sosio-ekonomiese status is nie, het 'n selfoon. Jy kan 'n sessie oor 'n selfoon aanbied. Ek het met verskillende sosio-ekonomiese populasiegroepe al gewerk. So ja, ek sal sê dat dit is 'n goeie model om met telepraktyk te werk – die pasiënt hoef nie in te kom nie en hoef nie vir vervoer te betaal nie. Ek sal sê dis 'n goeie model – beslis.] – D 2

Drie deelnemers het egter gemeen dat dit nie 'n gepaste model is nie, hoofsaaklik weens probleme met toeganklikheid tot tegnologie, internetverbinding, data, wifi en beurtkrag.

[Daar is probleme met data, daar is toegangsprobleme in terme van tegnologie, jy weet, en om te verstaan hoe tegnologie werk. Dis nie ideaal vir 'n Suid-Afrikaanse populasie nie, want die meerderheid mense het nie toegang tot allerhande tipes tegnologie wat belangrik is vir telepraktyk, nie.] – D 3

[Jy weet nooit of jy 'n stabiele kragtoevoer gaan hê nie, want wanneer die krag afgaan, dan gaan die internet ook af en selfs al het jy 'n wifi-aansluiting is die lyne nie altyd stabiel nie.] – D 6

Laastens is die deelnemers gevra wat hulle finale gedagtes en opinies oor die gebruik van telepraktyk in stemterapie in Suid-Afrika is. Twee het gesê dat hulle steeds sal verkies om eerder konvensionele terapie te doen.

[Ek hou van een-tot-een-terapie – ek hou van die emosionele konneksie van een-tot-eenterapie. Ek glo nie dat jou terapiepraktyk slegs telepraktyk moet bied nie.] – D 6

Deelnemers het die volgende voorstelle gelewer:

[Ons moet beter wifi kry en ons moet goedkoper data kry. As daar toegang tot baie goeie wifi en toegang tot data was – ek dink ons sou baie meer daarvan (telepraktyk) gebruik maak het. Ek voel egter dat die wifi-probleme, datakoste en tegnologiese ondersteuning van skootrekenaars en so aan, dit beperk telepraktyk tot bevoorregtes.] – D 4

[Ek dink daar is 'n groot verdelende faktor tussen publieke en privaat gesondheidsorg, en vir pasiënte om toegang te hê tot data, onbeperkte data, vinnige internet en goeie konneksies.] – D 5

Laastens het een van die deelnemers gevoel dat daar landwyd meer bewustheid van telepraktyk gekweek moet word sodat mense sal weet dat dit 'n opsie vir terapie is.

Bespreking

Spierspanningsdisfonie (SSD) is 'n stemprobleem wat 'n negatiewe uitwerking kan hê op 'n persoon se lewenskwaliteit en stemgebruik in professionele en sosiale omgewings. Die behandeling van SSD vereis 'n ondersoek deur 'n oor-, neus- en keelspesialis om enige onderliggende organiese probleem te identifiseer, en 'n verwysing na 'n spraakterapeut vir 'n behandelingsprogram.

Die COVID-19-pandemie het die gebruik van telepraktyk in gesondheidsorg, met inbegrip van spraakterapie, na vore gebring. Daar is duidelike voordele verbonde aan telepraktyk,

soos kostebesparings as gevolg van die vermindering van reiskoste en reistyd vir die pasiënt (Krikheli et al., 2017), voorsiening van gesondheidsdienste in landelike of afgeleë gebiede waar 'n gebrek aan gesondheidsorgwerkers of spesialisdienste bestaan (Becker en Gillespie, 2021; HPCSA, 2021; Mashima et al., 2003) en groter kans dat pasiënte 'n terapieprogram sal voltooi as geen reistyd en -koste aangegaan hoef te word nie (Fu et al., 2015)

Hierdie omvangsbepaling het ten doel gehad om 'n verkenning te doen van gepubliseerde literatuur oor die gebruik van telepraktyk vir die behandeling van primêre en sekondêre SSD in volwassenes. Een van die belangrikste doelwitte van 'n omvangsbepaling is die identifikasie van leemtes in die literatuur. Hierdie studie het slegs vier artikels gevind wat in die afgelope 22 jaar oor die onderwerp gepubliseer is. Hoewel die gebruik van telepraktyk in spraakterapie 'n relatief nuwe ontwikkeling is, is die eerste studie reeds in 2003 gepubliseer (Mashima et al., 2003). In die daaropvolgende jare is slegs drie ander studies gepubliseer (Fu et al., 2015; Lin et al., 2020; Rangarathnam et al., 2015). Die studies het slegs in twee lande, Taiwan en die VSA, plaasgevind en die studiepopulasies was relatief klein. Dit beïnvloed dus die veralgemeenbaarheid van die resultate en bevindinge na ander omgewings. Daar is dus duidelik 'n leemte in die wetenskaplike literatuur oor hierdie onderwerp.

Terugvoer van die terapeute wat aan hierdie studie deelgeneem het, het ook aangedui dat hulle selde voor die COVID-19-pandemie van enige vorm van telepraktyk gebruik gemaak het. Hoewel die outeurs voorsien dat 'n toename in die gebruik van telepraktyk as gevolg van die COVID-19-inperkings tot meer publikasies in die nabye toekoms sal lei, bestaan daar tans te min navorsing oor die onderwerp om riglyne vir praktykvoering te verskaf.

Drie van die vier studies in hierdie omvangsbepaling het die gebruik van telepraktyk vergelyk met konvensionele stemterapie vir SSD en geen verskille in die uitkomstemetings gevind nie. Telepraktyk kan dus beskou word as 'n moontlike oplossing om die beskikbaarheid van en toeganklikheid tot spraakterapiedienste in Suid-Afrika te verhoog vir pasiënte met SSD. Daar is 'n groot tekort aan spraakterapeute in Suid-Afrika, veral in landelike gebiede en provinsies soos Noordwes en die Noord-Kaap (Pillay et al., 2020). In die doelgerigte werwing van deelnemers met meer as 10 jaar ondervinding in die verskaffing van stemterapie vir hierdie studie het die navorsers eerstehands ondervind hoe min spraakterapeute in Suid-Afrika stemterapie verskaf. 'n Moontlikheid wat oorweeg kan word, is om ander gesondheidsorgwerkers, byvoorbeeld verpleegpersoneel, en bestaande infrastruktuur op die primêre gesondheidsorgplatform te gebruik om toegang tot stemterapiedienste deur middel van telepraktyk te verhoog.

Die vraag ontstaan egter oor die haalbaarheid van telepraktyk as 'n oplossing vir hierdie tekorte en om bestaande ongelykhede in gesondheidsorg in Suid-Afrika te verbeter. Dit word betwyfel of populasies in landelike gebiede en uit laer sosio-ekonomiese omgewings wat oor die algemeen minder toegang tot gesond-

heidsorg het, met inbegrip van spesialisdienste soos stemterapie, baat sal vind by telepraktik. Soos tereg deur deelnemers in die konsultasiefase van hierdie studie opgemerk is, sal die gebrek aan toerusting en ervaring in die gebruik van tegnologie, gebrek aan betroubare internetvoorsiening, beurtkrag en datakoste waarskynlik hierdie ongelykhede eerder vererger as verlig.

Weerstand deur pasiënte sowel as terapeute is 'n verdere faktor wat die gebruik van telepraktik in die Suid-Afrikaanse konteks kan beperk. Pasiënte wat nie met die tegnologie vertrou is nie en nie oor die infrastruktuur beskik om suksesvol aan telepraktiksessies deel te neem nie, sal waarskynlik weer terugkeer na konvensionele terapie, aangesien die beperkings wat tydens die COVID-19-pandemie geheers het, nie meer bestaan nie. Soos opgemerk deur die deelnemers aan hierdie studie, verkies baie terapeute ook om stemterapie van aangesig tot aangesig te doen, hoofsaaklik as gevolg van die probleme wat deur hul pasiënte met telepraktik ondervind word.

Beperkinge

Daar was beperkinge aan hierdie studie, hoofsaaklik as gevolg van die metodologie wat gevolg is. Die insluitingskriteria om die oorsigvraag te beantwoord was eng en het dus slegs studies ingesluit wat telepraktik vir die behandeling van spierspanningsdisfonie by volwassenes ondersoek het, en nie studies oor ander stemafwykings of ander ouderdomsgroepe nie. Slegs studies wat in Engels gepubliseer is, is oorweeg vir insluiting en dis moontlik dat navorsing in ander tale en omgewings bestaan. Hoewel die riglyne vir omvangsbepalings streng gevolg is, is dit moontlik dat die keuse van soekterme en databasisse nie alle artikels oor die onderwerp geïdentifiseer het nie. Die navorsers het gepoog om die studie te kontekstualiseer in die Suid-Afrikaanse gesondheidsorgkonteks deur plaaslike stemterapeute te raadpleeg. Dit word egter as 'n beperking erken dat die perspektiewe van pasiënte nie verkry is nie.

Aanbevelings vir verdere navorsing

Hierdie studie het slegs stemterapeute uit die privaat sektor ingesluit en daar word aanbeveel dat die haalbaarheid van telepraktik in die openbare sektor ondersoek word deur terapeute te raadpleeg wat in provinsiale hospitale en primêre gesondheidsorg in Suid-Afrika werk. Die gebruik van telepraktik maak nou deel uit van spraakterapiestudente se opleiding. Dit sou dus van waarde wees om pas afgestudeerde studente wat gemeenskapsdiens in meesal landelike gebiede verrig te raadpleeg, omdat hulle met die gebruik van telepraktik vertrou is. Daar word aanbeveel dat verdere studies ook pasiënte wat telepraktik vir primêre en sekondêre SSD ontvang het in die konsultasieproses ingesluit word om sodoende hul perspektiewe oor die voor- en nadele daarvan te verkry. Dit sou veral waardevol wees om studies uit te voer wat telepraktik vergelyk met konvensionele stemterapie vir die behandeling van SSD wat betref uitkomstemetings en pasiëntetevredenheid.

Gevolgtrekking

Samevattend het hierdie studie getoon dat daar beperkte inligting bestaan oor die gebruik van telepraktik vir die behandeling van volwassenes met primêre spierspanningsdisfonie. Daar is dus nie genoegsame bewyse uit navorsing om byvoorbeeld vergelykings te tref tussen telepraktik en konvensionele stemterapie nie. Die gebruik van telepraktik hou heelwat voordele in en kan dienslewering in gesondheidsorg in Suid-Afrika bevorder en verbeter. Probleme met tegnologie, toegang tot die internet en elektrisiteitsvoorsiening kan egter juis die persone wat die meeste benadeel word deur ongelykhede in gesondheidsorg, nog verder benadeel.

Befondsing

Hierdie werk is moontlik gemaak deur 'n Akademie vir Wetenskap en Kuns-studiebeurs wat aan die eerste outeur vir 'n Magisterstudie in Spraak-Taalterapie toegeken is.

Datums:

Ontvang: 03/06/2023
Aanvaar: 05/09/2023
Gepubliseer: 15/11/2023

Verwysings

- Alegria, R., Vaz Freitas, S., Conceicao Manso, M., 2020, Effectiveness of voice therapy in patients with vocal fold nodules: a systematic search and narrative review, *European Archives of Oto-Rhino-Laryngology* 277, 2951-2966. <https://doi.org/10.1007/s00405-020-06059-8>.
- Altman, K.W., Atkinson, C., Lazarus, C., 2005, Current and emerging concepts in muscle tension dysphonia: A 30-month review, *Journal of Voice* 19, 261-267. <https://doi.org/10.1016/j.jvoice.2004.03.007>.
- American Speech-Language-Hearing Association, 2018, Telepractice: Overview, Available from: <https://www.asha.org/>.
- American Speech-Language-Hearing Association, 2005, Speech-Language Pathologists Providing Clinical Services via Telepractice: Position Statement, Available from <https://www.asha.org/practice-portal/professional-issues/telepractice/>.
- Arksey, H., O'Malley, L., 2005, Scoping studies: Towards a methodological framework, *International Journal of Social Research Methodology: Theory & Practice* 8(1), 19-32. <https://doi.org/10.1080/1364557032000119616>.
- Barkmeier-Kraemer J.M., Patel, R.R., 2016, The next 10 years in voice evaluation and treatment, *Seminars in Speech and Language* 37(3), 158-165. <https://doi.org/10.1055/s-0036-1583547>.
- Becker, D.R., Gillespie, A.I., 2021, In the Zoom where it happened: Telepractice and the voice clinic in 2020, *Seminars in Speech and Language* 42(1), 64-72. <https://doi.org/10.1055/s-0040-1722750>.
- Boone, D.R., McFarlane, S.C., Von Berg, S.L., et al., 2013, The voice and voice therapy, negende uitgawe. Pearson, New Jersey.
- Braun, V. & Clarke, V., 2006, Using thematic analysis in psychology, *Qualitative Research in Psychology* 3(2), 77-101. <https://doi.org/10.1191/1478088706qp0630a>.
- Cantarella, G., Barillari, M.R., Lechien, J.R., et al., 2020, The challenge of virtual voice therapy during the COVID-19 pandemic, *Journal of Voice* 35(3), 336-337. <https://doi.org/10.1016/j.jvoice.2020.06.015>.
- Cho, H., Ippolito, D., Yu, Y.W., 2020, Contact tracing mobile apps for COVID-19: privacy considerations and related trade-offs. Available from: <https://arxiv.org/pdf/2003.11511.pdf>.
- Creswell, J.W., 2014, Research design: Qualitative, quantitative and mixed-method approaches. (4th ed.), Thousand Oaks, CA: Sage Publications Inc.
- Fu, S., Theodoros, D.G., Ward, E.C., 2015, Delivery of intensive voice therapy for vocal fold nodules via telepractice: A pilot feasibility and efficacy study, *Journal of Voice* 29(6), 696-706. <https://doi.org/10.1016/j.jvoice.2014.12.003>.
- Grillo, E.U., 2017, An online telepractice model for the prevention of voice

- disorders in vocally healthy student teachers evaluated by a smartphone application, *Perspectives of the ASHA Special Interest Groups* 2(2), 63-78. <https://doi.org/10.1044/persp2.SIG3.63>.
- Health Professions Council of South Africa, 2021, General ethical guidelines for good practice in telehealth, Booklet 10, HPCSA; Pretoria.
- Krikheli, L., Carey, L.B., McDonald, C.E., et al., 2017, Telehealth use in speech-language pathology: An exploratory scoping review, *Cabrini Health Speech Pathology Department, Final Year Internship Program*, 1-52.
- Levac, D., Colquhoun, H., O'Brien, K.K., 2010, Scoping studies: advancing the methodology, *Implement Science* 5, 69-77. <https://doi.org/10.1186/1748-5908-5-69>.
- Lin, F.C., Chien, H.Y., Chen, S.H., et al., 2020, Voice therapy for benign voice disorders in the elderly: A randomized controlled trial comparing telepractice and conventional face-to-face therapy, *Journal of Speech, Language, and Hearing Research* 63(7), 2132-2140. https://doi.org/10.1044/2020_JSLHR-19-00364.
- Martins, R.H.G., Abrantes do Amaral, H., Tavares, E.L.M., et al., 2016, Voice disorders: Etiology and diagnosis, *Journal of Voice* 30(6), 761.e1-76. <https://doi.org/10.1016/j.jvoice.2015.09.017>.
- Mashima, P.A., Birkmire-Peters, D.P., Syms, M.J., et al., 2003, Telehealth: Voice therapy using telecommunications technology, *American Journal of Speech-Language Pathology* 12(4), 432-440. [https://doi.org/10.1044/1058-0360\(2003\)089](https://doi.org/10.1044/1058-0360(2003)089).
- Meerschman, I., Van Lierde, K., Claeys, S., et al., 2020, The patient's opinion regarding different service delivery models for voice therapy, *American Journal of Speech-Language Pathology* 20, 1466-1474. https://doi.org/10.1044/2020_AJSLP-19-00128.
- Moher, D., Liberati, A., Tetzlaff, J., et al., PRISMA Group, 2009, Preferred reporting items for systematic reviews and meta-analyses: the PRISMA statement, *PloS Medicine* 6(7), e1000097. <https://doi.org/10.1371/journal.pmed.1000097>.
- Peters, M.D.J., Godfrey, C., McInerney, P., et al. 2020. Chapter 11: Scoping reviews, In: Aromataris E, Munn Z (Editors), *JBI Manual for Evidence Synthesis*, <https://doi.org/10.46658/JBIRM-20-01>.
- Pillay, M., Tiwari, R., Kathard, H., et al., 2020, Sustainable workforce: South African Audiologists and Speech Therapists, *Hum Resour Health* 18, 47. <https://doi.org/10.1186/s12960-020-00488-6>.
- Pollock, D., Davies, E.L., Peters, M.D.J., et al., 2021, Undertaking a scoping review: A practical guide for nursing and midwifery students, clinicians, researchers, and academics, *Journal of Advanced Nursing* 77, 2102-2113. <https://doi.org/10.1111/jan.14743>.
- Rangarathnam, B., McCullough, G.H., Pickett, H., et al., 2015, Telepractice versus in-person delivery of voice therapy for primary muscle tension dysphonia, *American Journal of Speech-Language Pathology* 24(3), 386-399. https://doi.org/10.1044/2015_AJSLP-14-0017.
- Van Houtte, E., Van Lierde, K., Claeys, S., 2009, Pathophysiology and treatment of muscle tension dysphonia: A review of the current knowledge, *Journal of Voice* 25(2), 202-207. <https://doi.org/10.1016/j.jvoice.2009.10.009>.
- Wêreldgesondheidsorganisasie, 2019, SARS Coronavirus-2: SARS-CoV-2, World Health Organization.

Voorbeeld van een van die databasisse (SCOPUS) se soektog:

Elektroniese databasis	Soekterminologie	Tipe soektog	Datum van soektog	Trefsae	Limiete toegepas
SCOPUS Kies alle lêers Voer uit na BIBTex Formuleer Stoor in Mendeley	(Telemedicine OR telehealth OR telecare OR teletherapy OR Ehealth OR mobile health OR mhealth) AND (Voice disorder OR voice therapy OR voice disturbance OR voice fatigue OR voice intervention OR voice treatment OR voice rehabilitation OR vocal disturbance OR voice dysphonia OR voice aphonia OR vocal pathology OR voice pathology)	Gevorderde soektog	5 Februarie 2021	22 artikels	Engels en Afrikaans 2000 tot 2021 Assessment Paediatric Pediatric Children

Tabel 2: Data-onttrekking – beskrywende opsomming

Studie- nommer	Outeur(s)	Jaar van publikasie	Land van studie- deelnemers	Metodologiese ontwerp	Geslag van deelnemers per groep	Ouderdom van deelnemers	Getal deelnemers
1	Fu, S., Theodoros, D.G., & Ward, E.C.	2015	Taiwan	Kwasi-eksperimentele voortoets-natoets ontwerp	Vroulik TP n=10	33,7 jaar (gemiddeld) Omvang: 19-49 jaar	n=10 TP
2	Lin, F.C., Chien, H.Y., Chen S.H., Kao, Y.C., Cheng P.W., & Wang, C.T.	2020	Taiwan	Ewekansig beheerde eksperimentele ontwerp	Manlik TP n=19/ Manlik KT n=17/ Vroulik TP n=14/ Vroulik KT n=19	66 jaar (gemiddeld TP) 57-82 jaar (TP groepsomvang) 69 jaar (gemiddeld KP) 58-81 jaar (KT groepsomvang)	n=69 (n=33 TP/n=36 KT)
3	Mashima, P.A., Birkmire-Peters, D.P., Symms, M.J., Holtei, M.R., Burgess, L.P.A., & Leslie, J.P.	2003	VSA	Ewekansig beheerde eksperimentele ontwerp	Manlik telepraktyk n=12/ Manlik KT n=11/ Vroulik TP n=11/ Vroulik KV n=17	45 jaar (gemiddelde ouderdom van alle deelnemers) 18-85 jaar (KT groepsomvang) 18-85 (TP groepsomvang)	n=72 (oorspronklik ingesluit)/ n=51 (finale groep wat terapieprogramme voltooi het) (n=28 KT/n=23 TP)
4	Rangarathnam, P.A., McCullough, G.H., Pickett, H., Zraick, R.I., Tulunay-Ugur, O., & McCullough, K.C.	2015	VSA	Ewekansig beheerde eksperimentele ontwerp	Manlik TP: n=0/ Manlik KT n=3/ Vroulik TP n=7/ Vroulik KP n=4	51 jaar (gemiddelde ouderdom van alle deelnemers) 39-60 jaar (TP groepsomvang) 16-81 jaar (KT groepsomvang)	n=14 (n=7 KT/n=7 TP)
TP	=	Telepraktyk;	KT	=	Konvensionele	terapie	

Tabel 3: Beskrywende opsomming – assessering, intervensie en uitkomst

Studie-nr	Outeur(s)	Diagnoses	Graad van diagnose	Type assessering	Type telepraktik	Type platform	Duur van terapie	Uitkomst
1	Fu et al. (2015)	Bilaterale stembandnodules (n=10)	Geringe tot matige disfonie: n=8 Matige disfonie: n=2	Ouditiewe perseptuele gradering, stroboskopiese, akoestiese meting, fisiologiese meting, Voice Handicap Index, telepraktik-tevredenheidsvraelys	Sinkroniese telepraktik; Die eerste sessie konvensionele terapie en vokale higiëne is bespreek. Die volgende 8 sessies was via telepraktik.	Skype	9 sessies/3 weke/ Direkte terapie: 1 sessie Telepraktik: 8 sessies	Duidelike verbetering ten opsigte van perseptuele, stemfunksie-, akoestiese en fisiologiese grense. Daar was ook 'n duidelike verbetering in die grootte van nodules en die pasiënt se persepsie van hulle stemverwante lewenskwaliteit. Die pasiënt was hoogs positief oor hulle eerste ervaring van telepraktik.
2	Lin et al. (2020)	Stematrofie (n=33), unilaterale stembandparalise (n=13), stemspanningsdisfonie (n=7), stemnodules (n=6) en poliepe (n=10)	Nie gespesifiseer nie	Stroboskopiese, ouditiewe perseptuele evaluasie, akoestiese analise, maksimum fonasietyd	Sinkroniese en asinkroniese telepraktik	Sosiale media-toepassing (Line)	Telepraktik: 8 sessies Direkte terapie: 8 sessies. 25 telepraktik pasiënte en 24 pasiënte in die kontrole-groep het ten minste 4 weeklikse sessies bygewoon.	Daar was geen verskille tussen die twee toetsgroepe nie. Duidelike verbeterings by beide die telepraktikgroep en die kontrolegroep is waargeneem.
3	Mashima et al. (2003)	Stemnodules (n=31), edeem (n=29), unilaterale stemparalise (n=9), stem-spanningsdisfonie (n=3)	Nie gespesifiseer nie	Ouditiewe perseptuele evaluasie, akoestiese analise, pasiënt tevredenheidsgradering, optiese vesel-Haringoskopiese	Sinkroniese en asinkroniese telepraktik Die eerste sessie was 'n konvensionele terapiessessie vir beide groepe.	Microsoft Windows NetMeeting	5,7 sessies/9 weke	Daar was nie verskille in die uitkomst tussen die konvensionele terapie- en die telepraktikgroep nie. Deelnemers in beide groepe het verbetering in alle uitkomstmetings na afloop van beide metodes getoon.
4	Rangarathnam et al. (2015)	Stemspanningsdisfonie	Nie gespesifiseer nie	Ouditiewe perseptuele evaluasie, akoestiese evaluasie, aerodinamiese evaluasie, lewenskwaliteitsmetings	Sinkroniese telepraktik Deelnemers het almal hul eerste en laaste sessie as 'n konvensionele terapiessessie gehad. Dit is gebruik om die deelnemers te assesser voor en na die intervensie.	Tandberg video-konferensie-sisteem.	12 sessies/6 weke	Perseptuele en lewenskwaliteitsmetings was beduidend beter na behandeling en was statisties gelyk in alle groepe. Akoestiese en aerodinamiese metings het in beide groepe verander, maar die veranderinge was nie statisties betekenisvol nie. Die resultate vir die twee groepe was vergelykbaar.

Werking van surfaktante in waterige oplossings en by die lug-water-tussenvlak: 'n Oorsig

EH Wiese, D Venter, DP Otto, FJ Smit, HCM Vosloo

Navorsingsfokusarea vir Chemiese Hulpbronveredeling, Katalise- en Sintesenavorsingsgroep, Noordwes-Universiteit, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Frans J Smit **E-pos:** frans.smit@nwu.ac.za of Daniel P Otto **E-pos:** daniel.otto@nwu.ac.za

Surfaktante is veelsydige verbindings wat in ons alledaagse lewe gebruik word. Dié verbindings is bestanddele van byvoorbeeld skoonmaakmiddels, brandstofbymiddels, kosmetiese produkte, medisyne en boumateriaal. Dit is belangrik om die oppervlak- en massavloei-eienskappe van surfaktante te verstaan. Die fisies-chemiese eienskappe van surfaktante kan gebruik word om weldeurdagte besluite te neem en om surfaktante doelgerig vir sekere toepassings te sintetiseer. Fisies-chemiese eienskappe, waaronder oppervlakversadigingskonsentrasie, kritieke miselkonsentrasie, Krafft-punt en wolkpunt val, kan die effektiwiteit en doeltreffendheid van 'n surfaktant beïnvloed. Dié eienskappe kan ook gemanipuleer word deur toestande soos temperatuur en surfaktantkonsentrasie te verander. Kennis oor die werking van surfaktante in waterige oplossings kan tot die verbetering van verskeie verbruikersgoedere lei. Verder is weinig Afrikaanse literatuur aangaande surfaktante beskikbaar. Hierdie oorsigartikel dien dus as 'n Afrikaanse inleiding tot die werking van surfaktante in waterige oplossings en by 'n lug-water-tussenvlak. Aangesien nie-ioniese surfaktante algemeen in die handel voorkom, word die werking van surfaktante hoofsaaklik aan die hand hiervan verduidelik.

Sleutelwoorde: oppervlakaktiewe middels, Fisies-chemiese eienskappe, waterige oplossings, Afrikaansliteratuur, nie-ioniese benattingsmiddels

Action of surfactants in aqueous solutions and at the air-water interface: An overview: Surfactants are versatile compounds used in our everyday lives. These compounds are constituents of, for example, cleaning agents, fuel additives, cosmetic products, medicines, and construction materials. It is essential to comprehend the surface and bulk flow properties of surfactants. The physicochemical properties of surfactants can be utilized to make well-informed decisions and to synthesize surfactants purposefully for specific applications. Physicochemical properties, including surface saturation concentration, critical micelle concentration, Krafft point and cloud point, can influence the effectiveness and efficiency of a surfactant. These properties can also be manipulated by altering conditions such as temperature and surfactant concentration. Knowledge of the functioning of surfactants in aqueous solutions can lead to improvements in various consumer goods. Furthermore, there is limited Afrikaans literature available concerning surfactants. Therefore, this review article serves as an Afrikaans introduction to the operation of surfactants in aqueous solutions and at an air-water interface. Since non-ionic surfactants are commonly found in commerce, the operation of surfactants is primarily explained with reference to these compounds.

Keywords: Surfactants, Physicochemical properties, Aqueous solutions, Afrikaans literature, Non-ionic surfactants

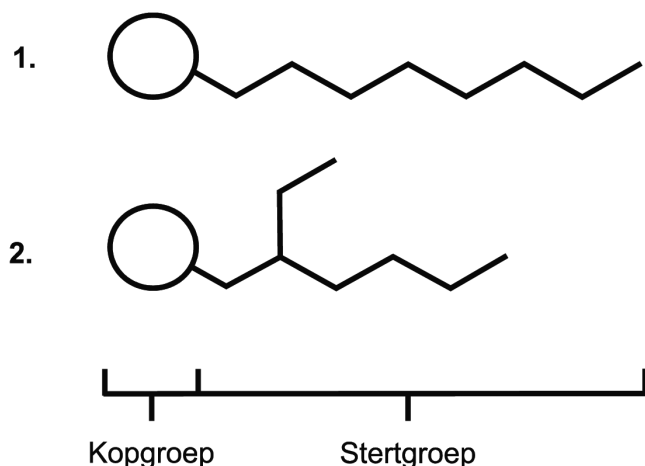
Inleiding

Surfaktante, ook bekend as oppervlakaktiewe stowwe, word al die afgelope vyf millennia in die vorm van seep deur die mensdom gebruik. Die oudste voorbeeld hiervan is 'n Babiloniese spykerskriftablet wat beskryf hoe olie en 'n alkali, waarskynlik in die vorm van houtas, gemeng kan word om seep te vorm (Levey, 1954). Die woord surfaktant is 'n afkorting van die Engelse term "surface active agent". Hierdie klas verbindings is oppervlakaktief, en beskik oor die vermoë om die vrye energie (G) van 'n tussenvlak¹ te beïnvloed. Gevolglik kan surfaktante die mengbaarheid van onmengbare fases bevorder (Tadros *et al.*, 2005). Ondanks die feit dat surfaktante al vyf millennia

gebruik word, het die navorsing daaroor eers gedurende die afgelope eeu begin aftrek kry. Surfaktante word gewoonlik in huishoudelike skoonmaakmiddels gebruik, maar dit word ook in menige ander nywerhede aangewend, byvoorbeeld in ruolie-ontginning, sowel as in farmaseutika en kosmetika (Banat *et al.*, 2000; Myers, 2020; Quintero, 2002). Dus word surfaktant- en tussenvlakwetenskap as een van die belangrikste wetenskaplike velde geag (Clapés & Infante, 2002).

'n Surfaktantmolekule (**Figuur 1**) beskik gewoonlik oor 'n hidrofiliese kopgroep, wat met water mengbaar is en 'n hidrofobiese stertgroep, wat onmengbaar is. Hoewel olie en water nie mengbaar is nie, kan surfaktante as gevolg van hul unieke struktuur,

1. In surfaktantwetenskap word oppervlak, tussenvlak, koppelvlak, intervlak, ens. as sinonieme vir die Engelse woord "interface" gebruik. In hierdie artikel sal deurgaans van tussenvlak gebruik gemaak word om die vlak tussen twee fases te beskryf.



Figuur 1: Algemene strukture van (1) 'n lineêre en (2) 'n vertakte surfaktant

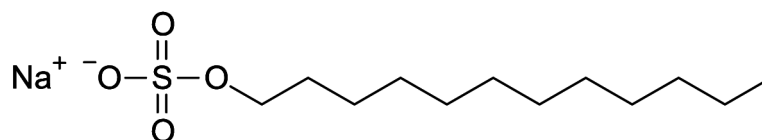
olie in water laat meng. Die verskynsel kom voor omdat die surfaktant die oppervlakspanning tussen die twee onmengbare fases verlaag.

Die toepassings van 'n spesifieke surfaktant word deur die struktureienskappe van die verbinding beïnvloed. Die omvang van die toepassing word hoofsaaklik deur die struktuur van die hidrofiliese kopgroep bepaal (Tadros *et al.*, 2005). Kopgroepe

word in vier kategorieë verdeel (**Figuur 2**) naamlik: nie-ionies (geen lading), kationies (positiewe lading), anionies (negatiewe lading) en zwitterionies (positiewe en negatiewe lading) (Rosen & Kunjappu, 2012). Die fisies-chemiese eienskappe, en dus die spesifieke toepassing, van 'n surfaktant word ook deur die struktuur van die hidrofoobiese stertgroep beïnvloed. Byvoorbeeld: Indien die koolstofketting van 'n lineêre surfaktant, **1**, verleng word, sal beide die surfaktant se smeltpunt en die vermoë om die oppervlakspanning te verlaag, toeneem (Herrmann, 1966). Andersyds sal 'n vertakking, **2**, in 'n surfaktant met dieselfde getal koolstowwe, dieselfde impak op die oppervlakspanning-verlagingsvermoë hê, maar die teenoorgestelde impak op die smeltpunt (Varadaraj *et al.*, 1991). Variasies van beide die kop- en stertgroepe gee aanleiding tot die verskeidenheid in toepassings.

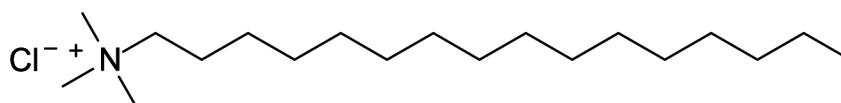
Wanneer nuwe, unieke molekules vervaardig word, is dit belangrik om metodes te implementeer wat akkurate fisies-chemiese data kan gebruik word om voorspellings ten opsigte van moontlike toepassings te maak. Fisies-chemiese eienskappe, byvoorbeeld die statiese en dinamiese oppervlakspanning, kan waardevolle inligting oor surfaktantwerking verskaf (Rosen & Dahanayake, 2000). Statiese oppervlakspanning word gemeet om die doeltreffendheid en effektiwiteit van 'n surfaktant om die oppervlakspanning te verlaag te bepaal. Dit is veral belangrik

Anionies:



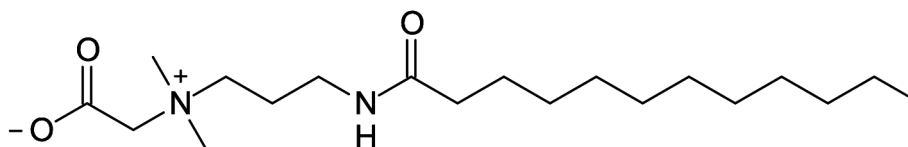
Natriumdodesielsulfaat

Kationies:



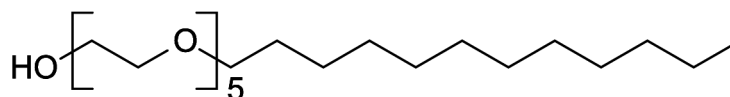
Trimetielammoniumheksadekaanchloried

Zwitterionies:



Kokamidopropielbetaïen

Nie-ionies:



Pentaëtileenglikolmonododesieleter

Figuur 2: Voorbeelde van die onderskeie surfaktantklasse

vir die formulering van emulsies. Dinamiese oppervlakspanning word gebruik om die oppervlakontspanningstyd te bepaal. Dié eienskap is belangrik om die tempo waarteen die surfaktant die oppervlakspanning verlaag te bepaal (Eastoe & Dalton, 2000; Ferri & Stebe, 2000). Surfaktante wat die oppervlakspanning vinnig kan verlaag, word veral in oppervlakbedekkers en spreimiddels gebruik.

Die rol wat konsentrasie, pH, temperatuur, soutgehalte en die oplosmiddel op die fisies-chemiese eienskappe van surfaktante speel, is ook belangrik (Rosen & Kunjappu, 2012). Konsentrasie het 'n belangrike invloed op die fisies-chemiese eienskappe soos oplosbaarheid en viskositeit van die surfaktante en sal deurgaans in die artikel gebruik word. Dié eienskappe word vir ioniese surfaktante beduidend deur die pH van 'n oplossing beïnvloed, in teenstelling met nie-ioniese surfaktante, waar pH 'n minimale invloed op die surfaktant se eienskappe het (Tadros *et al.*, 2005).

Opgeloste soute kan die grootte van die afstotende kragte tussen ioniese surfaktante verlaag, wat in sekere gevalle die doeltreffendheid van 'n surfaktant kan verhoog (Rosen en Kunjappu, 2012). Die temperatuur en die oplosmiddel kan ook die oplosbaarheid van die surfaktante affekteer, wat die konsentrasie van die surfaktante in oplossing kan beïnvloed. 'n Surfaktant se nuttigheid in 'n gegewe toepassing kan deur 'n verskeidenheid faktore beïnvloed word, daarom is dit noodsaaklik om surfaktantwerking op 'n teoretiese vlak te verstaan.

Hierdie oorsigartikel dien dus as 'n Afrikaanse inleiding tot die werking van surfaktante in 'n waterige oplossing en by 'n lug-water-tussenvlak. Die werking van surfaktante word aan die hand van nie-ioniese surfaktante verduidelik aangesien dié surfaktante algemeen in die handel gebruik word. Verder word die vorming van verskillende aggregate en vloeibare kristalle bespreek. Dit is belangrik om die werking van hierdie supramolekulêre strukture te verstaan omdat hulle die fisies-chemiese eienskappe van surfaktante verander.

Oppervlakspanning

Dit is nodig om begrip te verkry van oppervlakspanning om die werking van surfaktante te verstaan. Oppervlakspanning is die

weerstand teen vermenging wat, as gevolg van kohesie- en adhesiekragte, by 'n lug-water-tussenvlak voorkom. Oppervlakspanning (γ) kan wiskundig aan die hand van krag (Vergelyking 1) of aan die hand van arbeid (Vergelyking 2) voorgestel word.

$$\gamma = \frac{F}{2L} \quad (1)$$

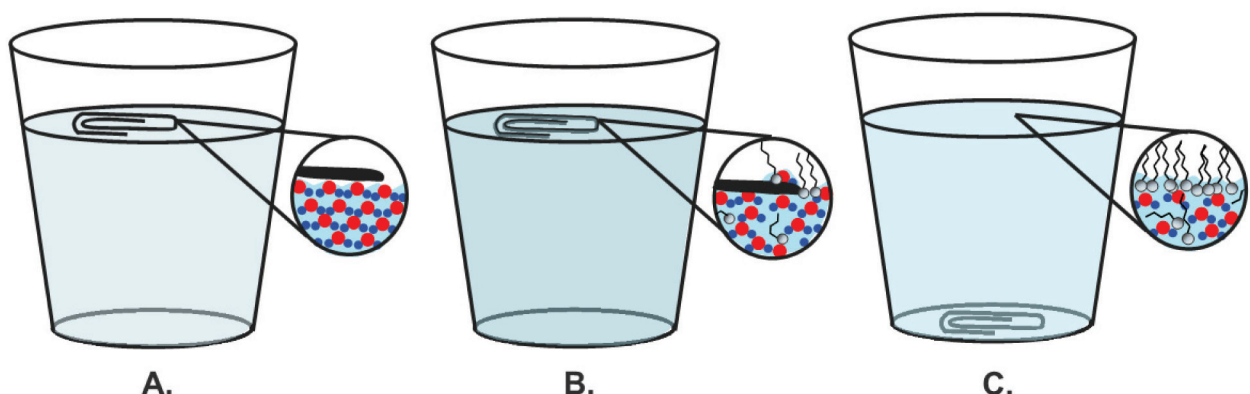
$$\gamma = \frac{W}{dA} \quad (2)$$

In Vergelyking 1 stel F die krag van die oppervlak voor wat op L , die lengte van die oppervlak, inwerk. In Vergelyking 2 kan γ bereken word as 'n funksie van arbeid, W , wat as potensiële energie in die oppervlak gestoor word. W ontstaan as gevolg van die krag, F , wat oor 'n sekere lengte, dx , op die oppervlak inwerk. Die verandering in oppervlakte wat die oppervlak as gevolg van W ondergaan, word deur dA voorgestel.

'n Bekende voorbeeld om die beginsel te illustreer is die drywende skuifspeld op water wat sink na gelang surfaktant bygevoeg word (**Figuur 3**). 'n Oppervlak bestaan tussen die polêre watermolekules en nie-polêre lugmolekules. Oppervlakspanning ontstaan by die lug-water-oppervlak as gevolg van die kohesiekragte wat tussen nabygeleë watermolekules voorkom. Die kohesiekragte van waterstofbindings is sterker as die adhesiekragte wat tussen lug- en watermolekules voorkom. Gevolglik word die watermolekules by die tussenvlak sterker deur die watermolekules onder en rondom hulle aangetrek as deur lugmolekules (Myers, 2020).

Indien 'n skuifspeld versigtig op die wateroppervlak geplaas word (Figuur 3 A) sal die skuifspeld se gewig oor 'n relatief groot oppervlakte verplaas word en verseker dat dit dryf. Die kragte wat tussen die watermolekules voorkom, is sterker as die arbeid wat loodreg deur die skuifspeld op die oppervlak uitgeoefen word.

Indien 'n surfaktant by die water gevoeg word (Figuur 3 B), sal die oppervlakspanning van die sisteem afneem as gevolg van



Figuur 3: Die invloed van surfaktantkonsentrasie op die kohesiekragte wat tussen watermolekules ervaar word (A: geen surfaktant, B en C: surfaktant bygevoeg).

die invloed wat die surfaktant op die adhesie- en kohesiekragte uitoefen. Aangesien die hidrofobiese stertgroep dit termodinamies ongunstig vir die surfaktant maak om in oplossing te wees, sal die surfaktantmonomere eerder by die lug-water-opppervlak adsorbeer. By die lug-water-opppervlak word die hidrofiliese kopgroep van die surfaktant na die watermolekules en die hidrofobiese stertgroep na die lugmolekules georiënteer. Omdat die hidrofobiese stertgroep nie meer in die water voorkom nie, word die vrye energie van die sisteem verminder. Die oppervlakspanning sal egter steeds afneem, aangesien die kopgroepe steeds die kohesiekragte tussen die watermolekules by die lug-water-opppervlak breek.

Indien die oppervlakspanning verlaag tot by die vlak waar die kohesiekragte tussen die watermolekules en surfaktantmonomere laer is as die arbeid wat deur die skuifspeld loodreg op die oppervlak uitgeoefen word (Figuur 3 C) sal die skuifspeld deur die oppervlak breek en sink.

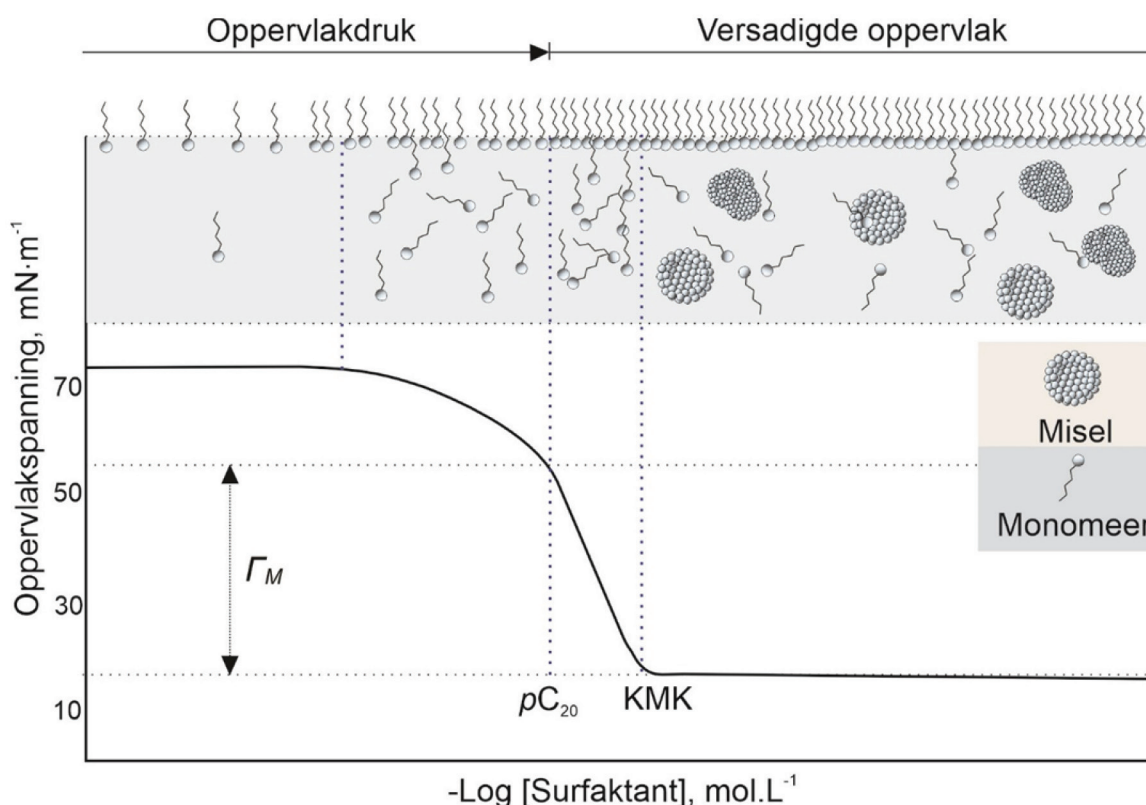
Surfaktantwerking

Wanneer surfaktante in water opgelos word, sal die vrye energie van die grootskaalse fase toeneem. Hierdie verskynsel ontstaan as gevolg van die ongunstige interaksie tussen die hidrofobiese stertgroep van die surfaktant en die geordende, polêre watermolekules. Om die vrye energie van die grootskaalse fase te verlaag, sal van die surfaktantmonomere wat in die sisteem voorkom by die tussenvlakke adsorbeer (Rosen & Kunjappu, 2012). Indien die konsentrasie van die surfaktant hoog genoeg is, sal hierdie tussenvlakke uiteindelik met surfaktantmonomere versadig word (Figuur 4).

'n Gevolg van toenemende surfaktantkonsentrasie, is dat die surfaktantmonomere by 'n sekere konsentrasie spontaan aggregeer om supramolekulêre strukture, wat miselle genoem word, te vorm. Spontane aggragasie vind plaas omdat die vrye energie van die sisteem in ooreenstemming met die surfaktantkonsentrasie toeneem. By 'n sekere konsentrasie sal die vrye energie van die sisteem hoog genoeg wees dat dit energeties meer gunstig is om, deur middel van aggragasie, die hidrofobiese groepe van die watermolekules af te sonder. Die konsentrasie waar hierdie supramolekulêre strukture vorm, word die kritieke miselkonsentrasie, of KMK, genoem (Zana, 2005). Miselle is kolloïdale, sfeer- of staafagtige aggregate, hoewel surfaktante ook verskeie ander supramolekulêre strukture kan aanneem.

Die vorming van die verskillende supramolekulêre strukture word deur die konsentrasie, temperatuur, pH en soutgehalte van die surfaktante beïnvloed. Daar is dus twee eienskappe wat die werking van surfaktante kan verduidelik, naamlik die adsorpsie van 'n surfaktant by 'n tussenvlak, en die vorming van aggregate in oplossing (Porter, 2013).

Die invloed wat surfaktantkonsentrasie op die oppervlakspanning van 'n oplossing uitoefen en 'n visuele voorstelling van wat in oplossing en by tussenvlakke plaasvind, word in Figuur 4 uitgebeeld. Vanuit Figuur 4 is dit duidelik dat die oppervlakspanning verlaag na gelang die surfaktantkonsentrasie in oplossing, en dus by die oppervlak, toeneem.



Figuur 4: Ewewigstoestand tussen surfaktantmonomere en miselle

Wanneer die oppervlakspanning met $20 \text{ mN}\cdot\text{m}^{-1}$ verlaag het, met ander woorde $\Delta\gamma = 20 \text{ mN}\cdot\text{m}^{-1}$, kan mens aanneem dat die oppervlakversadigingskonsentrasie, Γ_M , feitlik bereik is (Rosen & Kunjappu, 2012). Die negatiewe logaritme van die surfaktant-konsentrasie by $\Delta\gamma = 20 \text{ mN}\cdot\text{m}^{-1}$ word as 'n maatstaf vir die doeltreffendheid van adsorpsie van 'n surfaktant beskou en staan as pC_{20} bekend (Rosen & Kunjappu, 2012).

Die opvolgende infleksiepunt is 'n aanduiding dat die KMK bereik is. Die oppervlakspanning by KMK, γ_{KMK} , staan as die effektiwiteit van die surfaktant bekend (Porter, 2013; Rosen & Kunjappu, 2012). Vervolgens bly die oppervlakspanning konstant met 'n toename in surfaktantkonsentrasie. Hierdie verskynsel kom voor omdat die miselle as reservoirs vir surfaktantmonomere optree. Voordat die oplossing miselle bevat het, sou 'n toename in die oppervlakte die uniforme monolaag wat die surfaktantmonomere gevorm het, gebreek het. Die teenwoordigheid van miselle impliseer dat daar 'n oormaat van die surfaktant opgelos is. 'n Toename in die oppervlakte sal dus nie die monolaag breek nie. Enige gaping wat in die monolaag vorm, word onmiddellik deur monomere uit die omgewing of deur miselle gevul.

Om die werkverrigting van 'n surfaktant te bepaal, moet beide die doeltreffendheid van adsorpsie, pC_{20} , en die effektiwiteit van oppervlakspanningverlaging, Π_{KMK} , van die surfaktant vasgestel word. Die doeltreffendheid en effektiwiteit van 'n surfaktant is nie altyd eweredig aan mekaar nie, en die twee parameters is soms omgekeerd eweredig. Die verhouding tussen die twee parameters word gewoonlik deur die surfaktantklas bepaal (Rosen & Kunjappu, 2012).

Adsorpsie by 'n lug-water-oppervlak

Die skuim-, benattings- en dispersievermoë van 'n surfaktant word deur die adsorpsie-eienskappe van die surfaktant bepaal (Sakamoto *et al.*, 2017). Die adsorpsie van 'n surfaktant by 'n vloeistof-vastestoftussenvlak kan gravimetries bepaal word. Die metode behels dat die verskil in surfaktantkonsentrasie van 'n oplossing bereken word voor en nadat 'n voorwerp met bekende oppervlakte aan die oplossing blootgestel word (Porter, 2013).

Dit is egter moeiliker om adsorpsie by 'n gas-vloeistof- of 'n vloeistof-vloeistof-tussenvlak te meet. Indirekte metodes soos tensiometrie word gebruik om die adsorpsie-eienskappe by 'n lug-water-tussenvlak te bepaal en sal hier omvattend beskryf word. Die invloed wat die surfaktantkonsentrasie, C_1 , op die oppervlakspanning, γ , word gewoonlik gebruik om adsorpsie-eienskappe te beskryf (Porter, 2013) (Vergelyking 3). Die Gibbs-adsorpsie-isoterm kan as die grondslag beskou word van al die adsorpsievergelykings wat monolaagprosesse beskryf (Gibbs, 1928).

$$d\gamma = - \sum_{i=1}^{n-1} \bar{\Gamma}_i^{(oplosmiddel)} d\mu_i \quad (3)$$

Die oppervlakversadigingsdigtheid en die verandering in die chemiese potensiaal van komponent i in die sisteem word onderskeidelik deur $\bar{\Gamma}_i^{(oplosmiddel)}$ en $d\mu_i$ voorgestel. Die veran-

dering in die oppervlakspanning vanaf die suiwer oplosmiddel, γ_0 , relatief tot die oppervlakspanning, γ , wat deur die verandering in die chemiese potensiaal voortgebring is, word deur γ voorgestel.

Vergelyking 4 kan vir 'n ideale sisteem toegepas word om die chemiese potensiaal van komponent i in die sisteem, μ_i , te bepaal:

$$\mu_i = \mu_i^o + 2,303 RT \log(C_i) \quad (4)$$

In hierdie vergelyking word die chemiese potensiaal, μ_i , van die sisteem by 'n spesifieke konsentrasie, C_i , van komponent i voorgestel. Die chemiese potensiaal van die aanvanklike toestand van die sisteem word deur μ_i^o voorgestel, terwyl R en T onderskeidelik die universele gaskonstante en die absolute temperatuur in Kelvin voorstel.

Deur Vergelyking 4 by Vergelyking 3 in te voeg, is dit moontlik om die adsorpsie by die lug-water-oppervlak met Vergelyking 5 te beskryf. Vir sisteme waar 'n verdunde surfaktantkonsentrasie teenwoordig is, $\leq 10 \text{ mmol}\cdot\text{L}^{-1}$, kan die oppervlak-konsentrasie, Γ_1 , met Vergelyking 5 bereken word:

$$d\gamma = - 2,303 RT \Gamma_1 d \log C_1 \quad (5)$$

Vergelyking 5 is spesifiek van toepassing op sisteme wat nie-ioniese surfaktante bevat en waar geen ander bymiddels, soos byvoorbeeld soute, teenwoordig is nie. Menige ander vergelykings bestaan wat die adsorpsie-eienskappe van surfaktante noukeuriger beskryf. Hierdie oorsigartikel sal egter op die uitbreiding van Vergelyking 5, die Gibbs-isoterm, fokus. Vir ioniese surfaktant-vloeistof-mengsels kan die oorsigartikel van Prosser en Franses geraadpleeg word (Prosser & Franses, 2001).

Volgens die literatuur is dit moontlik om die waarde van die oppervlakversadigingskonsentrasie, Γ_M , vas te stel. Γ_M is veral belangrik om die effektiwiteit van adsorpsie te bereken. Die effektiwiteit van adsorpsie van die surfaktant neem toe na gelang die oppervlakte afneem wat per surfaktantmolekule beset word. Die oppervlakversadigingskonsentrasie kan bereken word deur in ag te neem dat die oppervlak $84,0\text{--}99,9\%$ versadig is wanneer die oppervlakspanning met $20 \text{ mN}\cdot\text{m}^{-1}$ gedaal het.

Dus, om Γ_M te bereken, kan Vergelyking 5 as Vergelyking 6 herskryf word, deur $\Delta\gamma = 20 \text{ mN}\cdot\text{m}^{-1}$, die KMK en die oppervlakspanning by KMK, γ_{KMK} , in te voeg. Beide die KMK en γ_{KMK} kan eksperimenteel bepaal word. Neem in ag dat water, $\gamma = 72 \text{ mN}\cdot\text{m}^{-1}$, as die oplosmiddel in hierdie voorbeeld gebruik word, dus word $\gamma_0 = 52 \text{ mN}\cdot\text{m}^{-1}$:

$$\Gamma_M = \frac{1}{2,303 RT} \frac{0,052 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1} - \gamma_{KMK}}{(\log(KMK) - \log(C_{20}))} \quad (6)$$

Die eerste uitbreiding van die Gibbs-isoterm, Vergelyking 5, word verkry deur die Langmuir-isoterm (Langmuir, 1917), Vergelyking 8, in die vergelyking in te voeg. Om die Langmuir-isoterm te verduidelik moet die dinamiese aard van surfaktantadsorpsie by die tussenvlak vooraf beskryf word:

$$k_a C_1 (1 - \theta) = k_d \theta \quad (7)$$

In Vergelyking 7 word die konsentrasie van die surfaktant deur C_1 voorgestel en die fraksie van die oppervlak wat deur die surfaktant beset is, word deur θ voorgestel. Die eersteorde-adsorpsietempokonstante word deur k_a voorgestel, terwyl die eersteordedesorpsietempokonstante deur k_d voorgestel word. Hierdie twee konstantes beteken dat uitruiling tussen die surfaktantmonomere wat by die tussenvlak adsorbeer en die monomere wat in oplossing voorkom, plaasvind. Die ewewig-konstante vir adsorpsie en desorpsie, die adsorpsiekoëffisiënt, word weergegee deur: $K_L = \frac{k_a}{k_d}$. Deur Γ_M en K_L in Vergelyking 7 in te stel word die Langmuir-isoterm (Vergelyking 8) afgelei:

$$\theta = \frac{\Gamma_1}{\Gamma_M} = \frac{K_L C_1}{1 + K_L C_1} \quad (8)$$

Dus kan die adsorpsiekoëffisiënt, K_L , uit Vergelyking 8 verkry word. Die vergelyking kan vereenvoudig word deur K_L met die omgekeerde waarde, $a = \frac{1}{K_L}$, te vervang. Wanneer Vergelyking 8 herrangskik word en a in plaas van K_L gebruik word, kan die Langmuir-isoterm deur Vergelyking 9 voorgestel word (Rosen & Kunjappu, 2012):

$$\Gamma_1 = \frac{\Gamma_M C_1}{C_1 + a} \quad (9)$$

Vergelyking 9 kan vervolgens by Vergelyking 5 ingevoeg word om Vergelyking 10 te lewer:

$$d\gamma = -2,303 RT \left(\frac{\Gamma_M C_1}{C_1 + a} \right) d \log C_1 \quad (10)$$

Die verandering in oppervlakspanning, $d\gamma$, kan ook aan die hand van oppervlakdruk, Π , uitgedruk word:

$$\Pi = d\gamma = \gamma_0 - \gamma \quad (11)$$

Dus kan Π deur die verskil tussen die oppervlakspanning van die oplosmiddel, γ_0 , en die oplossing, γ , bereken word. Indien Vergelyking 11 in ag geneem word, kan Vergelyking 10 herskryf word om die Szyszkowski-vergelyking (Szyszkowski, 1908) te gee (Rosen & Kunjappu, 2012):

$$\Pi = 2,303 RT \Gamma_M \log \left(\frac{C_1}{a} + 1 \right) \quad (12)$$

Vergelyking 12 word algemeen in die literatuur vermeld omdat dit die verband tussen die oppervlakspanning en surfaktant-konsentrasie gewoonlik met voldoende akkuraatheid beskryf.

Laastens word die Frumkin-vergelyking gebruik om die oppervlakdruk, Π , met die oppervlakversadigingskonsentrasie, Γ_M , in verband te bring (Frumkin, 1925), Vergelyking 13:

$$\Pi = -2,303 RT \Gamma_M \log \left(1 - \frac{\Gamma_1}{\Gamma_M} \right) \quad (13)$$

Die oppervlakdruk is eweredig aan die surfaktantoppervlak-konsentrasie, Γ_1 . Die druk ontstaan as gevolg van die stert- en kopgroepe van surfaktantmonomere wat by die tussenvlak bots en neem toe na gelang die hoeveelheid afstotende interaksies tussen monomere verhoog.

Die oppervlakte per surfaktantmonomeer by 'n tussenvlak, A , word gebruik om die interaksies tussen die monomere by die

tussenvlak te beskryf. Die oppervlakte, A , kan deur die Avogadrogetal, N_A , en die oppervlakversadigingskonsentrasie, Γ_M , soos in Vergelyking 14 voorgestel, bereken word.

$$A_M = \frac{1}{N_A \Gamma_M} \quad (14)$$

Die werkverrigting van verskillende surfaktante by 'n spesifieke tussenvlak kan met behulp van die pC_{20} , Π_{KMK} , Γ_M , A_M , sowel as die waarde van K_L of van a , met mekaar vergelyk word. Die waardes wat hier bespreek word, kan ook gebruik word om die vrye energie van adsorpsie, ΔG_{ads} , die standaardentropie van adsorpsie, ΔS_{ads} , en die standaardentalpie van adsorpsie, ΔH_{ads} , by die lug-water-oppervlak te bepaal.

Die oppervlakspanning-konsentrasiekromme (Figuur 4), wat in die omgewing van die KMK voorkom, verskaf die nodige inligting om ΔG_{ads} van verdunde ($<10 \text{ mmol}\cdot\text{L}^{-1}$) nie-ioniese surfaktante te bereken. ΔG_{ads} kan met behulp van die berekening wat deur Rosen en Aronson voorgestel is, Vergelyking 15, bereken word (Rosen & Kunjappu, 2012):

$$\Delta G_{ads} = 2,303 RT \log \left(\frac{C_\Pi}{\omega} \right) - \Pi A_M \quad (15)$$

In Vergelyking 15 stel C_Π die surfaktantkonsentrasie by 'n oppervlakdruk van Π voor, en ω die molhoeveelheid water wat in 'n liter voorkom. Indien die oppervlakspanning met $20 \text{ mN}\cdot\text{m}^{-1}$ daal, kan die vergelyking herskryf word as:

$$\Delta G_{ads} = -(2,303 RT) pC_{20} - 20(A_M) - 2,303 RT \log(\omega) \quad (16)$$

Die waarde van ΔG_{ads} beskryf die surfaktant se vermoë om by die lug-water-oppervlak te adsorbeer. 'n Negatiewe waarde vir ΔG_{ads} dui daarop dat adsorpsie by die tussenvlak spontaan plaasvind. Aangesien alle surfaktante spontaan by die tussenvlakke adsorbeer, het alle surfaktante 'n negatiewe ΔG_{ads} -waarde. Indien dié waarde nul nader, sal 'n surfaktant eerder in oplossing bly as om by die oppervlak te adsorbeer. Indien die waarde negatief is, sal die surfaktant eerder by 'n oppervlak adsorbeer as om opgelos te bly.

Die waardes van ΔH_{ads} en ΔS_{ads} kan bepaal word deur die volgende vergelyking te gebruik:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (17)$$

Dus, indien ΔH_{ads} oor 'n bepaalde temperatuurgebied konstant is, kan ΔS_{ads} deur die volgende vergelyking verkry word:

$$\frac{d\Delta G_{ads}}{dT} = -\Delta S_{ads} \quad (18)$$

Op soortgelyke wyse kan ΔH_{ads} deur middel van Vergelyking 19 bepaal word, indien ΔS_{ads} oor 'n bepaalde temperatuurgebied konstant is:

$$T^2 d \left(\frac{\Delta G_{ads}}{T} \right) dT = -\Delta H_{ads} \quad (19)$$

Die waarde van ΔS_{ads} beskryf die geordendheid van 'n sisteem. 'n Positiewe waarde beteken dat 'n minder geordende sisteem bestaan, waar 'n negatiewe waarde 'n meer geordende sisteem beskryf. ΔH_{ads} beskryf die vorming of breking van intermole-

kulêre interaksies tydens adsorpsie. 'n Positiewe ΔH_{ads} beskryf die vorming, terwyl 'n negatiewe waarde daarteenoor op die breking van interaksies tydens adsorpsie dui. Aangesien die adsorpsie van surfaktantmonomere die geordende struktuur van die watermolekules by die lug-water-oppervlak onderbreek, sal die waarde van ΔS_{ads} normaalweg positief wees. Hierdie positiewe verandering in ΔS_{ads} is die vernaamste rede vir die negatiewe ΔG_{ads} en is die hoofoorsaak van spontane adsorpsie wat by die tussenvlak plaasvind (Rosen en Kunjappu, 2012).

Aggregasie in water

Die aggregasie-eienskappe van surfaktante word deur die surfaktantkonsentrasie, die viskositeit en die oplosbaarheidskapasiteit van die surfaktantoplosmiddelmengsel bepaal (Myers, 2020). By die KMK word die maksimum monomeerkonsentrasie bereik. By dié konsentrasie is dit termodinamies meer gunstig om kolloïdale aggregate te vorm. Die relatiewe grootte en vorm van die aggregate kan van die viskositeit van die oplossing afgelei word. Die viskositeit van die oplossing neem toe na gelang die gemiddelde grootte van die aggregate in suspensie toeneem. Die gemiddelde vorm van die aggregate verander met 'n toename in die grootte van die aggregate om vrye energie van die oplosmiddel so laag as moontlik te hou.

Aangesien die vorm en grootte van surfaktantaggregate 'n groot of besondere invloed op die toepassings van surfaktante het, is aggregasie deeglik in die literatuur ondersoek (Nagarajan, 1993; Nagarajan, 2002; Rosen en Kunjappu, 2012). Aggregasie van surfaktante om miselle te vorm vind by die KMK plaas. Die grootte van die aggregate word deur die struktuur en konsentrasie van die surfaktant, sowel as die pH, soutgehalte en oplosmiddel van die oplossing bepaal (Tabel I) (Kosswig, 2000). Die grootte van die aggregate beïnvloed onder andere die viskositeit en die oplosbaarheidskapasiteit van die oplossing.

Tussen 1976 en 1981 het Israelachvili, Mitchell en Ninham 'n nuttige, maar tog betwiste konsep, naamlik die molekulêre pakkingsparameter, voorgestel (Israelachvili *et al.*, 1976). Die molekulêre pakkingsparameter, P , in Vergelyking 20, kan gebruik word om die ewewigsvorm en -grootte van 'n aggregaat aan te dui. Die vergelyking is gegrond op die ruimtelike afmetingseienskappe van verskeie aggregate en die volume wat 'n surfaktantmonomeer beslaan:

$$P = \frac{v}{a_0 l} \quad (20)$$

In Vergelyking 20 stel v en l die volume en lengte van die hidrofobiese stertgroep voor, terwyl a_0 die optimale oppervlakte voorstel wat 'n surfaktant by die misel-water-tussenvlak beset. Dus kan die vorm van die misel deur 'n verhouding van die oppervlakte wat die kopgroep beset, teenoor die volume van die stertgroep van die surfaktant, bepaal word. **Tabel I** illustreer die invloed wat die surfaktantstruktuur op die pakkingsparameter en, gevolglik, die struktuur van die aggregaat het.

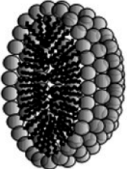
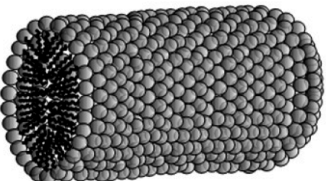
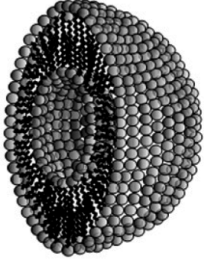
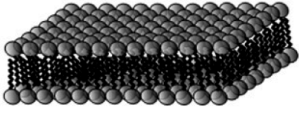
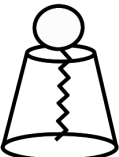
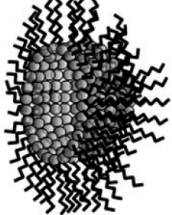
Indien P kleiner as 0,33 is, sal sferiese miselle vorm; byvoorbeeld, wanneer 'n ioniese, kortketting-monoalkielsurfaktant by die surfaktant se KMK in water opgelos is. In die geval waar P groter as 0,33 maar kleiner as 0,5 is, sal langwerpige miselle vorm. Surfaktante met kort, maar lywige, hidrofobiese groepe en klein, diggepakte hidrofiliese groepe, se P -waarde val normaalweg in hierdie gebied (Kosswig, 2000; Rosen & Kunjappu, 2012). Sferiese miselle kan ook by hoër konsentrasies na stokvormige of skyfvormige miselle omgeskakel word (Rosen & Kunjappu, 2012). Die omskakeling mag as 'n tweede KMK waargeneem word, waar die massaoplossingseienskappe weereens verander. Die viskositeit en stabiliteit van die vloeistof kan gevolglik verhoog word. Ander aggregate, soos lamelfases of vesikels, kan ook vorm as die verbindings onversadigde koolwaterstofkettings bevat (Myers, 2020). Lamelfases is surfaktantdubbellae, wat as groot velle ("sheets") in oplossing voorkom. Vesikels is sferiese dubbellaagstrukture, wat oor interne vloeistofholtes beskik (Rosen & Kunjappu, 2012). Vesikels word algemeen vir die enkapsulering van byvoorbeeld geneesmiddels gebruik.

Vergelyking 20 vereenvoudig die effek wat faktore soos surfaktantkonsentrasie, temperatuur, pH en soutgehalte op die pakkingsparameter het. Indien hierdie veranderlikes gemani-puleer word, kan die impak daarvan deur 'n verandering in a_0 voorgestel word. Indien die soutgehalte van 'n ioniese surfaktant-in-water-oplossing byvoorbeeld verhoog word, sal die a_0 -waarde daal. Hierdie daling ontstaan omdat die soutione tussen die ioniese surfaktantkopgroepe by die miseloppervlak adsorbeer. Soutione kan as teenione optree waar die elektrostatische afstotingskragte tussen surfaktantkopgroepe verminder word. Deur die surfaktantkonsentrasie te verhoog, kan a_0 ook verlaag word, en so kan vloeibare kristalfases vorm. Indien sferiese miselle nie in stokvormige of skyfvormige miselle omgeskakel word nie, kan dit in 'n blokvormige vloeibare kristalfase omgeskakel word. Stokvormige miselle kan op dieselfde wyse in heksagonale vloeibare kristalfases en skyfvormige miselle in plaatvormige vloeibare kristalfases omgeskakel word (Kosswig, 2000; Sakamoto *et al.*, 2017). Figuur 5 illustreer 'n hipotetiese verandering in aggregaatstruktuur, na gelang die surfaktant-konsentrasie toeneem (figuur aangepas vanaf Sakamoto *et al.*, 2017).

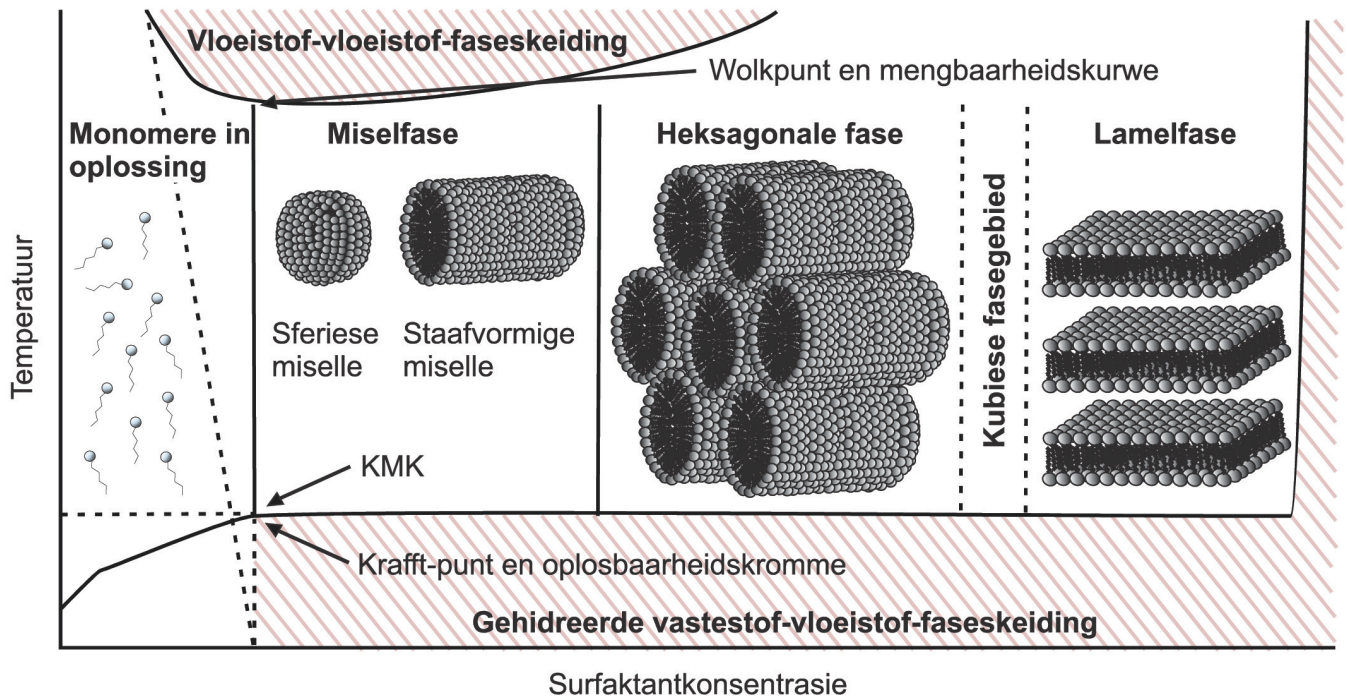
Molyneux *et al.* het meer as 50 jaar gelede 'n model ontwikkel wat handel oor selfaggregasie en die teenstrydige kragte wat surfaktante in water ervaar (Molyneux *et al.*, 1965; Nagarajan, 2002; Tanford, 1980). Die model verskaf 'n kwantitatiewe voorstelling van die verandering in vrye energie, ΔG_{misel} (Vergelyking 21), wat tydens miselvorming in 'n sisteem plaasvind. Die model verduidelik ook hoe die afstotende elektrostatische kragte wat die kopgroepe op mekaar uitoefen, die groei van aggregate termodinamies tot 'n sekere grootte en vorm beperk. Daar is ook bevind dat surfaktante in oplossing met surfaktante in miselle uitruil om 'n ewewig te handhaaf (Nagarajan, 2002).

$$\Delta G_{misel} = 2,303 RT \log \left(\frac{KMK}{\omega} \right) \quad (21)$$

Tabel 1: 'n Vergelyking tussen die kritiese pakkingsparameter en die strukturele eienskappe van surfaktante en aggregate (Myers, 2020; Sakamoto *et al.*, 2017; Tadros *et al.*, 2005)

Stertgroepparameter en die kritiese pakkingsparameter (P)	Struktuur van aggreagaat	Algemene struktuur en voorbeeld van 'n surfaktant
 $< 0,33$	 Sferiese of ellipsoïedale misel	Groot hidrofobiese groep, enkelkettingstertgroep; natriumlourielsulfaat.
 $0,33 - 0,5$	 Stokvormige misel	Kleiner kopgroep of ioniese surfaktante tesame met 'n groot hoeveelheid van elektroliet; natriumlourielsulfaat met hoë soutkonsentrasie.
 $0,5 - 1,0$	 Vesikel ²	Groot kopgroep met dubbelkettingstertgroep wat vrylik beweeg; fosfatidieglicerol.
 $1,0$	 Dubbellaagstrukture, soos vesikels of vloeibare lamelkristalfases (Sakamoto <i>et al.</i> , 2017).	Klein kopgroep met rigiede dubbelkettingstertgroep; fosfatidieserien tesame met kalsiumsout.
 $> 1,0$	 Omgekeerde misel (net in nie-polêre oplosmiddels)	Klein kopgroep, baie groot lywige dubbelkettingstertgroep; onversadigde fosfatidieletanolamien.

2. Die Afrikaanse vertaling van die Engelse woord "vesicle" is blasie, gasblasie, gasholte, ens. Maar aangesien die holte hier met vloeistof/vastestof gevul is, word die woord vesikel gebruik om hierdie tipe struktuur te beskryf.



Figuur 5: Konsentrasie- en temperatuurverwantskap tussen verskillende fases van 'n surfaktant in 'n waterige oplossing (Sakamoto *et al.*, 2017)

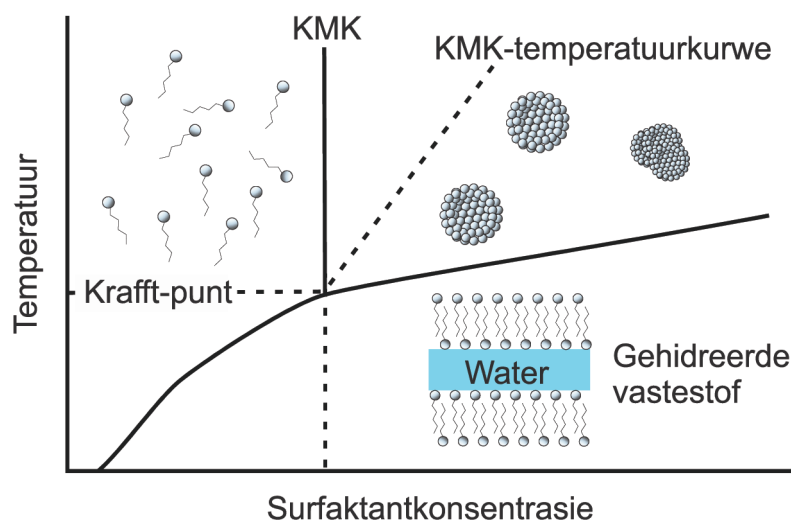
Vergelyking 21 is net geldig indien die KMK onder $10 \text{ mmol}\cdot\text{L}^{-1}$ is en is hoofsaaklik op nie-ioniese surfaktante van toepassing. Die model is al deur verskeie navorsers aangepas om eksperimentele data te beskryf, en sekere modelle het die vermoë om die termodinamiese eienskappe van miselvorming te voorspel (Fiscaro *et al.*, 2008; Israelachvili *et al.*, 1977; Khoshnood *et al.*, 2016; Maibaum *et al.*, 2004; Nagarajan, 1993; Nagarajan, 2002; Nagarajan & Ruckenstein, 1991; Tanford, 1974; Zhu & Free, 2015).

Aangesien die verhouding wat in Vergelyking 17 voorgestel is vir beide aggragasie en miselvorming geldig is, kan die waardes van ΔS_{misel} en ΔH_{misel} deur Vergelyking 22 en Vergelyking 23 onderskeidelik bepaal word:

$$\frac{d\Delta G_{\text{misel}}}{dT} = -\Delta S_{\text{misel}} \quad (22)$$

$$T^2 d\left(\frac{\Delta G_{\text{misel}}}{T}\right) dT = -\Delta H_{\text{misel}} \quad (23)$$

Beide van hierdie vergelykings kan slegs op sisteme toegepas word indien die hoeveelheid monomere in die aggragaat, met ander woorde die aggragasiegetal n , konstant bly. Gewoonlik is dit nie die geval vir nie-ioniese surfaktante nie. Gevolglik val dié waardes normaalweg buite die omvang van wat deur navorsers vermeld word.



Figuur 6: Krafft-punt en die invloed van temperatuur op die waarde van die KMK (Sakamoto *et al.*, 2017)

Krafft- en wolkpunt

'n Surfaktant kan slegs veranderinge in 'n vloeistofsisteem aanbring indien die surfaktant opgelos is. Daarom is dit belangrik om die oplosbaarheidseienskappe van 'n surfaktant as 'n funksie van temperatuur, soutgehalte en pH te verstaan. Die temperatuur, by 'n spesifieke pH en soutgehalte, waarby die oplosbaarheid van ioniese surfaktante aansienlik afneem, staan as die Krafft-punt bekend; terwyl die temperatuur waarbo die oplosbaarheid van nie-ioniese surfaktante aansienlik afneem, as die wolkpunt bekend staan (Sakamoto *et al.*, 2017).

Die Krafft-punt is 'n trippelpunt waar miselle, monomere en onoplosbare, gehidreerde surfaktante in ewewig voorkom (Tadros *et al.*, 2005). Figuur 6 illustreer die effek wat temperatuur en konsentrasie op die oplosbaarheid en KMK van 'n surfaktant het.

Die Krafft-punt van surfaktante word beduidend deur die hidrofobiese en hidrofiliese groepe beïnvloed. In die geval waar 'n lineêre koolstofketting as 'n stertgroep gebruik word, sal die oplosbaarheid in water afneem en die Krafft-punt toeneem weens 'n toename in metileenkoolstofgroepe. Daarteenoor sal polêre, ioniseerbare funksionele groepe, soos amiene of karboksiesure, die oplosbaarheid van die surfaktant verhoog en sodoende ook die Krafft-punt verlaag.

Waar ioniese surfaktante gewoonlik 'n toename in oplosbaarheid ervaar nadat die Krafft-punt oorskry is, tree nie-ioniese surfaktante teenoorgesteld op. Sodra die temperatuur verby 'n sekere punt, bekend as die wolkpunt, verhoog word, is die afname in oplosbaarheid beduidend. In ooreenstemming met die Krafft-punt word die wolkpunt ook deur die balans tussen die hidrofiliese kopgroep en die hidrofobiese stertgroep beïnvloed. Indien die hidrofiliese kopgroep van 'n surfaktant

etergroepe bevat, sal die wateroplosbaarheid van die surfaktant deur waterstofbindings tussen die etersuurstowwe en watermolekules veroorsaak word. In water sal die kopgroep opgevou voorkom (Figuur 7).

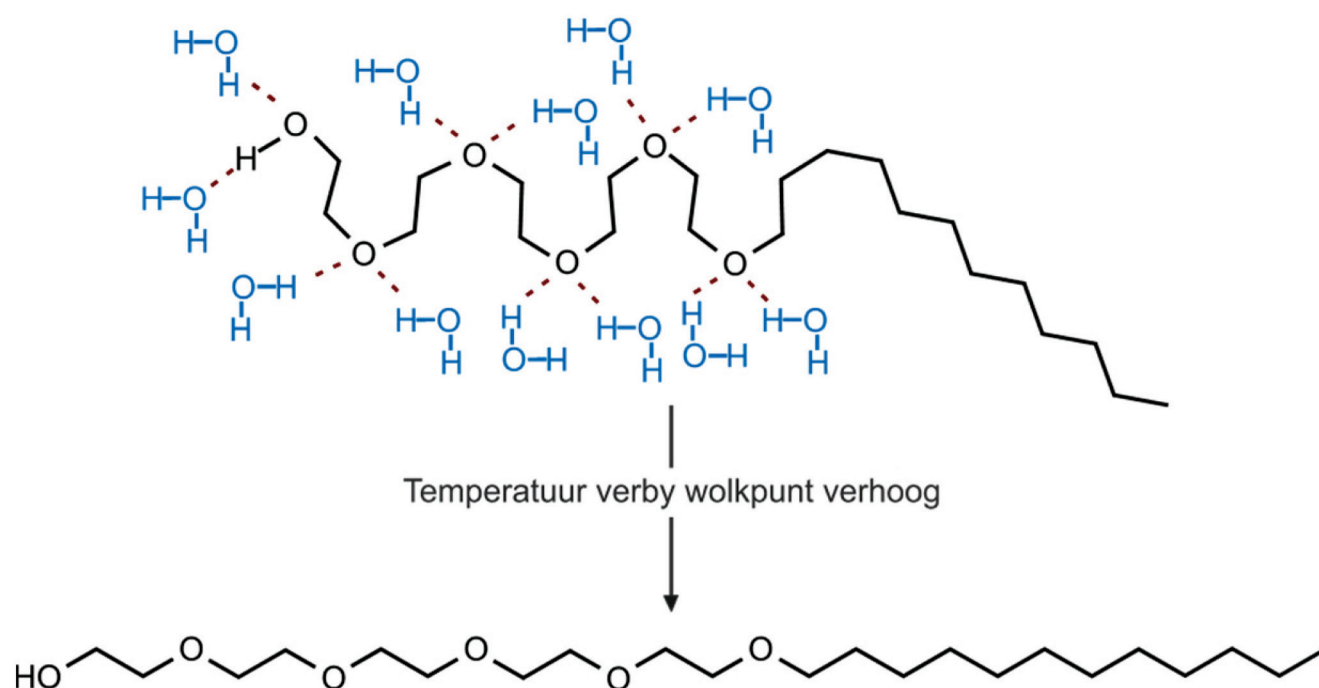
Dus sal minder ongunstige interaksies tussen die eterkoolstowwe en water voorkom en terselfdertyd sal 'n maksimum getal waterstofbindings tussen die etersuurstowwe en watermolekules vorm (Sakamoto *et al.*, 2017). Na gelang die temperatuur toeneem, sal die waterstofbindings tussen die opgevoede kopgroep en die watermolekules breek, en gevolglik sal die kopgroep uitgestrek word. Daarna sal die wolkpunt bereik word, waar die surfaktant hoofsaaklik onoplosbaar in water is (Sakamoto *et al.*, 2017).

Gevolgtrekking

Vanuit 'n industriële oogpunt, is surfaktante van die belangrikste chemiese verbindings. Die vermoë van hierdie verbindings om onmengbare stowwe se mengbaarheid te verhoog en tussenvlakke se eienskappe te verander, het hulle waarde in die moderne samelewing bevestig. Belangrike eienskappe van surfaktante in waterige oplossings is in hierdie oorsigartikel bespreek, met die doel om vir Afrikaanssprekendes 'n geleentheid te bied om hierdie navorsingsveld beter te verstaan. Die inligting wat in hierdie artikel weergegee word, sal die leser ook in staat stel om deurdagte besluite te neem indien hulle surfaktante in formulerings moet gebruik.

Outeursbydrae

Die oorsig is deur EHW en DV nagevors en geskryf. DPO, HCMV en FJS het die oorsig gekonseptualiseer, die manuskrip hersien en geredigeer.



Figuur 7: Temperature bo die wolkpunt verhoog sodat waterstofbindings wat by die hidrofiliese kopgroep voorkom, breek (Sakamoto *et al.*, 2017)

Erkenning

Die outeurs bedank die Suid-Afrikaanse Akademie vir Wetenskap en Kuns (studiebeurs vir EHW), die navorsingsfokusarea vir Chemiese Hulpbronverdeling (CRB) van die Noordwes-Universiteit (NWU), Sasol en die Suid-Afrikaanse Departement van Wetenskap en Innovasie en die Nasionale Navorsingstigting se Sentrum van Uitnemendheid in Katalise (c*change) vir finansiële ondersteuning.

Datums

Ontvang: 17/05/2023
Aanvaar: 26/09/2023
Gepubliseer: 17/11/2023

Verwysings

- Banat, I.M., Makkar, R.S., Cameotra, S.S., 2000, Potential commercial applications of microbial surfactants, *Applied Microbiology and Biotechnology* 53, 495-508. <https://doi.org/10.1007/s002530051648>.
- Clapés, P., Infante, M., 2002, Amino acid-based surfactants: Enzymatic synthesis, properties and potential applications, *Biocatalysis and Biotransformation* 20, 215-233. <https://doi.org/10.1080/10242420290004947>.
- Eastoe, J., Dalton, J., 2000, Dynamic surface tension and adsorption mechanisms of surfactants at the air-water interface, *Advances in colloid and interface science* 85, 103-144. [https://doi.org/10.1016/S0001-8686\(99\)00017-2](https://doi.org/10.1016/S0001-8686(99)00017-2).
- Ferri, J.K., Stebe, K.J., 2000, Which surfactants reduce surface tension faster? A scaling argument for diffusion-controlled adsorption, *Advances in Colloid and Interface Science* 85, 61-97. [https://doi.org/10.1016/S0001-8686\(99\)00027-5](https://doi.org/10.1016/S0001-8686(99)00027-5).
- Fiscaro, E., Compari, C., Duce, E., et al., 2008, Thermodynamics of micelle formation in water, hydrophobic processes and surfactant self-assemblies, *Physical Chemistry Chemical Physics* 10, 3903-3914. <https://doi.org/10.1039/b719630j>.
- Frumkin, A., 1925, Die Kapillarkurve der höheren Fettsäuren und die Zustandsgleichung der Oberflächenschicht, *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 116, 466-484. <https://doi.org/10.1515/zpch-1925-11629>.
- Gibbs JW. 1928. The collected works of JW Gibbs, Longmans, Green.
- Herrmann, K., 1966, Micellar properties of some zwitterionic surfactants, *Journal of Colloid and Interface Science* 22, 352-359. [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(66\)90015-4](https://doi.org/10.1016/0021-9797(66)90015-4).
- Israelachvili, J.N., Mitchell, D.J., Ninham, B.W., 1976, Theory of self-assembly of hydrocarbon amphiphiles into micelles and bilayers, *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics* 72, 1525-1568. <https://doi.org/10.1039/f29767201525>.
- Israelachvili, J.N., Mitchell, D.J., Ninham, B.W., 1977, Theory of self-assembly of lipid bilayers and vesicles, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes* 470, 185-201. [https://doi.org/10.1016/0005-2736\(77\)90099-2](https://doi.org/10.1016/0005-2736(77)90099-2).
- Khoshnood, A., Lukanov, B., Firoozabadi, A., 2016, Temperature effect on micelle formation: Molecular thermodynamic model revisited, *Langmuir* 32, 2175-2183. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b00039>.
- Kosswig, K., 2000, Surfactants, *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. https://doi.org/10.1002/14356007.a25_747.
- Langmuir, I., 1917, The constitution and fundamental properties of solids and liquids. II. Liquids, *Journal of the American Chemical Society* 39, 1848-1906. <https://doi.org/10.1021/ja02254a006>.
- Levey, M., 1954, The early history of detergent substances: A chapter in Babylonian chemistry, *Journal of Chemical Education* 31, 521. <https://doi.org/10.1021/ed031p521>.
- Maibaum, L., Dinner, A.R., Chandler, D., 2004, Micelle formation and the hydrophobic effect, *The Journal of Physical Chemistry B* 108, 6778-6781. <https://doi.org/10.1021/jp037487t>.
- Molyneux, P., Rhodes, C., Swarbrick, J., 1965, Thermodynamics of micellization of N-alkyl betaines, *Transactions of the Faraday Society* 61, 1043-1052. <https://doi.org/10.1039/tf9656101043>.
- Myers, D., 2020, Surfactant science and technology, derde uitg. John Wiley & Sons, New Jersey.
- Nagarajan, R., 1993, Modelling solution entropy in the theory of micellization, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 71, 39-64. [https://doi.org/10.1016/0927-7757\(93\)80027-C](https://doi.org/10.1016/0927-7757(93)80027-C).
- Nagarajan, R., 2002a, Molecular packing parameter and surfactant self-assembly: the neglected role of the surfactant tail, *Langmuir* 18, 31-38. <https://doi.org/10.1021/la010831y>.
- Nagarajan, R., Ruckenstein E. 1991. Theory of surfactant self-assembly: a predictive molecular thermodynamic approach. *Langmuir* 7, 2934-2969. <https://doi.org/10.1021/la00060a012>.
- Porter, M.R., 2013, Handbook of surfactants, eerste uitg. Springer, New York.
- Prosser, A.J., Franses, E.I., 2001, Adsorption and surface tension of ionic surfactants at the air-water interface: review and evaluation of equilibrium models, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 178, 1-40. [https://doi.org/10.1016/S0927-7757\(00\)00706-8](https://doi.org/10.1016/S0927-7757(00)00706-8).
- Quintero, L., 2002, An overview of surfactant applications in drilling fluids for the petroleum industry, *Journal of Dispersion Science and Technology* 23, 393-404. <https://doi.org/10.1080/01932690208984212>.
- Rosen, M.J., Dahanayake, M., 2000, Industrial utilization of surfactants: principles and practice, American Oil Chemists' Society, Illinois.
- Rosen, M.J., Kunjappu, J.T., 2012, Surfactants and interfacial phenomena, vierde uitg. John Wiley & Sons, New York. <https://doi.org/10.1002/9781118228920>.
- Sakamoto, K., Lochhead, R., Maibach, H., et al., 2017, Cosmetic science and technology: theoretical principles and applications, eerste uitg. Elsevier, Amsterdam.
- Szyszkowski, B., 1908, Experimental studies of the capillary properties of aqueous solutions of fatty acids, *Z Phys Chem* 64, 385-414. <https://doi.org/10.1515/zpch-1908-6425>.
- Tadros, T., Sousa, F., Moreira, S., Oliveira, A., 2005, Applied surfactants: principles and applications, eerste uitg. Wiley-VCH, Weinheim. <https://doi.org/10.1002/3527604812>.
- Tanford, C., 1974, Thermodynamics of micelle formation: prediction of micelle size and size distribution, *Proceedings of the National Academy of Sciences* 71, 1811-1815. <https://doi.org/10.1073/pnas.71.5.1811>.
- Tanford, C., 1980, The hydrophobic effect: formation of micelles and biological membranes, tweede uitg. J. Wiley., New York.
- Varadaraj, R., Bock, J., Valint, Jr P., et al., 1991, Fundamental interfacial properties of alkyl-branched sulfate and ethoxy sulfate surfactants derived from Guerbet alcohols, *The Journal of Physical Chemistry* 95, 1671-1676. <https://doi.org/10.1021/j100157a033>.
- Zana, R., 2005, Dynamics of surfactant self-assemblies: micelles, microemulsions, vesicles and lyotropic phases, eerste uitg. CRC press, Florida. <https://doi.org/10.1201/9781420028225>.
- Zhu, Y., Free, M.L., 2015, Evaluation of ion effects on surfactant aggregation from improved molecular thermodynamic modeling, *Industrial & Engineering Chemistry Research* 54, 9052-9056. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5b02103>.

Waarnemings oor die infrarooi reflektansiespektra van Neutronbestraalde 3C-SiC

JAA Engelbrecht, ¹SG Le Roux, ²EG Minnaar, ¹WE Goosen ¹

¹ Sentrum vir HRTEM en Departement Fisika, Nelson Mandela-Universiteit, Suid-Afrika

² Departement Chemie en Polimeerwetenskap, Universiteit Stellenbosch, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Japie Engelbrecht **E-pos:** Japie.Engelbrecht@mandela.ac.za

Onlangse ontledings van neutronbestraalde kubiese silikonkarbid monsters (3C-SiC-monsters) met behulp van Fourier-transform-infrarooispektroskopie (FTIR-infrarooispektroskopie) het gerapporteer oor waargenome veranderinge van die reflektansie sowel as onttrekte diëlektriese parameters van die monsters. Die veranderinge hou vermoedelik verband met die oppervlagrafheid van die monsters. Aangesien daar nie verwag word dat neutronbestraling die oppervlak van bestraalde monsters sal beskadig nie, is hierdie waarnemings herevalueer. Daar word voorgestel dat veranderinge meer waarskynlik toegeskryf kan word aan die korrelgroottes van die polikristallyne 3C-SiC-monsters wat bestraal is.

Sleutelwoorde: 3C-SiC, neutronbestraling, infrarooispektroskopie

Observations on the infrared reflectance spectra of Neutron-irradiated 3C-SiC: Recent analyses of neutron-irradiated cubic silicon carbide (3C-SiC) samples using Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR spectroscopy) reported on observed changes of the reflectance as well as extracted dielectric parameters of the samples. The changes were thought to be associated with sample surface roughness. Since neutron irradiation is not expected to damage the surface of irradiated samples, these observations were reassessed. It is suggested that changes could more likely be ascribed to the grain sizes of the polycrystalline 3C-SiC samples that were irradiated.

Keywords: 3C-SiC, neutron irradiation, infrared spectroscopy

Inleiding

Die gebruik van silikonkarbid (SiC) as 'n inperkingslaag in die drievoudig bedekte isotropiese ("TRISO"-) lae in die nuwe-generasie-kernreaktors is reeds in 1989 deur Wacholz (Wacholz, 1989) voorgestel. Tydens die werking van hierdie kernreaktors word verwag dat die SiC aan hoë fluensies van verskeie kernsplytingspartikels, sowel as aan wisselende temperature onderwerp sal word. Gevolglik is verskeie ondersoeke na die effek van bestraling op SiC reeds gerapporteer, met behulp van verskeie karakteriseringstegnieke om inligting oor enige invloed van die bestraling op materiaaleienskappe te verkry (Snead et al., 1998a, 1998b, 1999; Dkaki et al., 2001; Ryazanov et al., 2002; Katoh et al., 2006; Newsome et al., 2007; Kondo et al., 2008a, 2008b; Katoh et al., 2008, 2011; Brink et al., 2009; Talwar et al., 2012; Dong et al., 2012; Malherbe, 2013; O'Connell & Neethling, 2014; Lillo & Van Rooyen, 2016).

Vorige ondersoeke het gerapporteer oor 3C-SiC-skywe wat bestraal is by (i) wisselende bestralingstemperature maar min of meer konstante neutronbestralingsfluensies (Engelbrecht et al., 2014) en (ii) by konstante bestralingstemperatuur maar wisselende neutronbestralingsfluensies (Engelbrecht et al., 2015). Fourier-transform-infrarooispektroskopie (FTIR-spektroskopie) en atoomkragmikroskopie (AKM) is gebruik om die bestraalde monsters te karakteriseer. Veranderinge in die infrarooi reflektansie sowel as in die onttrekte diëlektriese parameters van die monsters waargeneem. Die veranderinge is toegeskryf

aan die oppervlagrafheid van die monsters. Laasgenoemde voorstel het egter verdere ondersoek vereis, aangesien skade aan die oppervlak van monsters wat aan neutronbestraling onderwerp is, nie verwag word nie (O'Connell en Neethling, 2014).

Hierdie artikel rapporteer oor die herevaluering van dieselfde voorheen ontlede neutronbestraalde 3C-SiC-monsters.

Eksperiment

Twee stelle SiC-monsters in die vorm van skywe is ontleed by:

- 'n Konstante neutronbestralingstemperatuur van 800 °C, terwyl die neutronfluensies tussen 5×10^{19} en $7,7 \times 10^{21}$ n/cm² varieer is; en
- Bestralingstemperature van 200 °C, 300 °C en 400 °C, en by neutronfluensies wat van 5×10^{19} tot $4,8 \times 10^{20}$ n/cm² gewissel het.

Bestraling van monsters is by die Oak Ridge National Laboratory (ORNL), VSA, gedoen. Inligting wat verband hou met monsters wat in hierdie verslag ontleed is, word in Tabel I en II vervat.

'n Bruker 80V FTIR/Raman-spektrometer, toegerus met 'n Pike 10 Spec-spekulêre weerkaatsingseenheid wat nabynormale invalshoeke moontlik gemaak het, is gebruik om infrarooi-reflektansiespektrums van monsters te verkry, en 50 skanderings teen 'n resolusie van 8 cm⁻¹ is geneem. Oppervlagrafheid van

die monsters is gemeet met behulp van 'n Nano-indenteerder van CSM Instruments, wat met 'n atoomkragmikroskoop toegerus was. Monsteroppervlaktes van $25 \times 25 \mu\text{m}^2$ groot is deur atoomkragmikroskopie (AKM) ontleed. Monsters is daarna met diamantsuspensie gepoleer, gevolg deur agtereenvolgens minder growwe diamantpasta en laastens met 50 nm-kolloïdale silika. Die IR-reflektansie van alle monsters is daarna weer gemeet. Gepoleerde monsters is vervolgens geïnspekteer met behulp van 'n JEOL JSM 7001F-skandeerelektronmikroskoop (SEM), terwyl die grootte van korrels in die monsters bepaal is deur elektron-terugverstrooiingsdiffraksie ("ESBD") met behulp van Aztecsagteware. Die gemiddelde korrelgroottes is bepaal uit drie SEM-mikrograwe wat vir elke monster verkry is.

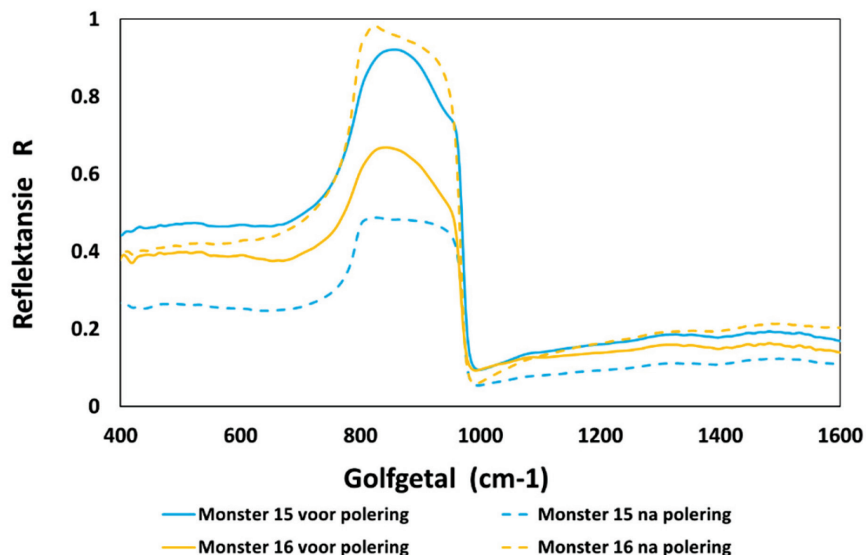
Resultate en bespreking

Konstante temperatuur, wisselende neutronfluensie

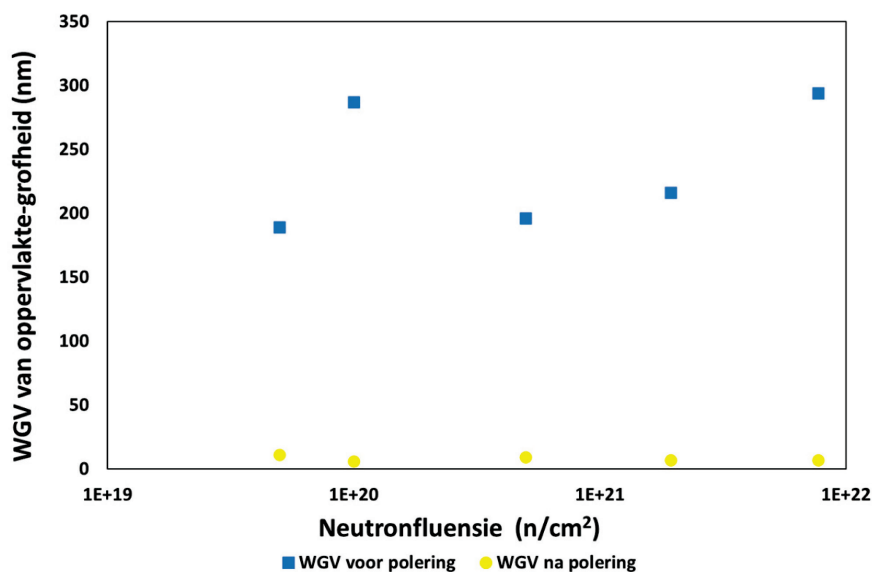
Figuur 1 beeld die verandering uit in die infrarooi reflektansie van twee monsters voor en ná polering. In een geval (nr 15)

word 'n afname in reflektansie waargeneem, terwyl in 'n ander geval (nr 16) die reflektansie ná polering toegeneem het. Hierdie waarnemings, veral dié vir monster 15, is alreeds 'n aanduiding dat die vorige vertolking van die rede vir veranderinge in reflektansie (Engelbrecht et al., 2014; Engelbrecht et al., 2015) dalk nie korrek is nie. Kroon het aangetoon dat oppervlaktgrofheid 'n beduidende effek op reflektansie het, en dat die reflektansie ook kan toeneem met oppervlaktgrofheid, na gelang van die gepaardgaande verandering in die diëlektriese konstante ϵ van die halfgeleidende materiaal (Kroon, 2007). Dit blyk duidelik in Figuur 1 vir monster 15.

Die wortel gemiddelde vierkant van die monsteroppervlaktgrofheid (WGV-grofheid), soos gemeet deur AKM, word in Figuur 2 weergegee vir alle monsters wat by 800°C bestraal is. Dit is duidelik dat die oppervlaktgrofheid van alle monsters ná polering ongeveer gelyk is, aangesien die WGV-grofheid van die μm - tot die nm-bestek afgeneem het. Waardes is in Tabel I vervat.



Figuur 1: Infrarooi reflektansiespektra van twee monsters bestraal by 800°C , voor en ná polering



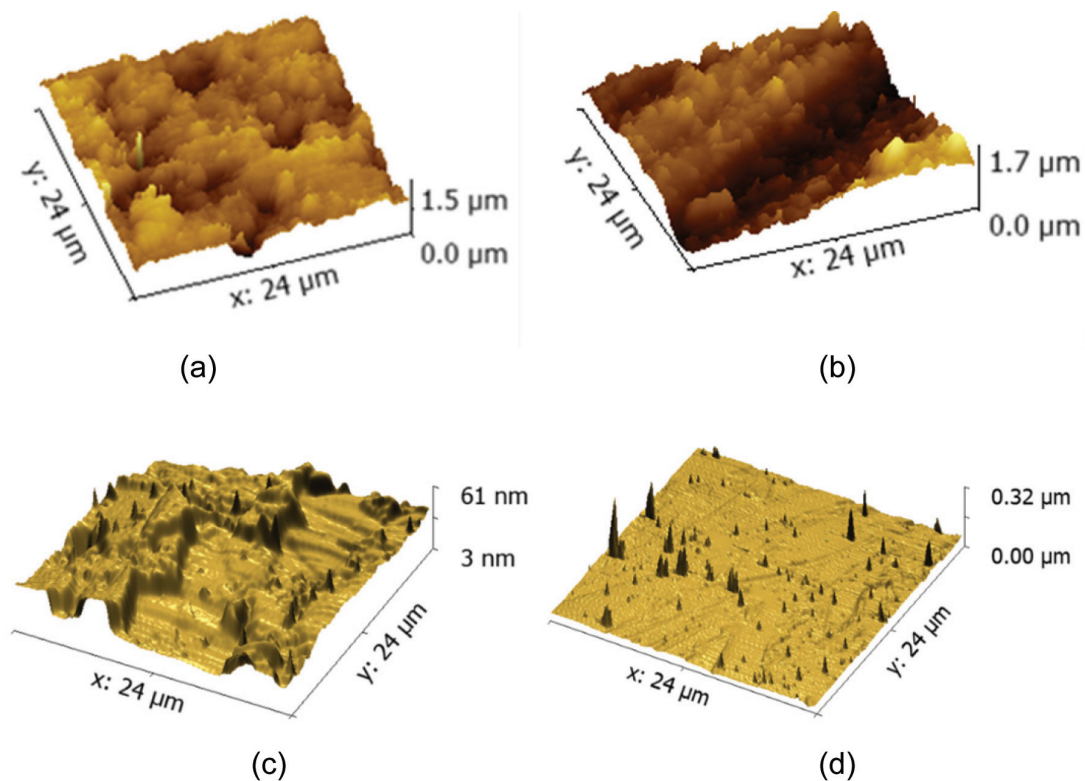
Figuur 2: WGV van oppervlaktgrofheid van alle monsters bestraal by 800°C , voor en ná polering

Tabel I: Monsterkenmerke voor en ná polering van monsters wat by konstante temperatuur maar teen wisselende neutronbestralingsfluensies bestraal is

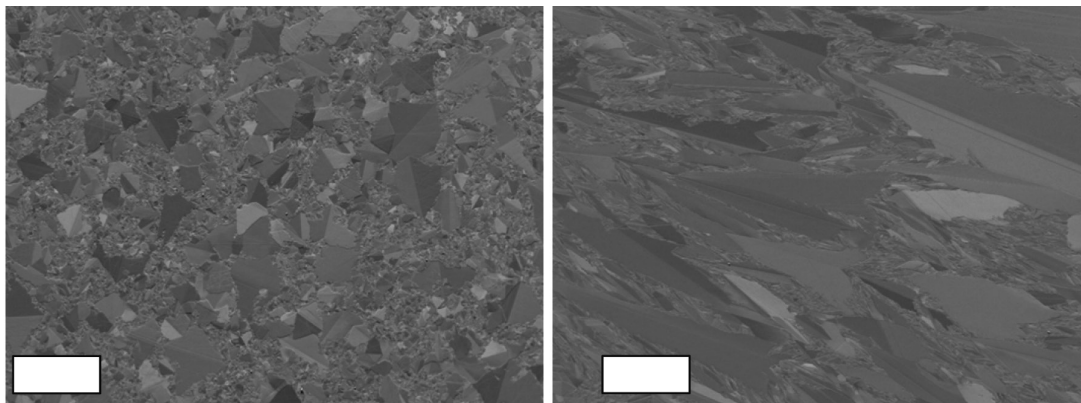
Monsternommer	Bestralingstemperatuur (°C)	Fluensie (n/cm ²)	Gemiddelde WGV-oppervlak-grofheid voor polering (nm)	Gemiddelde WGV-oppervlak-grofheid ná polering (nm)	Gemiddelde korrel-grootte ná polering (µm)	Rmaks
15	800	$5,0 \times 10^{19}$	189	11,1	$8,6 \pm 0,1$	0,97
16	800	$1,0 \times 10^{20}$	287	5,8	$3,8 \pm 0,1$	0,77
18	800	$5,0 \times 10^{20}$	196	9,2	$3,7 \pm 0,1$	0,50
20	800	$1,9 \times 10^{21}$	216	6,7	$8,8 \pm 0,1$	0,75
19	800	$7,7 \times 10^{21}$	294	6,6	$3,7 \pm 0,2$	0,67

Die gemiddelde WGV-oppervlakgrofheid is gemeet deur gebruik te maak van AKM, en resultate vir monsters 15 en 16 (uit Figuur 1) word in Figuur 3 weergegee. Die gemiddelde korrel-

groottes wat vir monsters 15 en 16 waargeneem is, word in Figuur 4 weergegee. Waardes wat vir gemiddelde korrelgrootte en gemiddelde oppervlakgrofheid verkry is, is in Tabel II vervat.



Figuur 3: AKM-metings van die gemiddelde WGV van oppervlakgrofheid van monster 15 (a) en monster 16 (b) voor polering, en monster 15 (c) en monster 16 (d) ná polering.



Figuur 4: SEM-mikrograwe van die korrels in (a) monster 15 en (b) monster 16 (na polering) (die wit staaf verteenwoordig 100 mikron)

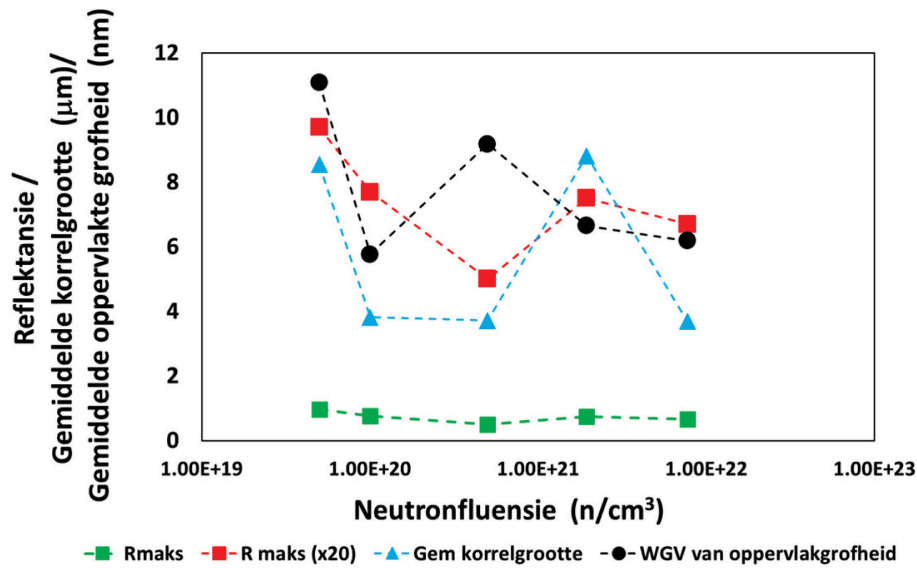
Deur die maksimum infrarooi reflektansie R , gemiddelde WGV-oppervlaktgrootte en gemiddelde korrelgrootte vir al die monsters in hierdie stel (Figuur 4) te vergelyk, is dit duidelik dat (i) daar geen verband tussen die reflektansie en die oppervlaktgrootte is nadat die monsters gepoleer is nie, en (ii) daar 'n definitiewe verband tussen die reflektansie en die gemiddelde korrelgrootte is. (Foute in reflektansie is $\pm 10\%$).

Bogenoemde waarneming is vervolgens geverifieer deur die ondersoek te herhaal vir monsters wat by min of meer dieselfde neutronfluensies bestraal is, maar teen wisselende temperature.

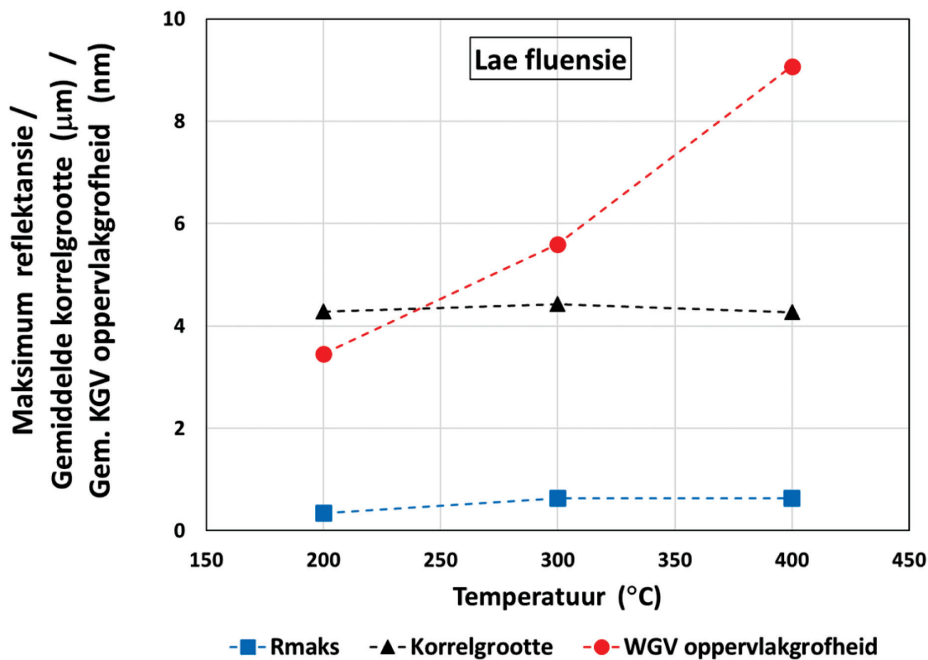
Dieselfde neutronfluensie, verskillende bestralingstemperature

Deur die ontledings soos in 3.1 te herhaal, is die resultate vir die gemiddelde oppervlaktgrootte voor en ná polering, en gemiddelde korrelgrootte ná polering verkry soos in Tabel II weergegee word.

Die maksimum infrarooi reflektansie vir elk van die monsters, tesame met die gemiddelde oppervlaktgrootte en gemiddelde korrelgrootte, word in Figuur 5 (lae fluensiebestek) en Figuur 6 (hoë fluensiebestek) weergegee – sien Tabel I vir neutronfluensies.



Figuur 5: Maksimum reflektansie, WGV oppervlaktgrootte en gemiddelde korrelgrootte vir alle monsters wat by 800 °C bestraal is (let daarop dat die stippellyne slegs 'n riglyn vir die oog is)



Figuur 6: Reflektansie, gemiddelde WGV-oppervlaktgrootte en gemiddelde korrelgrootte vir lae neutronfluensie monsters bestraal by temperature soos aangedui op die x-aks (stippellyne is slegs 'n riglyn vir die oog)

Tabel II: Eienskappe van neutronbestraalde monsters by wisselende temperature soos aangedui

Monster-nommer	Bestralings-temperatuur (°C)	Fluensie (n/cm ²)	Gemiddelde WGV-oppervlak-groftheid voor polering (nm)	Gemiddelde WGV-oppervlak-groftheid ná polering (nm)	Gemiddelde korrel-grootte ná polering (µm)	Rmaks Voor polering	Rmaks Na polering
2	200	$5,6 \times 10^{19}$	110	3,5	$4,3 \pm 0,03$	0,97	0,34
3	200	$9,7 \times 10^{19}$	260	4,7	$3,2 \pm 0,03$	0,41	0,37
4	300	$6,0 \times 10^{20}$	100	5,6	$4,4 \pm 0,03$	0,75	0,63
5	300	$1,4 \times 10^{21}$	190	4,2	$2,2 \pm 0,03$	0,55	0,48
9	400	$7,7 \times 10^{21}$	160	9,1	$4,3 \pm 0,03$	0,72	0,63
10	400	$4,8 \times 10^{20}$	169	5,3	$5,7 \pm 0,08$	0,63	0,33

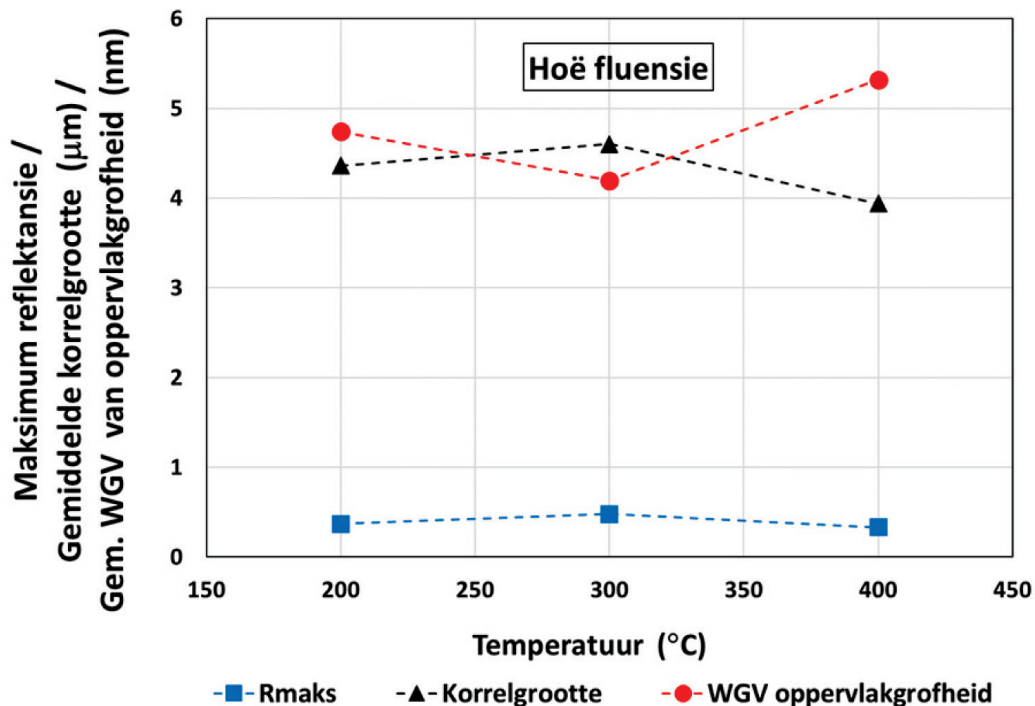
Dit is duidelik uit die tendense wat waargeneem is vir die variasie in reflektansie as funksie van gemiddelde oppervlakgroftheid en gemiddelde korrelgrootte dat hierdie variasies te wyte is aan die korrelgrootte, en nie die oppervlakgroftheid soos voorheen gerapporteer is nie (Engelbrecht et al., 2014; Engelbrecht et al. al., 2015). Dit is waarskynlik dat die tendense wat vroeër gerapporteer is, deels te wyte was aan die oppervlakskaal wat veroorsaak is toe die 3C-SiC stawe voor bestraling gesny is. Daar kon egter ook 'n bydrae van die korrelgroottes tydens IR-metings gewees het. Die penetrasiediepte van infrarooi straling in silikonkarbid word soos volg aangegee (Amirtharaj, PM & Seiler, DM, 1995):

$$d = \lambda / (2 \pi k) \quad (1)$$

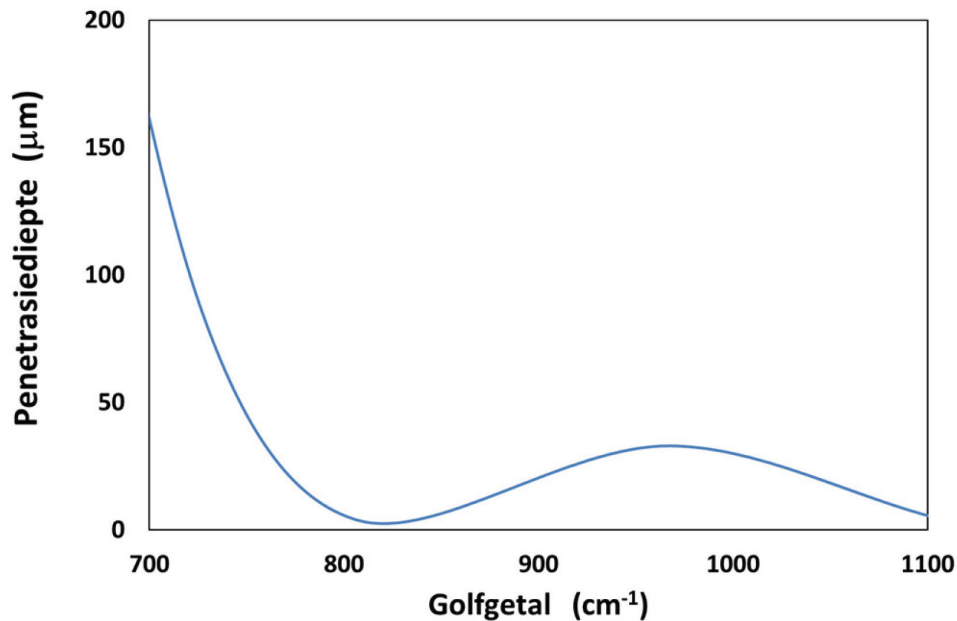
waar λ die golflengte en k die uitdowingskoëffisiënt van 3C-SiC is, met $k = k(\lambda)$ (Adachi, S., 2012).

Dit is duidelik uit Figuur 8, soos bereken en uitgestippel vanaf vergelyking (1), dat die penetrasiediepte vir sommige golflengtes in die Reststrahlen-gebied waar die maksimum reflektansie R gemeet is, $> 30 \mu\text{m}$ is. Hierdie waardes is groter as die oppervlakgroftheid wat gemeet is, en dit is dus waarskynlik dat daar 'n bydrae van die korrels in die 3C-SiC-monsters sou gewees het toe die reflektansie gemeet is.

Ten slotte moet daarop gelet word dat beide oppervlakgroftheid en korrelgrootte 'n rol kan speel in die reflektansie van die monsters. Aangesien daar egter gerapporteer is dat neutronbestraling nie die oppervlakgroftheid van bestraalde 3C-SiC-monsters beïnvloed nie, is dit heel waarskynlik dat die veranderinge in reflektansie wat in die huidige studie waargeneem is, te wyte is aan die korrelgrootte van die onderskeie monsters. Hierdie bevinding weerspreek dus die gevolgtrekking van die vroeëre publikasies rakende die oppervlakgroftheid van die monsters.



Figuur 7: Reflektansie, gemiddelde WGV-oppervlakgroftheid en gemiddelde korrelgrootte vir hoëneutronfluensie monsters bestraal by temperature soos aangedui op die x-as (stippellyn is slegs 'n riglyn vir die oog)



Figuur 8: Penetratediepte van infrarooi straling in die Reststrahlen-streek van 3C-SiC

Erkennings

Die skrywers bedank mnr Nkululeko Mfuma vir tegniese ondersteuning en is dankbaar vir finansiële ondersteuning van die Nasionale Navorsingstigting (NRF), Suid-Afrika (befondsingskode UID70724). Enige mening, bevindinge en gevolgtrekkings of aanbevelings wat in hierdie artikel uitgespreek word, is dié van die outeurs, en daarom aanvaar die NNS nie aanspreeklikheid ten opsigte daarvan nie.

Datums

Indiening: 02/06/2023
Aanvaarding: 20/10/2023
Publisering: 06/12/2023

Verwysings

- Adachi, S., 2012, Tabel 3.3 Optiese konstantes van 3C-SiC by 300 K, *Handbook of Optical Constants of Semiconductors*, World Scientific Publishing Co Pty Ltd, Singapore, p78.
- Amirtharaj, P.M., Seiler, D.G., 1995, Optiese eienskappe van halfgeleiers, *Handbook of Optics Vol. 2: Toestelle, Metings en Eienskappe (2de Uitgawe)*, M. Bass (Hoofredakteur), McGraw-Hill Inc, NY, Hoofstuk. 36.
- Brink, D.J., Malherbe, J.B., Camassel, J., 2009, Neutronbestralingseffekte in SiC, *Kerninstrumente en -metodes in Fisika Navorsing Afdeling B: Straalinteraksies met materiale en atome* 267, 2716-2718. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2009.05.029>.
- Dkaki, M., Calcagno, L., Makthari, AM, et al., Infrarooispektroskopie en transmissie-elektronmikroskopie van polikristallyne silikonkarbid, *Materiaalwetenskap in Halfgeleierverwerking* 4, 201-204. [https://doi.org/10.1016/S1369-8001\(00\)00113-X](https://doi.org/10.1016/S1369-8001(00)00113-X).
- Dong, L., Sun, G., Zheng, L., et al., Infrarooi reflektansie studie van 3C-SiC epilae gegroei op silikon substrate, *Journal of Physics D: Applied Physics* 45, 245102 (7 bladsye). <https://doi.org/10.1088/0022-3727/45/24/245102>.
- Engelbrecht, J.A.A., Deyzel, G., Minnaar, E.G., et al., 2014, Die invloed van neutronbestraling by lae temperature op die diëlektriese parameters van 3C-SiC, *Physica B: Condensed Matter*, 439, 169-172. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2013.10.059>.
- Engelbrecht, J.A.A., Deyzel, G., Minnaar, E.G., et al., 2015, Assessering van neutronbestraalde 3C-SiC ingeplant by 800 °C, *Journal of Applied Optics* 36, 937-941. <https://doi.org/10.5768/JAO201536.0604001>.
- Katoh, K., Hashimoto, N., Kondo, S., et al., 2006, Mikrostrukturele ontwikkeling in kubieke silikonkarbid tydens bestraling by verhoogde temperature, *Journal of Nuclear Materials* 351, 228-240. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2006.02.007>.
- Katoh, Y., Kondo, S., Snead, L.L., 2008, Mikrostrukture van beta-silikonkarbid na bestraling kruip vervorming by verhoogde temperature, *Journal of Nuclear Materials* 382, 170-175. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2008.08.012>.
- Katoh, Y., Nozawa, T., Snead, L.L., et al., 2011, Stabiliteit van SiC en sy samestellings by hoë neutronfluensie, *Journal of Nuclear Materials* 417, 400-405. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.12.088>.
- Kondo, S., Katoh, Y., Snead, L.L., 2008, Mikrostrukturele defekte in SiC neutron wat by baie hoë temperature bestraal word, *Journal of Nuclear Materials* 382, 160-169. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2008.08.013>.
- Kondo, S., Katoh, Y., Snead, L.L., 2008, Eenrigtingvorming van tetraëdriese leemtes in bestraalde silikonkarbid, *Applied Physics Letters* 93, 163110-1 - 163110-3. <https://doi.org/10.1063/1.3005650>.
- Kroon, R.E., 2007, Die klassieke ossillatormodel en diëlektriese konstantes wat uit infrarooirefleksiesmetings onttrek word. *Infrarooi Fisika en Tegnologie* 51, 31-43. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2007.02.002>.
- Lillo, T.M., Van Rooyen, I.J., 2016, Invloed van SiC- korrelgrenskarakter op splitsingsprodukvervoer in bestraalde TRISO-brandstof, *Journal of Nuclear Materials* 473, 83-92. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.01.040>.
- Malherbe, J.B., 2013, Diffusie van splitsingsprodukte en stralingskade in SiC, *Tydskrif vir Fisika D: Toegepaste Fisika* 46, 473001 (27 bladsye). <https://doi.org/10.1088/0022-3727/46/47/473001>.
- Newsome, G., Snead, L.L., Hinoki, T., et al., 2007, Evaluering van neutronbestraalde silikonkarbid en silikonkarbid-samestellings, *Journal of Nuclear Materials* 371, 76-89. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2007.05.007>.
- O'Connell, J.H., Neethling, J.H., 2014, Ag vervoer in hoë temperatuur neutron bestraalde 3C-SiC, *Journal of Nuclear Materials* 445, 20-25. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.10.050>.
- Ryazanov, A.I., Klaptsov, A.V., Kohyama, A., et al., 2002, Stralingsswelling van SiC onder neutronbestraling, *Journal of Nuclear Materials* 307- 311, 1107-1111. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)01114-5](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)01114-5).
- Snead, L.L., Zinkle, S.J., Hay, J.C., et al., 1998, Amorfisering van SiC onder ion- en neutronbestraling, *Kerninstrumente en -metodes in fisika-navorsing Afdeling B: Interaksies met materiale en atome* 141, 123-132. [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(98\)00085-8](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(98)00085-8).
- Snead, L.C., Osborne, M.C., Lowden, R.A., et al., 1998, Lae dosis bestraling prestasie van SiC interfasie SiC / SiC komposiete, *Journal of Nuclear Materials* 253, 20-30. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(97\)00321-8](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(97)00321-8).
- Snead, L.L., Hay, J.C., 1999, Neutronbestraling geïnduseerde amorfisering van silikonkarbid, *Journal of Nuclear Materials* 273, 213-220. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(99\)00023-9](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(99)00023-9).
- Talwar, D.N., Feng, Z.C., Liu, C.W., et al., 2012, Invloed van oppervlaktgroeid en grensvlaklaag op die infrarooi spektra van V-CVD-gegroei 3C-SiC/Si(100) epilae, *Halfgeleierwetenskap en -tegnologie* 27, 115019 (13 bladsye). <https://doi.org/10.1088/0268-1242/27/11/115019>.
- Wacholz, W., 1989, Die huidige stand van die HTR-konsep gebaseer op ervaring opgedoen van AVR en THTR, *International Working Group on Gas-Cooled Reactors, IWGGCR--* 19, 61-70.

Groot brande in die Wes-Kaap

D Boshoff, H Chikoore

Geo- en Ruimtelike Wetenskappe, Noordwes-Universiteit, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Danie Boshoff **E-pos:** danie.boshoff@nwu.ac.za

Big fires in the Western Cape: Fire events occur frequently in the Western Cape. Data for officially recorded fire events were accessed and extracted from the South African National Biodiversity Institute (SANBI) Biodiversity GIS portal. Python libraries were used to process and analyse data to examine the frequency and seasonality of fire events. An irregular frequency of fire events has been recorded over time, with the majority of fires occurring in the austral summer and autumn.

Veldbrande kom gereeld in die Wes-Kaap voor. Terwyl die verskillende ekosisteme afhanklik is van brande vir die herlewing van plante, voedingstofsiklusse en die verwydering van dooie organiese materiaal, kan groot brande habitatte beskadig, biodiversiteit verminder en menselewe bedreig. Om die negatiewe impak van groot brande te versag, word 'n begrip van die frekwensie en terugkeerinterval van brande vereis. In 2015 is daar geprojekteer dat die westelike dele van suidelike Afrika 'n toename in hittegolffrekwensie en hoë-brandgevaar in die verre toekoms vanaf 2071 tot 2100 gaan ervaar. Daarbenewens kan 'n verskuiwing in die reënvalseisoen voorkom, wat tot 'n verlengde droë seisoen kan lei en sodoende brandrisiko kan verhoog. Om brande te bestudeer vereis kennis van brandregimes. Die konsep van 'n brandregime het in 'n algemene en gestruktureerde beskrywing van die rol van brande in ekosisteme ontwikkel, wat meestal die parameterisering van brandvoorkoms in 'n gedefinieerde ruimte-tydvenster behels. Talle faktore kan die brandregime van 'n gebied beïnvloed. Hierdie faktore kan gekoppel word aan veranderlikes soos seisoenaliteit, brandintensiteit, brandfrekwensie, plantegroei-eienskappe, topografie, sinoptiese weerpatrone, klimaatsverandering, grondvogbeskikbaarheid en grondgebruik, en grondbedekkingsverandering. Menslike aktiwiteite het die brandregimes van baie ekosisteme verander, wat tot die voorkoms van ernstige brandgebeure in talle lande oor die afgelope dekade bygedra het. As gevolg van die geprojekteerde klimaatsveranderinge en grondgebruik- en grondbedekkingsverandering vir die westelike dele van suidelike Afrika, is dit van kardinale belang om die brandregime-eienskappe vir biome in die streek vas te stel. Data vir amptelik aangetekende brandgebeure is verkry en onttrek vanaf die Suid-Afrikaanse Nasionale Biodiversiteitsinstituut (SANBI) se Biodiversiteit GIS-portaal. Die spesifieke datastel wat vanaf hierdie portaal gebruik is, was die argiefdata oor brande wat deur CapeNature geberg word. Python-biblioteke is gebruik om data te verwerk en te ontleed om die frekwensie en seisoenaliteit van brande te ondersoek. 'n Onreëlmatige frekwensie van brande is oor tyd aangeteken, met die meeste brande wat gedurende die somer en herfs in die Suidelike Halfrond plaasgevind het.

Nota: 'n Seleksie van referaatsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Waterstofbindings tussen adenien en timien: Insig vanuit die perspektief van molekulewye en elektrondigtheid-gebaseerde chemiese binding (MOWED-CB)

L Cajada, J de Lange, I Cukrowski

Departement Chemie, Universiteit van Pretoria, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Lauren Cajada **E-pos:** u19088419@tuks.co.za

Hydrogen bonding between adenine and thymine: Insight from the perspective of molecular-wide and electron density based chemical bonding (MOWED-CB): An investigation into the nature of the bonding interaction between adenine and thymine was conducted using novel computational tools. The interaction was discovered to be highly stabilising through the quantum effect, proving that the bonding interaction is facilitated by sharing electron density and not by electrostatic interactions.

Daar word algemeen aanvaar dat DNS-stringe deur waterstofbindings tussen die stikstofbassis van DNS-nukleotiede bymekaargehou word. In hierdie navorsing word die model wat deur Watson en Crick in 1953 opgestel is, herbesoek deur van nuwe berekeningschemie-tegnieke gebruik te maak. FALDI (De Lange & Cukrowski, 2017) en REP-FAMSEC (Cukrowski, et al., 2019) is berekeningsprogrammatuur wat deur die berekeningschemie-navorsingspan van die Universiteit van Pretoria ontwikkel is. FALDI kwantifiseer gedelokaliseerde elektrone tot atoomvlak en illustreer die verspreiding van elektrondigtheid oor 'n molekule. REP-FAMSEC verskaf 'n diepgaande ontleding van die effek wat bindingsinteraksies op die energie van 'n molekule het. Integrasie van FALDI en REP-FAMSEC bied insig vanuit die perspektief van molekulewye en elektrondigtheid-gebaseerde chemiese binding (MOWED-CB) om sodoende chemiese bindingsinteraksies op 'n molekulewye vlak te verstaan (Cukrowski, 2022).

Hierdie navorsing dek die vier hoof konformasies van die adenien-timien-bindingspaar op die B3LYP/6-311++G(d,p) vlak van teorie, met fokus op die Watson-Crick-konformasie in die verduideliking van die data aangesien dieselfde tendens vir al vier konformasies geld.

Die interaksie tussen adenien en timien bring 'n gemiddelde stabilisasie van -71 kcal/mol vir al vier konformasies mee. Die kwantumeffek maak by verre die grootste bydrae tot die stabilisasie. Die bydrae van die uitruikrelasie-energie tot die stabilisasie is gemiddeld -52 kcal/mol, wat 73% van die totale stabilisering verteenwoordig. Die coulomb-elektrostatiese-effek dra die oorblywende 27% (gemiddeld -19.3 kcal/mol) by. Die oorheersing van die kwantumeffek eerder as die coulomb-elektrostatiese-effek weerspreek die huidige waterstofbindingsmodel. Die interaksie tussen adenien en timien, wat as 'n bindingsinteraksie beskou word, word dus hoofsaaklik deur die deling van elektrondigtheid gefasiliteer. Die REP-FAMSEC-data het die verdere onverwagte resultaat gelever dat die atoominteraksies, wat die grootste bydrae van rondom -300 kcal/mol elk tot die stabilisasie van die adenien-timien-bindingspaar gemaak het, slegs tussen stikstof- en suurstofatome plaasvind. Die bydrae tot stabilisering van die interaksies tussen atome wat in die twee klassieke waterstofbindingsinteraksies tussen adenien en timien betrokke is, is aansienlik minder met slegs 'n -90.3 kcal/mol en -61.5 kcal/mol stabilisering vir die Watson-Crick-konformasie.

Die deel van elektrondigtheid wat die hoofbydrae tot die stabiliseringsenergie van die bindingspaar maak, is deur FALDI as gedelokaliseerde elektrone gekwantifiseer. 'n Totaal van 3.11 elektrone is tussen adenien en timien gedelokaliseer, gelykstaande aan 'n 1.5 kovalente binding in klassieke terme.

Die onlangs uitgebreide waterstofbindingsinteraksie soos deur IUPAC gedefinieer (X-H...Y-Z) toon 'n totaal van 2.11 gedelokaliseerde elektrone tussen adenien en timien. Dit maak 68% van die 3.11 totale gedelokaliseerde elektrone tussen die Watson-Crick-bindingspaar op, terwyl die oorblywende elektron gedelokaliseer is oor die res van die bindingspaar-molekules, waarvan 0.68 elektrone deur langafstand-interaksies gedeel word. Dit is dus duidelik dat die deel van elektrondigtheid nie 'n geïsoleerde gebeurtenis is nie en nie beperk is tot die drie of selfs vier atome wat klassiek as die atome betrokke in waterstofbindings beskou word nie.

Elektrondigtheid word dus molekulewyd gedeel en die kwantumeffek is bewys as die primêre stabiliserende faktor in die bindingsinteraksie tussen adenien en timien.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Bronnelys

- Cukrowski, I., 2022, A unified molecular-wide and electron density based concept of chemical bonding, *WIREs Computational Molecular Science* 12(3), e1579. <https://doi.org/10.1002/wcms.1579>.
- Cukrowski, I., Dhimba, G., Riley, D.L., 2019, Reaction energy profile and fragment attributed molecular system energy change (FAMSEC)-based protocol designed to uncover reaction mechanism: A case study of the proline catalysed aldol reaction, *Physical Chemistry Chemical Physica* 21(30), 16694-16705. <https://doi.org/10.1039/C9CP03046H>.
- De Lange, J., Cukrowski, I., 2017, Towards deformation densities for intramolecular interactions without radical reference states using the fragment, atom, localized, delocalized and interatomic (FALDI) charge density decomposition scheme, *Journal of Computational Chemistry* 38(13), 981-997. <https://doi.org/10.1002/jcc.24772>.

Die ruimtelike denkvermoë van voorgraadse Geografie-studente by geselekteerde Suid-Afrikaanse universiteite

S Carow, R Pretorius

Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika, Suid-Afrika
Korresponderende outeur: Sanet Carow **E-pos:** sanetpc@unisa.ac.za

The spatial thinking abilities of undergraduate Geography students at selected South African universities: Spatial thinking is an essential skill for all scientists and enables a person to use space in reasoning and problem-solving. The aim of this research was to determine the spatial thinking abilities of undergraduate Geography students at selected universities. It makes an important contribution to Geography by identifying and addressing gaps in students' spatial thinking skills.

Ruimtelike denke is 'n baie belangrike denkwyse vir alle wetenskaplikes. Ruimtelike denke stel 'n persoon in staat om ruimtelike verhoudings tussen verskillende verskynsels te verstaan en te interpreteer, die gehalte van ruimtelike data te evalueer, ruimte in redenasies te gebruik, probleme op te los en gevolgtrekkings te maak deur ruimtelike inligting te gebruik. As gevolg van die ruimtelike aspek van die denkproses, vind dit 'n natuurlike toepassing in Geografie. Verskeie faktore kan die ontwikkeling van 'n persoon se ruimtelike denkvermoë beïnvloed, soos byvoorbeeld hoe vinnig en maklik 'n persoon iets nuuts aanleer en ook die studievoorroere van 'n persoon. Die implikasie hiervan is dat alhoewel 'n persoon op enige ouderdom ruimtelike denke kan aanleer, verskillende persone se denkprosesse verskillend ontwikkel.

Ten einde persone se denkvermoëns te bepaal, het Lee en Bednarz (2009) 'n bekwaamheidstoets vir ruimtelike denke ontwikkel. Die toets integreer kennis van Geografie met 'n persoon se vaardigheid om ruimtelik te kan dink. Die toets bestaan uit 16 vrae wat opgedeel word in agt kategorieë oor ruimtelike denke. Die uitslag van die toets kan gemeet word teenoor die agt kategorieë om tekortkomings in die ruimtelike denkvermoë van 'n persoon te bepaal.

Die doel van hierdie navorsing is om die ruimtelike denkvermoë van Geografie-studente by geselekteerde Suid-Afrikaanse universiteite te bepaal en om aanbevelings oor leerprosesse daaruit te formuleer. Geografie-departemente wat moontlik ruimtelike denke in hulle leerplanne insluit, is uitgenooi om aan die navorsing deel te neem. Een Geografie-module per studiejaar wat die beste aantoon dat ruimtelike denke in die studiemateriaal ingesluit behoort te word, is per departement geïdentifiseer. Die dosente van hierdie modules is gevra om 'n internetskakel wat die ruimtelike bekwaamheidstoets bevat, onder die studente te versprei en hulle aan te moedig om aan die navorsing deel te neem. Die ruimtelike bekwaamheidstoets is deur 200 respondente van ses Geografie-departemente in Suid-Afrika ingevul. Aangesien hierdie aantal respondente relatief laag is, kan die resultate nie per departement veralgemeen word nie en ook nie as verteenwoordigend van die ses departemente beskou word nie. Hoewel die resultate slegs indikatief van die respondente is, kan die uitslae van die toets wel aangewend word om gapings in leerprosesse uit te wys en interessante gevolgtrekkings te maak.

Oor die algemeen dui die uitslae van die bekwaamheidstoets oor ruimtelike denke op talle leemtes. Die resultate toon aan dat die ruimtelike denkvermoë van die respondente nie statisties betekenisvol vanaf die eerste na die tweede studiejaar ontwikkel het nie. Daar is wel 'n betekenisvolle verbetering in die ruimtelike denkvermoë tussen tweede- en derdejaar-respondente. Die respondente het die swakste gevaar in vrae waarin hulle 'n stel kriteria ontvang en dan 'n optimale ligging moet bepaal, die drie-dimensionele visualisering van voorwerpe vanaf 'n twee-dimensionele beeld, die oorleg van vlakke en die oplos van grense. Die respondente het die beste gevaar in die vraag waarin hulle kaarte met grafiese inligting moes vergelyk.

Hierdie navorsing maak 'n belangrike bydrae tot voorgraadse onderrig in Geografie en demonstreer hoe die ruimtelike bekwaamheidstoets aangewend kan word om tekortkomings in studente se ruimtelike denkproses te identifiseer en aan te spreek.

Bronnelys

Lee, J., Bednarz, R., 2012, Components of spatial thinking: Evidence from a spatial thinking ability test, *Journal of Geography* 111(1), 15-26. <https://doi.org/10.1080/00221341.2011.583262>.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Toepassing van vloeïchemie vir die sintese van farmaseutiese boublokke in organiese chemie

BM Currie, NC Neyt, LS Dibokwane, AM Reinhardt, LT van Wyk, DL Riley, J Panayides

Departement Chemie, Universiteit van Pretoria, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Bernice Currie **E-pos:** bernicecurrie@gmail.com

Application of flow chemistry for the synthesis of pharmaceutical templates in organic chemistry: The synthesis of oxygen-containing benzo-fused compounds with the oxygen atom in the 1-position is common and significant literature information is available. However, the synthesis of benzo-fused compounds containing oxygen in the 2-position is scarcer as these compounds occur mostly in higher oxidised forms. Thus, this research focuses on the synthesis and optimisation of selected benzo-fused compounds containing oxygen in the 2-position under continuous flow conditions due to their potential as pharmaceutical templates.

Vir dekades was die ronde kookfles en proefbuis die belangrikste toerusting in chemie laboratoriums. Dit is veelsydig en gerieflik om vir reaksies op kleiner skaal te gebruik. Op 'n groter industriële skaal is tradisionele bondelprosessintese egter tydrowend, ondoeltreffend en moeilik om op te skaal wanneer omgewings- en ekonomiese faktore oorweeg word. Sedert die ontwikkeling van vloeïchemie met toepassing in organiese sintese in die farmaseutiese bedryf, kan die sleutelparameters in reaksies hoogs effektief op 'n groter industriële skaal geoptimeer word. Vloeïchemie word dikwels gedefinieer as 'n aaneenlopende proses waarin klein volumes reagentie deur mikroreaktore gepomp word in 'n streng beheerde omgewing om hoë chemiese selektiwiteit te weeg te bring. Vloeïnteses word byvoorbeeld verkies bo tradisionele prosessintese wanneer reaksies uitgevoer word by onkonvensioneel hoë temperatuur en druk en met gebruik van kokende oplosmiddels. Dus word vloeïntese die voorkeursoort wanneer vinniger reaksietye, verminderde energieverbruik, doeltreffende vermenging, hoë chemiese selektiwiteit, beter massa- en hitte-oordrag en effektiewe hitteverspreiding benodig word.

Vloeïchemie word al hoe meer in die farmaseutiese vervaardigingsbedryf gebruik om nuwe en bestaande farmaseutiese produkte te sintetiseer, aangesien dit meer ekonomies is en 'n laer omgewingsimpak het. Die sintese van Aktiewe Farmaseutiese Bestanddele (AFB) soos byvoorbeeld benzo-gesmelte heterosikliese verbindings met die suurstofatoom in die 1-posisie word algemeen gesintetiseer en word algemeen in die literatuur vermeld. In teenstelling hiermee is verbindings met die suurstofatoom in die 2-posisie skaarser, aangesien sulke verbindings meestal in hoër geoksiede vorms voorkom. Die tema van hierdie navorsing is die optimering van 'n sintese vir (Z)-7-isopropoksie-8-metoksipropyl-3,6-dihidro-1H-benso[k]oksosien, 'n agt-lid benzo-gesmelte heterosikliese verbinding, wat 'n belangrike boublok vir die produksie van bekende antibiotika en anti-mikrobiese middels verteenwoordig. Die sintese van hierdie teikenmolekule bestaan uit ses stappe. Die opeenvolgende reaksiestappe behels 'n allilasie, Claisen-herrangskikking, die beskerming van 'n alkoholgroep, aldehydreduksie, 'n tweede allilasie en uiteindelik ringsluitingmetatese. 'n Multi-stap sintese soos hierdie kan duidelik meer prakties uitvoerbaar gemaak word deur vloeïchemie te gebruik, veral waar onkonvensioneel hoë temperatuur, druk en kokende oplosmiddels benodig word, soos vir hierdie sintese. Hoër opbrengste, beter produkonskaking, verhoogde tyddoeltreffendheid en meer volhoubaarheid is hiermee moontlik in vergelyking met tradisionele bondelprosesse.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Die paddabloedparasiet-fauna van die Soutpansberge

J du Buisson,¹ LH du Preez,¹ EC Netherlands²

¹ Skool vir Biologiese Wetenskappe, Noord-Wes Universiteit, Suid-Afrika

² Departement Dierkunde en Entomologie, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Joretha du Buisson **E-pos:** jorethadb@gmail.com

The anuran blood parasite fauna of the Soutpansberg mountains: Frogs are hosts for a variety of blood parasites. Hardly any data is available for frog blood parasites within the study area. It was determined that six frog species were infected with intracellular haemogregarines, haemococcidians, extracellular microfilariae nematodes and trypanosomes. These results provide insight into the diversity and distribution of South African frog blood parasites within the Vhembe Biosphere.

Die Soutpansberge is 'n bergreeks in die noordelike deel van Suid-Afrika en vorm deel van die Vhembe Biosfeerreservaat – 'n gebied wat ten minste 35 paddaspesies huisves. Paddas is die geskikte gasheer vir 'n verskeidenheid intra- en ekstrasellulêre bloedparasiete. Intracellulêre bloedparasiete sluit hemogregariene, hemokokkidieë, rickettsiae, en intra-eritrosietbakterieë en -virsusse in. Ekstrasellulêre bloedparasiete sluit tripanosome en mikrofilariae in. Die oordrag van hierdie bloedparasiete vind plaas deur bloedsuiende insekte of wurms, moontlik muskiete of bloedsuiers, onderskeidelik. Die paddagasheer word tydens voeding van of deur die inname van besmette ongewerwde vektore of gashere geïnfekteer. Tot dusver is beperkte data beskikbaar om die diversiteit en verspreiding van paddabloedparasietespesies binne die studiegebied te bepaal. In die huidige navorsing word aangetoon dat die ryk paddaspesiediversiteit as gasheer vir 'n aantal bloedparasietespesies dien.

Metodes vir die navorsing sluit (1) monsterversameling, (2) verwerking en bestudering van bloedsmere deur middel van ligmikroskopie en, laastens, (3) molekulêre werk en filogenetiese ontleding in. Bloedmonsters van meer as 400 paddas, wat 31 paddaspesies verteenwoordig, is versamel en bestudeer.

Paddas is deur middel van aktiewe versamelingsmetodes gevang, waarna bloedmonsters vanaf die femorale arterie verkry en gebruik is om dun bloedsmere te maak. Die oorblywende bloedmonsters is in 70% etanol vir toekomstige molekulêre werk gestoor. Bloedsmere is gedroog, gefikseer in metanol en met Giemsa-kleurstof gekleur. Bloedsmere is deur middel van ligmikroskopie vir die teenwoordigheid van bloedparasiete bestudeer. DNS is uit bloedmonsters wat in 70% etanol bewaar is, onttrek. Polimerase-kettingreaksie (PKR) amplifikasie wat gerig is op 'n fragment van die 18S rRNS-geen, is voltooi op monsters wat positief vir beide ekstra- en intracellulêre bloedparasiete is. Filogenetiese ontledings is gebruik om spesiesamestelling en verwantskappe te bepaal.

Resultate dui aan dat ses van die 31 paddaspesies deur verskeie bloedparasiete vanuit verskillende lokaliteite regoor die Soutpansberge geïnfekteer is. Bloedparasiete wat opgemerk is sluit tripanosome, haemogregariene, hemokokkidieë en mikrofilariae in. Molekulêre metodes is toegepas om spesies tot op genusvlak te klassifiseer. Die taksonomiese plasing van bloedparasiete wat amfibieë parasiteer, word deur baie onsekerhede bemoeilik. In 'n poging om dit op te los, het hierdie navorsing gebruik gemaak van 'n 18S rRNS en COI-geen benadering om onbeskryfte hemokokkidieë en tripanosoomspesies filogeneties te karakteriseer en die taksonomiese plasing en verwantskappe van paddabloedparasiete uiteen te sit.

Hierdie resultate toon 'n diverse parasietgemeenskap oor die Vhembe Biosfeer aan en dit bied verdere insig in die diversiteit en verspreiding van Suid-Afrikaanse paddabloedparasiete. Die einddoel van hierdie navorsing is om die kennisbasis van Suid-Afrikaanse bloedparasietespesies wat paddas infekteer, uit te brei.

Karakterisering van die effek van salisielsuurtoediening op Sclerotinia-stamvrot in sojabone

A Edwards, WJ Swart, M Nyoni

Departement Plantwetenskappe, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika
Korresponderende outeur: Alec Edwards **E-pos:** ae.alecedwards@gmail.com

Characterising the effect of salicylic acid application on Sclerotinia stem rot in soybean: The plant resistance inducer, salicylic acid (SA), was investigated for its effects on Sclerotinia stem rot of soybean. Foliar and soil treatments were applied at different growth stages. Results show that the application of SA significantly reduced effects of the disease in terms of yield, root weight and dry biomass.

Sclerotinia-stamvrot (SSV) van sojabone is 'n siekte van ekonomiese belang wat tot verwoestende opbrengsverliese lei. Dit is 'n moeilike siekte om te beheer as gevolg van die patogeen se vermoë om oorlewingstrukture genaamd sclerotia in plantreste te vorm. As gevolg van 'n tekort aan chemiese produkte wat vir die beheer van SSV geregistreer is, word daar al hoe meer na alternatiewe oplossings gekyk. Weerstandinduseerders, soos salisielsuur (SA), aktiveer die inherente verdedigingsmeganismes van die gasheerplant om die erns van die siekte te verminder. Salisielsuur is 'n wyd bestudeerde weerstandsinduseerder wat getoon het dat dit tot die induksie van sistemies verworwe weerstand teen 'n reeks patogene lei. Die potensiaal vir SA-toedienings om Sclerotinia-stamvrot van sojabone, veroorsaak deur *Sclerotinia sclerotiorum*, te beheer, is ondersoek. Glashuisproewe is uitgevoer met twee sojaboonkultivars, RA437 en RA565, om die uitwerking van SA op SSV uit te lig. Herhaalde proewe is uitgevoer in 'n ewekansige volledige blokontwerp met vier herhalings en drie plante per herhaling. Behandelings het vier blaartoedienings, een grondtoediening en 'n kontrole ingesluit. Die eerste en tweede blaarbehandeling van SA is toegedien teen twee kontrasterende konsentrasies by drie groeistadiums, die V3- en R3-groeistadiums en 21 dae na R3-toediening. Die derde en vierde behandeling het bogenoemde toediening herhaal sonder die V3-groeistadium. Die vyfde behandeling was 'n deurdrenkte toediening op die R3-groeistadium en is 21 dae later herhaal. Inentings met die patogeen is op die R3-groeistadium vir alle behandelings uitgevoer. Die effek van SA is geëvalueer deur 'n reeks assesserings uit te voer, insluitend SSV-graderings, droë biomassa en opbrengs. Kwantifisering van *S. sclerotiorum* DNS teenwoordigheid in die sojaboonwortelstelsel is uitgevoer deur qPCR-tegnieke na proefbeëindiging. Die navorsing het aan die lig gebring dat hoë-dosisbehandelings die effek van SSV op opbrengs, wortelmasse en biomassa in die plante aansienlik ($P < 0.05$) verminder het. Daar is verder gevind dat hierdie behandelings *S. sclerotiorum* DNS-hoeveelhede in sojaboonwortels effektief verminder. Hierdie resultate dui op die potensiaal vir SA om gebruik te word in 'n geïntegreerde plaagbestuurstelsel vir die beheer van Sclerotinia-stamvrot in sojabone.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Karakterisering van plantgesondheidsbevorderende mikroörganismes (PGBMs) en potensiële biologiese beheermiddels (BBMs) in die sojaboonmikrobioom

A Edwards, LA Rothmann, WJ Swart

Departement Plantwetenskappe, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika
Korresponderende outeur: Alec Edwards **E-pos:** ae.alecedwards@gmail.com

Characterisation of plant health promoting microorganisms (PGPMs) and potential biological control agents (BCAs) from the soybean microbiome: The soybean (*Glycine max*) microbiome was investigated to elucidate whether it can be utilised as a source for plant growth promoting microorganisms (PGPMs) and biological control agents (BCAs) for controlling *Sclerotinia* stem rot caused by *Sclerotinia sclerotiorum*. Field trials show that potential BCAs significantly reduced disease incidence and effect on yield.

Moderne landbou het afhanklik geraak van die gebruik van sintetiese kunsmis, plaagdoders en onkruidodders om oesopbrengs te verbeter en siektes, plae en onkruid te bestuur. Die langdurige gebruik van hierdie chemikalieë het gelei tot die besoedeling van die omgewing asook die beskadiging van grondekosisteme. Daar is 'n kritiese behoefte aan nuwe biologiese produkte om plantgesondheid te bevorder en hoogs aggressiewe plantpatogene te beheer. In hierdie navorsing is die mikrobioom van die sojaboon (*Glycine max*) ondersoek om te bepaal of dit gebruik kan word as 'n bron vir plantgroeibevorderende mikroörganismes (PGBMs) en biologiese beheermiddels (BBMs) vir die beheer van *Sclerotinia*-stamvrot, veroorsaak deur *Sclerotinia sclerotiorum*. 'n Totaal van 114 morfologies onderskeibare mikroörganismes is geïsoleer uit die filosfeer, risosfeer en endosfeer van sojaboonplante wat vanaf 'n landery naby Delmas (Mpumalanga) verkry is. Die navorsing het bakterieë en giste met plantgroeibevorderende eienskappe opgelewer, insluitend fosfaatoplosbaarheid, IAA-produksie en ammoniakproduksie. Hierdie eienskappe kan tot plantgesondheid en -ontwikkeling bydra. IAA is 'n belangrike plant-groei-hormoon wat groei en ontwikkeling stimuleer. Deur fosfaatoplosbaarheid en ammoniakproduksie kan hierdie organismes meer voedingstowwe vir gebruik deur plante beskikbaar stel en sodoende tot algehele plantgesondheid bydra. Daar is ook aangetoon dat sommige isolate die ontkieming van sojaboonsade sowel as die loot- en wortellengte van saailinge aansienlik ($P < 0.05$) verhoog. Proewe wat *in vitro* uitgevoer is, het aan die lig gebring dat van 114 isolate wat geïsoleer is, byna 'n derde wisselende grade van groei-inhibisie van *S. sclerotiorum* getoon het, met drie isolate wat uitstekende potensiaal toon. Isolate wat potensiaal toon as PGBMs of BBMs word tans in glashuis- en veldproewe bestudeer. Proewe het getoon dat mengsels van die belowende isolate aansienlik beter resultate lewer in vergelyking met behandelings van individuele isolate. Voorlopige glashuisproewe het aangedui dat geselekteerde PGBM-isolate die saailinggroeikragindeks verhoog het. Tydens die 2021/2022 seisoen is veldproewe op 'n proefplaas naby Delmas uitgevoer. Die plante is tydens blom met die patogeen *S. sclerotiorum* geïnokuleer om die effek van biologiese behandelings op siekte-ontwikkeling te bepaal. Die eerste seisoen van veldproewe het bewys dat die potensiële BBMs siektevoorkoms en die effek daarvan op die opbrengs van *S. sclerotiorum* aansienlik ($P < 0.05$) verminder het. Hierdie resultate bevestig dat inheemse mikroörganismes wat met gewasse geassosieer word, die potensiaal het om tot kommersiële biologiese produkte ontwikkel te word, wat plantgesondheid kan bevorder en gewassiektes kan bestuur.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

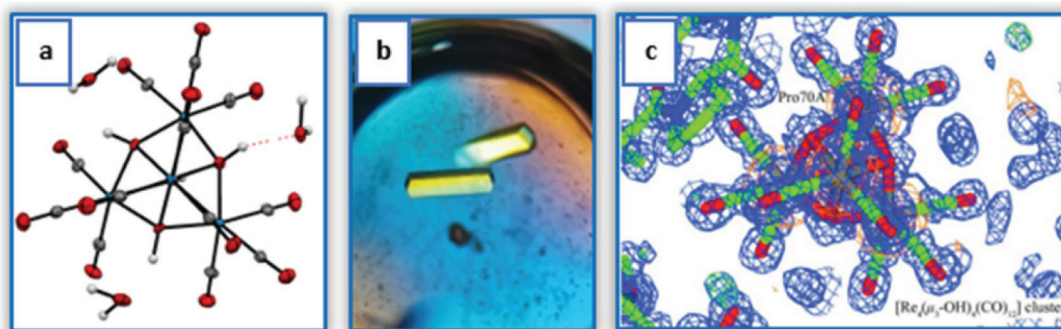
Klein organometaalverbindinge na proteïne – die geheime van molekules in fundamentele kristalruimtes

FJF Jacobs, A Brink

Departement Chemie, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika
Korresponderende outeur: Francois Jacobs **E-pos:** fjjacobs7@gmail.com

Small organometallic molecules to proteins – the secrets of molecules in fundamental crystal space: Since the development of the ^{99m}Tc and ^{188}Re generators, considerable research has been conducted to improve radiopharmaceutical development. This research focuses on using biological mimickers as vectors for targeting specific disease sites. Both small-molecule and macromolecular crystallography are jointly utilised as interoperable tools to advance the field of radiopharmacy.

Sedert die ontwikkeling van die ^{99m}Tc -verwekker en die daaropvolgende bekendstelling van die ^{188}Re -verwekker, is die ontwikkeling van tegnesium en renium radiofarmaseutika van groot belang vir die wetenskaplike gemeenskap (Jürgens et al., 2014). Hierdie navorsing is gefokus op die ontwikkeling van radiofarmaseutika met spesifieke middels as teiken (Top et al., 1995), waardeur die gebruik van chemiese funksionaliteite met biologiese kenmerke as teikenvektore in potensiele radiofarmaseutiese middels gebruik word. Die insluiting van meer as een radionuklid (met ander woorde ^{99m}Tc en $^{186/188}\text{Re}$) vorm 'n sleutelaspek in die sintetisering van 'n dubbele funksionele middel, een met potensiele teranostiese (terapeutiese en diagnostiese) toepassings (Mokolokolo et al., 2018). Om nuwe variasies van radiofarmaseutika te bevorder, word die behoorlike ontwikkeling en begrip van die verskillende komponente wat deel vorm van geneesmiddelontwikkeling vereis, dit wil sê, ligandontwikkeling, kinetiese ondersoeke van moontlike reaksieweë *in vitro* asook begrip van wat *in vivo* kan gebeur (Brink et al., 2022; Jacobs et al., 2021). In hierdie referaat word aangetoon hoe hierdie navorsing toegepas kan word in die ontwikkeling van renium-organometaalkomplekse en hoe kristallografiese ondersoeke gebruik kan word om die kennis van hierdie onderwerp te bevorder deur beide kleinmolekule- en makromolekulêre kristallografie te gebruik.



a: Kristalstruktuur van $\text{fac-}[\text{Re}_4(\text{OH})_4(\text{CO})_{12}]$; b: Lisosiemkristalle wat saam met ReAA gekristalliseer is; c: Kristalstruktuur van $\text{fac-}[\text{Re}_4(\text{OH})_4(\text{CO})_{12}]$ in lisosiem

Bronnelys

- Brink, A., Jacobs, F.J.F., Helliwell, J.R., 2022, Trends in coordination of rhenium organometallic complexes in the Protein Data Bank, *Journal of the International Union of Crystallography* 9, 180-193. <https://doi.org/10.1107/S2052252522000665>.
- Jacobs, F.J.F., Venter, G.J.S., Fourie, E., et al., 2021, Substitution reactivity and structural variability induced by tryptamine on the biomimetic rhenium tricarbonyl complex, *RSC Advances* 11, 24443-24455. <https://doi.org/10.1039/D1RA03750A>.
- Jürgens, S., Herrmann, W.A., Kühn, F.E., 2014, Rhenium and technetium based radiopharmaceuticals: Development and recent advances, *Journal of Organometallic Chemistry* 751, 83-89. <https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2013.07.042>.
- Mokolokolo, P.P., Frei, A., Tsosane, M.S., et al., 2018, Nuclearity manipulation in Schiff-base *fac*-tricarbonyl complexes of Mn (I) and Re (I), *Inorganica Chimica Acta* 471, 249-256. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2017.10.036>.
- Top, S., El Hafa, H., Vessières, A., et al., 1995, Rhenium Carbonyl Complexes of β -Estradiol Derivatives with High Affinity for the Estradiol Receptor: An Approach to Selective Organometallic Radiopharmaceuticals, *Journal of the American Chemical Society* 117, 8372-8380. <https://doi.org/10.1021/ja00137a010>.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

'n Raamwerk om digitale tweeling-funksionaliteite in webtoepassings te implementeer

WJ Kilian, SGJ van Niekerk, JC Vosloo

Fakulteit Ingenieurswese, Noordwes-Universiteit, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Wilhelm Kilian **E-pos:** wkilian@remns2.com

A framework to implement digital twin functionalities into web applications: Digital twins (DT) provide instant physical context to data in complex engineering systems; however, they are computationally intensive. This research proposes a framework to enable cross-platform access to DT functionalities using web applications. Applying the framework on three case studies showed significant performance and data efficiency improvement.

Digitale tweeling (DT) verskaf onmiddellike fisiese konteks aan data in komplekse ingenieurstelsels, bv. diepvlakmyne. Wanneer sensordata ook geïntegreer word, kan DT ook help met mynboubedrywighede, verrigtingsanalise, beplanning en besluitneming. DT is egter berekeningsintensief en vereis tipies kragtige rekenaars in plaas van minder kragtige mobiele toestelle.

Afstandstoegang tot DT-funksionaliteite kan deur webtoepassings aan baie gebruikers verskaf word. Die beperkings van webtoepassings is egter dat daar minder berekeningskrag op mobiele toestelle (bv. slimfone) beskikbaar is. Data-oordragperiodes en kostes in die gebruik van webtoepassings is nog voorbeelde van beperkings. Daar ontstaan dus 'n behoefte om DT-datamodelle vir webtoepassings te optimeer sodat gebruikers toegang tot DT-funksionaliteite op talle platforms, soos byvoorbeeld mobiele toestelle, kan hê.

Hierdie navorsing beoog dus om 'n raamwerk te skep wat bestaan uit 'n optimeringsmetodologie vir datamodelle en 'n metodologie om webtoepassings te ontwikkel. Die optimeringsmetodologie bestaan uit die ontleding van bestaande datamodelle, 'n modulêre ontwerpmetodologie en 'n kompressiemetode vir datamodelle. Die metodologie vir die ontwikkeling van webtoepassings vorm die tweede helfte van die raamwerk.

Die resultaat was eerstens dat 'n vermindering in die vereiste DT-datamodelgrootte van meer as 86% van die oorspronklike grootte verkry is. Tweedens is 'n webtoepassing geïmplementeer wat kruisplatform-toegang tot DT-funksionaliteite vir gebruikers moontlik maak. Die optimeringsmetodologie is gevolg om soveel inligting moontlik in die mees beperkte stoorruimte moontlik te stoor, terwyl verdere modulêre ontwikkeling van die model steeds moontlik is.

Die gebruik van die metodologie vir die ontwikkeling van die webtoepassing het 'n aansienlike verbetering in raamsnelheid tot gevolg gehad. Dit het gelei tot 'n gemiddeld van 60 rame per sekonde vir die drie gevallestudies wat bestudeer is.

As gevolg van die vermindering in die kompleksiteit en grootte van die datamodel, sowel as die verbetering in die raamsnelheidsverrigting van die webtoepassing, is toegang tot DT-funksionaliteite vir talle gebruikers met mobiele toestelle, soos slimfone, moontlik gemaak. Die raamwerk wat geskep is, kan op DT-datamodelle in verskillende industrieë toegepas word, soos die mynbou- en vervaardigingsindustrieë.

Integrasie van trofiese vlak met die nisvariasie-hipotese: 'n Vergelyking van individuele nisvariasie tussen soogdierherbivoor- en soogdierkarnivoor-bevolkings

C Lewis, D Codron

Departement Dierekunde en Entomologie, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika
Korresponderende outeur: Chanel Lewis E-pos: chanellewis11@gmail.com

Integrating trophic level with the niche variation hypothesis: a comparison of individual niche variation between mammal herbivore and carnivore populations: Results based on variance components analysis of time series data indicates relatively less within-individual variation and larger niche separation between individuals in carnivores. Herbivores, by contrast, display more niche variation within individuals, relative to the total niche width of their populations.

Individualisering van nisse is 'n belangrike meganisme waardeur diere vermoedelik die gevolge van mededinging om hulpbronne in beperkende omgewings versag. Dit speel 'n sleutelrol in fenotipiese divergensie binne bevolkings, en dus evolusie deur natuurlike seleksie. Hoe hierdie patroon ontwikkel, is egter nog nie duidelik nie. In hierdie navorsing word die spesifieke hipotese aangespreek wat die evolusie van nis-individualisering onderlê, naamlik die effek van trofiese posisie. Die hoë innamevereiste van herbivore met groot liggame bring hoë soekkosse mee. Gevolglik behoort die evolusie van individualisering in hierdie groep nie deur natuurlike seleksie bevoordeel te word nie. Analitiese modelle ondersteun hierdie hipotese, en het verder aan die lig gebring dat individualisering binne herbivoorbevolkings tot groter interspesifieke nisoorvleuelings lei. In karnivore, daarenteen, het geen bykomende energie- of ekologiese koste na vore gekom toe modeldiere van individuele algemene na individuele spesialisstrategieë oorgeskakel is nie. Data is vir binne-bevolking trofiese nisvariasie (gebaseer op stabiele koolstof- en stikstofisotoop-analise) tussen verskillende soogdierkarnivoor- en soogdierherbivoorspesies ingesamel. Hierdie data verteenwoordig 'n deursnit deur beide populasies, afkomstig van fekalieë wat op dieselfde tyd versamel is, asook die longitudinale geskiedenis van individue afgelei uit haarprofiel. Fekale monsters is versamel vanaf 'n droë Kalahari-savanna-habitat (Suid-Afrika), en vanaf 'n meer mesiese savanna-habitat in die Pendjari Biosfeerreservaat (noordelike Benin). Haarmonsters is van 'n aantal natuurreserve, wat regoor Suid-Afrika geleë is, versamel. Beide fekale- en haarmonsters is afgewees en ingekapsuleer volgens die spesifikasies van die stabiele isotooplaboratorium. Stabiele isotoopanalise is by die Soogdiernavorsingsinstituut van die Universiteit van Pretoria uitgevoer. Analise van ellipse in isotopiese bi-ruimtes, sowel as 'n stel metrieke van verspreiding vir die kwantifisering van isotopiese-nisstruktuur binne bevolkings op deursneeddata (fekalieë), dui op meer individuele skeiding in bevolkings van karnivore as herbivore, wat selfs op spesievlak verskille in isotopiese nisbreedtes in ag neem. Ontleding van binne-individuele variasie vanaf tydreeksdata (haarprofiel) dui ook op meer individuele nisskeiding in karnivoorbevolkings. Herbivore, daarenteen, vertoon relatief meer nisvariasie binne individue. Hierdie resultate stem ooreen met voorspellings dat hoë innamekoerse van herbivore individuele spesialisasie te duur vir hulle maak om te ontwikkel. Deur bevolkingsvlak-diëte in individuele komponente af te breek en die elemente te identifiseer wat die graad van tussen-individuele variasie bepaal, sal behulpsaam wees om 'n beter begrip te kry hoe nisverdeling en gemeenskapsvlak-oorvleueling van dieetpatrone na vore kom. Die oplossing van die basis vir individuele nisspesialisasie sal die begrip van die verband tussen ekologie en evolusie deur natuurlike seleksie ook aansienlik verbeter.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Die sintese en evaluasie van 'n reeks amino-ouroonderivate en hulle renium(I) trikarbonielkomplekse as moontlike antikankermiddels

L Liebenberg, M Schutte-Smith, HG Visser

Departement Chemie, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Leandri Liebenberg **E-pos:** leandrijv@gmail.com

The synthesis and evaluation of a series of aminoaurone derivatives and their rhenium(I) tricarbonyl complexes as possible anticancer agents: This research entails the synthesis and characterisation of *N,O* and *N,N'* bidentate ligands and their rhenium coordination compounds, with an important aspect being the effect of the various amine substituents on the compounds' properties. The compounds' cytotoxic, photoluminescent and kinetic properties were evaluated.

Kanker is steeds een van die grootste oorsake van sterftes wêreldwyd. Die vooruitgang in mediese navorsing gee deurgaans hoop dat kankerverwante sterftesyfers sal afneem. Prekliniese middelontwikkelingsnavorsing is die kern van hierdie soektog na nuwe middels vir die behandeling van kanker en ander farmaseutiese middels. Hierdie navorsing sluit farmakokinetiese en -dinamiese studies, veiligheids-/toleransiestudies, gedragstudies, effektiwiteitsmodelle, metabolisme, *in vivo*- en *in vitro*-toksisiteit, fotoluminessensiestudies en bioverspreidingsprofiel in.

Talle komplekse wat die renium(I) trikarbonielkern bevat, blyk belowende middels vir beide diagnostiese en terapeutiese toepassings te wees. Die oktahedriese geometrie, lae-spin d₆ elektronkonfigurasie en teenwoordigheid van sterkveldligande maak hierdie soort verbindings kineties stabiel – 'n eienskap wat hulle gebruik in die menslike liggaam vergemaklik en bevoordeel. Die renium(I) trikarbonielkern se meganisme van werking is beduidend anders as dié van platinumgebaseerde chemoterapeutiese middels. Dit is 'n belangrike aspek wat moontlike oplossings kan bied vir middelweerstandigheid en die voorkoms van nuwe-effekte, wat reeds 'n groot probleem is in die behandeling van verskeie siektes. Die indrukwekkende fotofisiese eienskappe van hierdie soort komplekse lewer vele moontlik geskikte middels vir die gebruik in fotodinamiese en foto-geaktiveerde chemoterapie sowel as in die diagnose van siektes.

Die fokus in hierdie navorsing is op die sintese, karakterisering en evaluasie van bestaande en nuwe amino-ouroonderivate en hulle renium(I) trikarbonielkomplekse. Die *N,O* en *N,N'* bidentate ligande word verkry deur die derivatisering van *O,O'* bidentate ligande met 'n verskeidenheid primêre amiene. Ouroon (2-bensilideen-1-bensofuran-3(2H)-oon) is 'n natuurlike molekule en 'n gesogte struktuur in medisinale chemie wat deel is van die groter groep plantmetaboliete wat algemeen as flavonoïede bekend staan. Hierdie soort molekule is bekend vir hulle wye reeks biologiese eienskappe insluitend antikanker-, antioksidant-, antiparasitiese, antibakteriese, antifungus-, antivirale, antihormonale, anti-inflammatoriese en antidiabetiese aktiwiteit. Die struktuur van die ouroonmolekule bestaan uit 'n heterosikliese bensofuran-oonring wat deur 'n koolstof-koolstof eksosikliese dubbelbinding aan 'n fenielring gekoppel is. Hierdie spesifieke polifenoliese verbindings is nog nie wyd nagevors nie; en dus kan die sintese, karakterisering en biologiese studies wat gedoen kan word 'n merkwaardige bydrae tot hierdie navorsingsveld lewer.

Die effek van die verskillende amiensubstituentte op die sitotoksiteit, fotoluminessensie, kinetiese eienskappe, lipofilisiteit en wateroplosbaarheid van die ligande sowel as die komplekse is van belang in hierdie navorsing vir die potensiële "verfyning/verstelling" van die eienskappe van die ligande en komplekse.

Die *in vitro*-sitotoksiteit sal voorlopig op ovariële (HeLa) kankerselle getoets word. Toekomstige toetse op 'n verskeidenheid kankersellyne asook menslike nie-kankerselle sal data verskaf wat meer inligting gee oor die selektiwiteit van die verbindings vir sekere kankerselle asook die veiligheid ten opsigte van nuwe-effekte. Fotoluminessensiestudies sal bepaal of die verbindings oor die nodige eienskappe beskik om in fotodinamiese terapie gebruik te kan word. Kinetiese studies is noodsaaklik om die reaktiwiteit en stabiliteit van die komplekse te bepaal, asook die tempo van uitruiling van die akwaligand in die sesde posisie. Die kinetiese data verskaf belangrike inligting rakende die reaksietempo's, farmakologiese eienskappe, *in vivo*-stabiliteit en metabolisme van chemiese verbindings in die liggaam.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Die effek van varroa-mietinfestasies op die spermfunksionaliteit van die Suid-Afrikaanse Kaapse heuningby

JF Murray, G van der Horst, M Allsopp, RCM Kotze

Departement Mediese Biowetenskap, Universiteit van Wes-Kaapland, Suid-Afrika
Korresponderende outeur: Janice Murray **E-pos:** 3567716@myuwc.ac.za

The effect of varroa mite infestations on the sperm functionality of the South African Cape honeybee: Honeybees ensure food security. The global infestation of varroa mites contributes to colony collapses. Reproductive success, determined by sperm quality (structure and function), is required to replace lost populations. Literature on the effect of parasitisation is lacking. Therefore, this research aimed to determine the effect of varroa mites on sperm functionality.

Heuningbye (*Apis mellifera* spesies) is noodsaaklike bestuiwers van belangrike gewasse wat deel van die menslike voedselketting asook dié van alle lewende organismes vorm. Die welstand en oorlewing van die ekosisteem in geheel, asook mens en dier, is dus van hierdie spesie se voortbestaan afhanklik. Gevolglik is voortplantingsukses 'n vereiste vir die volhoubaarheid van heuningbybevolkings. Suksesvolle voortplanting word bepaal deur die reprodutiewe gesondheid van die koninginby, asook die spermgehalte van die mannetjiesby.

Spermgehalte is geheel en al van die strukturele en funksionele eienskappe van 'n spermsel afhanklik. Literatuur oor die spermgehalte van die heuningby is grotendeels kwalitatief van aard, en beskryf slegs die spermstruktuur en basiese eienskappe van spermfunksionaliteit soos spermswempatrone. Gedetailleerde wetenskaplike verslae oor heuningbyspermfunksionaliteit, en hoe dit deur omgewingsfaktore beïnvloed word, is beperk en vereis verdere ondersoek.

Die mannetjiesby is uiters sensitief en sy ontwikkeling word maklik deur omgewingsfaktore beïnvloed, byvoorbeeld varroa-mietinfestasies, wat lei tot 'n siekte bekend as Varroosis. Varroa-miete teer veral op mannetjiesbye en belemmer sodoende hulle ontwikkeling. Daar word verwag dat dit ook spermatogenese, die proses van spermproduksie wat tydens ontwikkeling plaasvind en voltooi word, nadelig sal affekteer en die produksie van beskadigde sperme tot gevolg mag hê. Literatuur wat laasgenoemde ondersoek, is grotendeels kwalitatief van aard. Die toepassing van moderne tegnieke, soos gerekenariseerde semenanalises, maak dit nou moontlik om op 'n kwantitatiewe wyse verslag te lewer op die impak wat hierdie nadelige omgewingsfaktore op spermfunksie mag hê.

Die doel van hierdie navorsing was dus om die impak van varroa-mietinfestasies op die mannetjiesby se ontwikkeling en spermfunksionaliteit (motiliteit en vitaliteit) te bepaal deur middel van 'n gerekenariseerde-stelsel en flouressensiemikroskopie. Hierdie doel is bereik deur die liggaamsgewig en spermfunksie van heuningbye wat blootgestel is aan varroa-miete tydens hulle ontwikkeling te meet en te vergelyk met die liggaamsgewig en spermfunksionaliteit van kontrole semenmonsters verkry vanaf mannetjiesbye uit varroa-vrye kolonies.

Resultate bewys dat beide die liggaamsgewig en spermfunksie van varroa-besmette heuningbye tot 'n mate nadelig beïnvloed is. Die besmette mannetjiesbye se gewig, spermllewensvatbaarheid, persentasie motiele sperme in 'n semenmonster, asook die spoed waarteen sperme swem, is aansienlik laer in vergelyking met die liggaamsgewig en spermfunksie van mannetjiesbye wat geen blootstelling aan varroa-miete tydens hul ontwikkeling gehad het nie.

Hierdie navorsing lewer vir die eerste keer 'n kwantitatiewe oorsig oor die effek van varroa-mietinfestasies op die ontwikkeling en spermfunksie van die Suid-Afrikaanse Kaapse heuningby. Dit is verder duidelik dat die spermllewensvatbaarheid en -motiliteit van mannetjiesbye nadelig beïnvloed word wat moontlik op groot skaal tot kolonie-ineenstortings en 'n wêreldwye afname in heuningbybevolkings bydra. Hierdie bevinding is belangrik en kan bydra om kolonie-ineenstortings te bekamp. Hierdie navorsing is verder van waarde vir wetenskaplikes wat in heuningbyreproduksie spesialiseer en die volhoubaarheid van heuningbybevolkings bevorder, byeboere vir heuningbybestuur, en laastens die landboubedryf wat afhanklik is van heuningbye vir die bestuiwing van gewasse.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Spektrale metodes en gebiedontbinding

EA Nel, N Hale

Departement Toegepaste Wiskunde, Stellenbosch Universiteit, Suid-Afrika
Korresponderende outeur: Emma Nel **E-pos:** 21865663@sun.ac.za

Spectral methods and domain decomposition: This research investigated techniques for solving second-order elliptic ordinary and partial differential equations with variable coefficients on one- and two-dimensional domains. Spectral collocation methods were combined with domain decomposition strategies, specifically the hierarchical Poincaré-Steklov (HPS) method, and the efficiency thereof was demonstrated on some simple examples.

Gewone en parsiële differensiaalvergelykings (GDV en PDV) is alomteenwoordig in die wetenskappe en ingenieurswese. Toepassings daarvan ontstaan in 'n wye verskeidenheid studieveld, soos termodinamika, elektrostatika, vloeistofdinamika, algemene relativiteit en kwantumeganika. Hierdie vergelykings het tipies nie geslote-vorm oplossings nie en vereis dus numeriese metodes, soos eindige-verskil-, eindige-element- of spektrale metodes, om dit op te los. Terwyl eindige-verskil-metodes en eindige-element-metodes op lokale benaderings gebaseer is, is spektrale metodes op globale benaderings gebaseer en gevolglik lei dit dikwels tot meer akkurate oplossings. Hierdie navorsing fokus op die gebruik van spektrale kollokasie-metodes saam met gebiedontbindingstrategieë om tweede-orde elliptiese GDVs en PDVs met veranderlike koëffisiënte op een- en twee-dimensionele gebiede op te los.

Om spektrale kollokasie toe te pas moet 'n gegewe probleem gediskretiseer word deur die funksies in die differensiaalvergelyking by die kollokasiepunte te evalueer en differensiasie matrikse te gebruik om die afgeleides te benader. In een dimensie word die Chebyshev-punte as kollokasiepunte gebruik, terwyl in twee dimensies 'n tensorproduk-rooster van Chebyshev-punte gebruik word. 'n Diskrete weergawe van die probleem kan dan in die vorm van 'n lineêre stelsel geskryf word. Dit is egter welbekend dat die matrikse wat deur spektrale kollokasie geskep word, dig gepak is en dat spektrale metodes beperk is in die tipe gebiede waarop hulle toegepas kan word.

Onlangse ontwikkelinge in gebiedontbindingsbenaderings bied wel hoop om van hierdie beperkinge te oorkom. Gebiedontbinding is die proses om 'n gegewe gebied in 'n stel kleiner subgebiede te verdeel. Dit stel mens nie net in staat om spektrale metodes toe te pas op meer interessante en alledaagse geometrieë nie, maar maak lokale verfyning van gebiede ook moontlik. Die krag agter gebiedontbinding lê in die oorskakeling van 'n groot probleem (wat buitensporig duur is om op te los) na 'n hoeveelheid kleiner probleme wat elkeen effektief opgelos kan word, selfs in parallel. Die oplossings van die subprobleme word dan strategies saamgesmelt om die oplossing vir die oorspronklike probleem te produseer. Sodoende word 'n spesifieke gebiedontbindingstrategie, genaamd die hiërgaarse Poincaré-Steklov-metode (HPS), gebruik.

Die HPS-metode is 'n doeltreffende algoritme wat gebruik kan word om die groot lineêre sisteme wat deur spektrale metodes geproduseer word effektief op te los. Dit verbind oplossings by die grense tussen verskillende subgebiede deur die gebruik van twee tipes operatore. Hierdie operatore verseker dat die oplossings, en hulle afgeleides, oor die gebiedgrense ooreenstem en dat die lokale oplossings saamgeweef kan word vir 'n oplossing op die globale gebied.

Die implementasie van die metode in hierdie navorsing hanteer tans enige gebied wat in reghoekige subgebiede verdeel kan word. Om die implementasie te evalueer word van 'n toetsprobleem gebruik gemaak, naamlik Poisson se vergelyking op 'n eenheidsvierkant. Daar is gevind dat die metode 'n goeie tiensyfer-akkuraatheid gee by alle interne punte op die vierkant en 'n swakker vyfsyfer-akkuraatheid by die hoekpunte. Hierdie swak akkuraatheid is teoreties verduidelikbaar deur singulariteite by die hoeke van die vierkant en twee moontlike strategieë word voorgestel om daarop te verbeter – een opsie is lokale verfyning by die hoekpunte.

Tans word uitbreidings van die metode in 'n verskeidenheid rigtings ondersoek. Byvoorbeeld, die metode is huidig slegs van toepassing op PDVs van een veranderlike, maar baie PDVs van belang, soos die Navier-Stokes-vergelyking, wat gebruik word vir vloeistofmodellering, vereis die gelyktydige oplossing van verskeie veranderlikes. In toekomstige werk kan die metode ook verder ontwikkel word om meer komplekse oppervlaktes te hanteer, soos gebiede met gekromde grense.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Insig in die morfologiese ongelykheid in die selde bewaarde sagteweefselge- deelte van antiark-plakodermvis, *Bothriolepis africana*

R Nel,¹ RW Gess,² K Trinajstić³

¹Departement Geologie, Rhodes Universiteit, Suid-Afrika

²Albany Museum en Departement Geologie, Rhodes Universiteit, Suid-Afrika

³Departement Omgewing en Landbou, Curtin Universiteit, Australië

Korresponderende outeur: Ryan Nel **E-pos:** ryan2nel@gmail.com

Insight into morphological disparity in the rarely preserved soft tissue portion of antiarch placoderm fish, *Bothriolepis africana*: Placoderm fossils are the most abundant early vertebrates from the Devonian period. They have a robust cephalic and trunk armour, preserved either articulated or as disarticulated plates. Sizes range from a few millimetres to over 6 metres in length, and although the head and trunk are often fossilised, the tails of placoderm are rarely preserved.

Daar word vermoed dat die verlies van stertskubbe in verskeie plakodermvis-afstammelinge plaasgevind het, insluitend die antiark-plakodermvisse, *Bothriolepis*. Plakodermvisfossiele is die mees algemeenste bewaarde oer gewerwelde visoorblyfsels wat voorkom in verskeie Devoon-ouderdom- (360 miljoen jaar oue) afsettingsgebiede. Die bewaring van plakodermvisse in die fossielrekord is weens hul veerkragtige kefaliese en stampantser wat as geartikuleerde óf, meer dikwels, ongeartikuleerde plate bewaar word. Plakodermfossiele wissel oor die algemeen in vorm en grootte van 'n paar millimeter tot meer as ses meter in lengte, maar hoewel die kop en romp dikwels gefossiliseer is, word die sterte van plakodermvisse selde bewaar. Plakodermvisfossiele, wat ontdek en bewaar is in die Laat-Devoon (Laat-Famenniaan) Waterloo Farm Lagerstätte-sedimente (Oos-Kaapprovinsie, Suid-Afrika), bevat gefossiliseerde oorblyfsels van verskeie plakodermvis-taksa. Die ontdekking van hierdie globale yl verspreide fossiele, onlangs gevind in Suid Afrika, vertoon van die wêreld se mees uitsonderlike sagteweefselafdrukke. Die fossiele word algemeen as tweedimensionele afdrukke in die skalie bewaar, waartydens die organiese materiaal vervang word deur wit tot silwer glimmeragtige (fillosilikaat) minerale, wat geleidelik na kaolinietklei verander. Die mineraalvervangingsproses maak dit moontlik om tussen die donker skalie en die fossielsagteweefsel te onderskei. Stertvinne en epidermale afdrukke is ontdek in drie jeugdige *Bothriolepis africana* (antiark-plakodermvis) -spesies. Slegs drie ander *Bothriolepis*-spesies is bekend wat buitengewone stertaafdrukke vertoon. Dit sluit in *Bothriolepis canadensis*, van die Laat-Devoon Frasniese afsetting by Miguasha; *Bothriolepis gibbslandiensis*, van die Frasniese afsetting by Mt Howitt; Victoria en *Bothriolepis fergusoni*, van die Frasniese afsetting by Mt Howitt, Victoria. Die stertmorfologie van al die bogenoemde taksa bewys sagteweefselmorfologie wat verskil van dié van *Bothriolepis africana*. *Bothriolepis canadensis* het minder ventraal benige strale, en die stertvin het kort vinstraalsteune. Die bekkenvinne was waarskynlik naak met 'n verlengde rugvin. *Bothriolepis gibbslandiensis* het uitgebreide ventrale en dorsale vinstraalondersteuning, met 'n heteroserkale stert en 'n smal hipochordale lob, die ventrale lob van die stertvin was so lank soos die rugvinne, dié spesie het ook ventrolaterale bevat. Die stertmorfologie van *Bothriolepis fergusoni* is gedeeltelik bewaar, en toon twee rye ventrolaterale skubbe, soortgelyk aan dié wat in *Bothriolepis canadensis* en *Bothriolepis gibbslandiensis* gevind word. Die stertmorfologie van eersgenoemde, *Bothriolepis canadensis*, is soortgelyk aan *Bothriolepis africana*. Die huidige hersiening van *Bothriolepis africana* en die daaropvolgende insluiting in 'n filogenetiese matriks sal die verwantskappe tussen hierdie vier spesies openbaar en sodoende lig werp op die volgorde van karakterverwerping in antiark-plakoderms.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Ontwrigtingsdigtheidmeting in AIS1316L vlekvrystaal met elektronkanalisering-kontrasbeelding (EKKB)

LC Pullen,¹ JE Westraadt,¹ D Ramasimong,² RD Knutsen²

¹Departement Fisika, Nelson Mandela Universiteit, Suid-Afrika

²Sentrum vir Materiaal Ingenieurswese, Universiteit van Kaapstad, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Luchian Pullen **E-pos:** s215323548@mandela.ac.za

Dislocation density measurement in AISI316L stainless steel using electron channelling contrast imaging: Electron channelling contrast imaging (ECCI) is a relatively new direct imaging technique that can be used to determine dislocation densities in crystalline materials. In this research the accuracy of the results obtained using ECCI was quantitatively compared with that of the results obtained using scanning transmission electron microscopy (STEM).

Ontwrigtingsdigtheid beïnvloed meganiese eienskappe soos die sterkte en rekbaarheid van materiale. Ontwrigtingsdigtheid speel ook 'n baie belangrike rol in die plastiese vervorming van kristallyne materiale. Die digtheid van die ontwrigtingsdigtheid word gewoonlik bepaal deur van direkte beeldingstegnieke of indirekte metodes gebruik te maak. Die direkte tegnieke sluit in konvensionele transmissie-elektronmikroskopie (KTEM), ringvormige donkerveld- (RDV)-skandeertransmissie-elektronmikroskopie (STEM) en elektronkanalisering-kontrasbeelding (EKKB). X-straaldiffraksie-lynprofielontleding en elektronroteringsdiffraksie- (ETD) wanoriëntasie-ontleding is van die algemeenste tegnieke wat gebruik word om die ontwrigtingsdigtheid van 'n materiaal indirek te bepaal.

Alle indirekte tegnieke bevat onsekerheid wat voortspruit uit die tipe model wat gebruik word om die ontwrigtingsdigtheid te bepaal. Daarenteen is direkte STEM-beeldingstegnieke baie tydrowend as gevolg van 'n lang monstervoorbereidingsproses. Hoewel EKKB 'n direkte tegniek is, is die vraag wel hoe akkuraat dit werklik is. Die doel van hierdie navorsing is dus om EKKB kwantitatief met ringvormige donkerveld-RDV-STEM-beelding te vergelyk.

AISI316L vlekvrystaalstawe is aan 'n koudtrekkingsproses onderwerp. Van die stawe is dan uitgegloeï waarna dit aan 'n vermoeidheidstoets van 11M-siklusse onderwerp is. Die EKKB-tegniek is dan op 'n JEOL JSM-7001F skandeer-elektronmikroskoop uitgevoer, terwyl die RDV-STEM op 'n JEOL JEM 2100 LaB6 transmissie-elektronmikroskoop uitgevoer is. Beelde van elke monster is dan op tien verskillende plekke op die monsters geneem. Hierdie beelde is daarna deur sagteware vir beeldontleding gesegmenteer en die ontwrigtingsdigtheid (ρ) bepaal deur gebruik te maak van die lynafsnitmetode en die volgende uitdrukking: $\rho = 2N/Lt$ (waar N = die hoeveelheid kruisings, L = die totale lynlengte, en t = die sondediepte vir EKKB en die dikte vir RDV-STEM).

Die resultate bewys dat 'n soortgelyke beeldkontras deur die twee beeldingstegnieke verskaf is en dat die ontwrigtingskontras in EKKB afhang van die kristaloriëntasie. Ten slotte kan bevestig word dat die EKKB-tegniek resultate vir ontwrigtingsdigtheid lewer wat vergelykbaar is met die resultate wat deur RDV-STEM verkry is.

'n Feromoon-ontdekkingsreis van die wattel-sakwurm

LM Scheepers, B Slippers, ER Rohwer, JD Allison

Bosbou- en Landboubiotegnologie-Instituut (FABI), Universiteit van Pretoria, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Luki-Marie Scheepers **E-pos:** luki-marie.scheepers@fabi.up.ac.za

A journey of pheromone discovery of the wattle bagworm: The wattle bagworm has been a black wattle pest for over a century, partly due to its protective bag. Effective insecticide applications require more precise monitoring techniques, such as pheromones. GC-EAD results confirm that this species' pheromone comprises three novel components. Nanogram-scale gas purification methods are being developed for their elucidation.

Skade word aan swartwattel-plantasies (*Acacia mearnsii*) berokken deur wattel-sakwurmlarwes (*Kotochalia junodi*, Lepidoptera: Psychidae) wat vreet aan groeipunte, of hul sakkies só styf aan boomtakke vasmaak, dat dit 'n hele tak kan ringbas (Sherry en Ossowski, 1967).

Die wattel-sakwurmspesie het gasheerplante verskuif vanaf die soetdoringboom (*Vachellia karroo*) binne die eerste vyftien jaar nadat swartwattel-plantasies in Suid Afrika aangeplant is (Hardenberg, 1917). Swartwattel-plantasies dra sowat R92 miljoen tot die land se ekonomie by (De Wit et al., 2001). Meer as 'n eeu later bly die pesbeheer van die sakwurm steeds 'n uitdaging.

Die sukses van *K. junodi* as insekpespesie, en gevolglik die moeilikheidsgraad van pesbeheer, kan toegeskryf word aan die sakwurm se unieke lewensiklus.

Larwes vorm onreëlmatige sakkies van wattelblare en -takke rondom hulleself met sy, voordat hulle begin vreet. Terwyl die larwes wattelblare vreet, bied die sakkie uitstekende beskerming teen predatore, reën en ook insekdoders. Voor pupering, heg die larwes hulle sakkies, in groepe, stewig aan sterker takke vas met sydrade. Die larwes pupeer aan die einde van die winter waartydens mannetjies metamorfose ondergaan om as mot te ontwikkel, maar wyfies uiteindelik as been-, oog- en vlerklose wurms na vore kom. Eie aan die *Oiketicinae*-subfamilie, bring die wyfiewurm haar volwasse lewe in die sakkie deur. Die mannetjiesmot is aangetrokke tot die feromoon-produiserende wyfie, waarna hy paar met die wyfie deur sy abdomen vier keer sy oorspronklike lengte uit te strek. Die wyfie lê dan tot 3 000 eiers in haar sakkie, en beide ouers sterf. Die klein wurmpies wat uitbroei, word deur sydrade met die wind versprei, wat die voorspelbaarheid van potensiële opvolgende infestasies verhinder (Hardenberg, 1917; Rhinds, 2009).

Die mees doeltreffende huidige pesbestrydingstegniek is die presisie-aanwending van insekdoders aan die larwe voor die vorming van die sakkie. Geen betroubare moniteringsmetode is egter beskikbaar nie, en insekdoders word volgens ongestandaardiseerde waarnemings aangewend. Die gebruik van 'n pesgeproduseerde feromoon is 'n volhoubare, spesie-spesifieke oplossing waarin feromoonlokvalle benut kan word in geïntegreerde pesbeheertoepassings.

Alle spesies in die *Psychidae*-familie kommunikeer deur feromone aangesien die voortplanting van sakwurms afhanklik is van die mannetjiesmotte wat die wyfiewurms opspoor (Rhinds, 2009). Nege sakwurm-feromoonkomponente is voorheen geïdentifiseer (Gries et al. 2006; Leonhardt et al., 1983; Rahmani et al., 2020; Rhinds et al., 1994; Subchev et al., 2000). Slegs die gedrag van die wattle spesie is voorheen ondersoek, waarna bevind is dat die samestelling uit óf twee óf drie onbekende komponente bestaan (Bosman en Brand, 1971).

In hierdie navorsing is gaschromatografie elektro-antennografie-deteksie (GC-EAD) gebruik om die neurologiese response van mot-antennas te bepaal teenoor chemiese stowwe afkomstig van sakwurmwyfies. Die resultate het bevestig dat die feromoon uit drie komponente bestaan. Die fragmenteringspatrone is ondersoek met twee gaschromatografie-massaspektrometrie- (GC-MS) instrumente met verskillende ioniseringstegnieke. Aangesien die komponente onbekend is in die literatuur, is 'n gasfasige enkelkomponent-skeidingstegniek ontwikkel om die identiteit van die drie nuwe komponente te help bepaal. Veldondersoeke het gewys dat klewerige lokvalle motte kan vang. Die feromoonsamestelling word ontwikkel vir gebruik in moniteringsprogramme vir motte wat die tydsberekening van insekdoderaanwending kan verbeter.

Nota: 'n Seleksie van referaatsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Bronnelys

- Bosman, T., Brand J.M., 1971, Biological studies of the sex pheromone of *Kotochalia junodi* Heyl. (Lepidoptera: Psychidae) and its partial purification, *Journal of the Entomological Society of Southern Africa* 34, 73-78.
- De Wit, M., Crookes D., van Wilgen, B., 2001, Conflicts of interest in environmental management: Estimating the costs and benefits of a tree invasion, *Biological Invasions* 3, 167-178. <https://doi.org/10.1023/A:1014563702261>.
- Gries, R., Khaskin, G., Tan, Z.X., et al., 2006, (1S)-1-Ethyl-2-Methylpropyl 3,13-Dimethylpentadecanoate: Major sex pheromone component of Paulownia Bagworm, *Clania variegata*, *Journal of Chemical Ecology* 32, 1673. <https://doi.org/10.1007/s10886-006-9101-4>.
- Hardenberg, C.B., 1917, South African bagworms: their transformations, life-history and economic importance. Part II, *Annals of the Natal Museum* 4, 143-227.
- Leonhardt, B.A., Neal, J.W., Klun, J.A., et al., 1983, An unusual Lepidopteran sex pheromone system in the bagworm moth, *Science* 219, 314-316. <https://doi.org/10.1126/science.219.4582.314>.
- Rahmani, R., Carrasco, D., Svensson, G.P., et al. 2020, Identification and synthesis of putative pheromone components of the threatened salt marsh bagworm moth, *Whittleia retiella* (Lepidoptera: Psychidae), *Journal of Chemical Ecology* 46, 115-127. <https://doi.org/10.1007/s10886-020-01145-x>.
- Rhains, M., Davis, D.R., Price, P.W., 2009, Bionomics of Bagworms (Lepidoptera: Psychidae), *The Annual Review of Entomology* 54, 209-226. <https://doi.org/10.1146/annurev.ento.54.110807.090448>.
- Rhains M., Gries G., Li J., Gries R., et. al., 1994, Chiral esters: sex pheromone of the bagworm, *Oiketicus kirbyi* (Lepidoptera: Psychidae), *Journal of Chemical Ecology* 20, 3083. <https://doi.org/10.1007/BF02033712>.
- Sherry, S.P., Ossowski, L.L.J., 1967, The effect of defoliation by the Wattle bagworm, *Kotochalia junodi* (Heyl.), on growth and bark yield of Wattle plantations. In: WRI Annual Research Report. University of Natal, Pietermaritzburg, 46-52.
- Subchev, M., Toshova, T., Stanimirova, L., et al., 2000, 1-Methylethyl Octanoate, a new Lepidopteran sex pheromone from the bagworm, *Megalophanes viciella*, *Journal of Chemical Ecology* 26, 487-495. <https://doi.org/10.1023/A:1005421808497>.

Het die ouderdom van beeste 'n invloed op die bosluislading?

E Terblans, EMS van Dalen

Departement Dierkunde en Entomologie, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Elizna Terblans **E-pos:** terblans.elizna@gmail.com

Does the age of cattle influence the number of ticks on an animal?: Ticks are important ectoparasites in the livestock production industry and are becoming an enormous problem due to the development of resistance to chemical control methods. Therefore, alternative methods such as host resistance are urgently needed as this is the future of controlling ticks and limiting losses.

Bosluiise is belangrike ektoparasiete wat verantwoordelik is vir enorme verliese in die veeproduksiebedryf indien hulle nie beheer word nie. Een van die bekendste metodes vir bosluisbeheer is chemiese beheer deur middel van akarisede, maar met die nadeel dat die bosluis weerstandbiedendheid teen die aktiewe bestanddele kan ontwikkel. Die enorme impak van bosluis in die veebedryf maak die noodsaaklikheid om alternatiewe bosluisbeheermetodes te ontwikkel uiters belangrik. Die natuurlike weerstand van beeste teen bosluis, bekend as gasheerweerstand, is een moontlike alternatiewe bosluisbeheermetode. Gasheerweerstand word beïnvloed deur baie verskillende eienskappe van die gasheerdier, wat oorerflik en nie-oorerflik kan wees. Een van die bekendste eienskappe wat gasheerweerstand beïnvloed, is die verskillende beesrasse. Oor die algemeen word geglo dat inheemse beesrasse (*Bos indicus*) 'n hoër vlak van weerstand teen bosluis het as Europese beesrasse (*Bos taurus*). Ander fisiese eienskappe van beeste wat die graad van gasheerweerstand kan beïnvloed, sluit in haarlengte, haarkleur en veldikte.

Nog 'n aspek wat in ag geneem kan word, is die rol wat verskillende ouderdomme van beeste in 'n spesifieke beesras op gasheerweerstand kan hê. In hierdie studie is drie verskillende ouderdomsgroepe in elk van drie beesrasse, die Afrikaner, Angus en Afrigus, met mekaar vergelyk. Alle sigbare bosluis is een keer per maand van agt beeste in drie ouderdomsgroepe van elke ras verwyder oor 'n tydperk van sewe maande. Daarna is statistiese analises uitgevoer om te bepaal of daar 'n betekenisvolle verskil tussen die bosluisladings in elke ouderdomsgroep gevind is.

Statistiese analise het 'n betekenisvolle verskil in die bosluislading van die Afrikaner-beeste in vergelyking met die ander twee rasse getoon. Daar is egter geen betekenisvolle verskil tussen die bosluisladings op die Angus-beeste in vergelyking met die Afrigus-beeste gevind nie. Die Afrikaner- en Afrigus-beeste het verder 'n betekenisvolle verskil in die bosluislading tussen al drie ouderdomsgroepe getoon en die bosluisladings het toegeneem met ouderdomsgroeperings van jonk na ouer. Die Angus-beeste het egter geen betekenisvolle verskil in die bosluislading tussen diere jonger as 'n jaar en diere van een tot vyf jaar, sowel as tussen diere van een tot vyf jaar en diere ouer as vyf jaar opgelewer nie. Daar was egter betekenisvol meer bosluis op diere ouer as vyf jaar in vergelyking met die diere jonger as 'n jaar.

Dit dui daarop dat die ouderdom van diere wel die bosluislading op die diere kan beïnvloed. Ouderdomsverwante immuniteit teen bosluisoordraagbare siektes is welbekend, met die jonger diere wat gewoonlik minder deur hierdie siektes benadeel word in vergelyking met ouer diere. Die data wat verkry is, laat die vraag ontstaan of die ouderdomsverwante immuniteit teen bosluisoordraagbare siektes die gevolg is van die immuniteit van die diere, of van lae bosluisbesmettings, wat dalk te laag is om 'n beduidende uitwerking op die oordrag van siektes te hê. Selfs 'n kombinasie van beide laasgenoemde aspekte kan moontlik wees. Hierdie inligting oor gasheerweerstand van diere speel 'n belangrike rol in die strukturerings van 'n geïntegreerde bosluisbeheerplan wat die toekoms van bosluisbeheer is.

Ni-bevattende bimetaal-nanodeeltjies as katalisators vir elektrochemiese waterspleting

M van den Berg,¹ R Malgas-Enus,² CGCE van Sittert¹

¹Laboratorium vir Toegepaste Molekuulmodellering, Navorsingsfokusarea: Chemiese Hulpbronveredeling, Noordwes-Universiteit, Suid-Afrika

²Departement Chemie en Polimeerwetenskappe, Universiteit van Stellenbosch, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: CGCE van Sittert **E-pos:** Cornie.VanSittert@nwu.ac.za

Ni-containing bimetallic nanoparticles as catalysts for electrochemical water splitting: Three unique Ni-containing bimetallic bulk structures for each secondary metal used were identified and optimised. A nanoparticle was cut from each optimised bulk structure and optimised. Structural and electronic properties and stability and activity for electrochemical water splitting of each of the nanoparticles was investigated. All calculations were done with CASTEP.

Die waterstofvrystellingsreaksie (WVR) kan in 'n suur of 'n alkaliese medium plaasvind. Die alkaliese WVR is van groot belang vir waterelektroliseerders omdat kontaminasie van H₂ en korrosie van waterelektroliseerders en elektrodes uitgeskakel word (Li et al., 2020). Die alkaliese WVR benodig egter ekstra energie om die kovalentbindings in die watermolekule te breek. Hierdie vereiste van die alkaliese WVR veroorsaak dat die reaksiekinetika vir die dissosiasie van water vertraag word (Li et al., 2020). Dus is dit krities om meer doeltreffende alkaliese WVR-katalisatore te ontwerp om die energieversperring te verlaag en die waterstofadsorpsie vir die H-H-bindingsvorming te verbeter. Alhoewel verskeie hoogsaktiewe nie-edelmetaalverbindinge as katalisatore in 'n alkaliese medium vir die suurstofvrystellingsreaksie (SVR) geïdentifiseer is (Zeng & Zhang, 2010; Greeley et al., 2006), is daar 'n gebrek aan nie-edelmetaal-ekwivalente vir die waterstofvrystellingsreaksie (WVR). Hierdie gebrek vertraag die ontwikkeling van koste-effektiewe waterspletingstoestelle in alkaliese oplossings (Gong & Dai, 2015). Nikkel is al bykans 'n eeu gelede as 'n katalisator vir SVR en WVR in alkaliese oplossing geïdentifiseer (Gong & Dai, 2015; Stoney, 1909). In 'n poging om die elektrokatalitiese aktiwiteit en stabiliteit van Ni vir bogenoemde reaksies te verhoog kan twee moontlike benaderings gebruik word, naamlik die byvoeging van 'n sekondêre metaal of die verhoging van die kontakoppervlakte. In hierdie navorsing is die "Site Occupation Disorder (SOD)"-program gebruik om verskillende Ni-bevattende bimetaalstrukture, naamlik Ni-Co, Ni-Cr, Ni-Mn en Ni-Zn, te bou. Unieke konfigurasies vir elke Ni-bevattende bimetaalstruktuur is met behulp van SOD geïdentifiseer. Drie unieke konfigurasies, een met die hoogste, laagste en middelste relatiewe energie, vir elke bimetaal is geïdentifiseer en geoptimeer. 'n Bimetaal-nanodeeltjie met 55 atome is uit elk van die geoptimeerde uitgebreide strukture gesny en weer geoptimeer met behulp van die CASTEP-module binne Material Studio 2020-sagteware. Elkeen van die nanodeeltjies se strukturele en elektroniese eienskappe, sowel as stabiliteit en aktiwiteit vir elektrochemiese waterspleting is ondersoek. Die benadering in hierdie navorsing stel navorsers in staat om 'n groter, herhaalbare spektrum van verskillende nanodeeltjies met bimetaalstrukture vir die ontwikkeling van WVR-katalisatore te ondersoek.

Bronnelys

- Gong, M., Dai, H., 2015, A mini review of NiFe-based materials as highly active oxygen evolution reaction electrocatalysts, *Nano Research* 8, 23-39. <https://doi.org/10.1007/s12274-014-0591-z>.
- Greeley, J., Jaramillo, T.F., Bonde, J., et al., 2006, Computational high-throughput screening of electrocatalytic materials for hydrogen evolution, *Nature materials* 5, 909-913. <https://doi.org/10.1038/nmat1752>.
- Li, Z., Niu, W., Yang, Z., et al., 2020, Boosting alkaline hydrogen evolution: the dominating role of interior modification in surface electrocatalysis, *Energy and Environmental Science* 13, 3110-3118. <https://doi.org/10.1039/D0EE01750G>.
- Stoney, G.G., 1909, The tension of metallic films deposited by electrolysis, *Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 82, 172-175. <https://doi.org/10.1098/rspa.1909.0021>.
- Zeng, K., Zhang, D., 2010, Recent progress in alkaline water electrolysis for hydrogen production and applications, *Progress in energy and combustion science* 36, 307-326.4 <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2009.11.002>.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Tande: 'n Geheime argief

R van der Merwe, C Lewis, D Codron

Departement Dierkunde en Entomologie, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Runè van der Merwe **E-pos:** runeVDM3@gmail.com

Teeth: A secret archive: Stable isotope analysis of incremental samples along the growth axis of a tooth reveals a chronological archive of isotope change over time measured during the period of tooth formation. Dietary niche variation and specialisation of mammalian herbivores were investigated. Results reveal considerable variation in the levels of dietary specialisation.

Tande vorm inkrementeel, laag vir laag, sonder enige hermodullering. Stabiele isotope word in hierdie lae vasgevang soos 'n organisme voed. 'n Hoë-resolusie rekord van isotopiese verandering met verloop van tyd wat fisiologiese, omgewings- of dieetvoorvalle gedurende 'n organisme se leeftyd aandui, word dus in tande bewaar. Die koolstofisotopiese samestelling van 'n dier se weefsel volg dié van die kos wat ingeneem word, die suurstofisotopiese samestellings word hoofsaaklik beheer deur oppervlakwater of die water in kos wat ingeneem word, terwyl stikstofsamstellings meer aanduidend is van die klimaat en gehalte van die dieet. Dit wil sê stabiele isotoopanalises van inkrementele monsters langs die groei-as van die tand, onthul 'n chronologiese argief van isotoopverandering oor tyd gemeet tydens die tydperk van tandvorming. Die feit dat tande 'n geharde materiaal is en vir baie jare behoue bly, maak die bestudering van diëte van uitgestorwe diere moontlik. Die gebruik van tande in stabiele isotoopanalises het baie toepassings, onder andere die bepaling van die trofiese vlak van 'n organisme en die primêre bron van voedsel, herkoms- en migrasiepatrone van organismes, bepaling of wanvoeding tot uitsterwing van spesies bygedra het, en selfs om patrone van borsvoeding en speening te ondersoek. In hierdie navorsing is inkrementele monsterneming van tande uitgevoer en aan stabiele koolstof- en stikstof-isotoopanalises onderwerp om dieetvariasie en ook -spesialisasie van soogdierherbivore te ondersoek. Tandmonsters van 'n verskeidenheid spesies, wat oor 'n liggaamsmassagradiënt strek en verteenwoordigend is van die drie voedingskategorieë, naamlik blaarvreters, grasvreters en intermediêre vreters, is tydens hierdie navorsing gebruik. Vir die tandmonsters is dentienpoeier in 'n reeks opeenvolgende inkremte verwyder deur langs die groei-as van die tand te boor. Elke mikromonster is chemies behandel om kollageen te isoleer en die monster te demineraliseer, waarna dit gevriesdroog is. Kollageenmonsters is individueel geweeg, in klein tinkapsules omsluit en vir isotoopsamstellings ontleed. Standaard ellipsgebiede, gekorrigeer vir klein steekproefgoottes, is gebruik om die isotopiese dieetnis van elke spesie te bepaal. Die grafiese voorstelling van tandprofile (dit wil sê die verandering van koolstof- en stikstofsamstellings oor tyd) bied 'n eenvoudige manier om dieetvariasie binne 'n individu asook tussen individue voor te stel. Die kwantifisering van hierdie variasie was moontlik deur variasie-komponentanalise. Daar kon onderskei word tussen hoeveel dieetvariasie daar in elke individu is, asook hoeveel variasie daar tussen individue van dieselfde spesie is (meer variasie is 'n aanduiding van meer spesialisasie). Resultate toon groot variasie in die niswydtes van herbivoorbevolkings, asook dat die vlakke van dieetspesialisasie aansienlik tussen hierdie spesies verskil. Byvoorbeeld, vir die swartwitpensindividue het individuele nisspesialisasie nie tot die grootte van die isotopiese nis bygedra nie, terwyl in ander spesies soos swart wildebeeste, spesialisasie tot 99% van die isotopiese niswydte beskryf het. Deur hierdie toepassing vir veelvuldige spesies en individue te gebruik, kan isotopiese nisvariasie bestudeer word en afleidings oor die vlak van hulpbronverdeling en -mededinging, asook die saambestaan van bevolkings gemaak word. Die bestudering van diëte oor tyd, kan lig werp op kwessies soos dieetaanpassings, voedingspatrone, nisverdeling, ekostelselsamestelling, uitsterwings en help om meer begrip van die struktuur en geskiedenis van bestaande gemeenskappe en ekostelsels te verkry.

Nota: 'n Seleksie van referaatsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Perowskiete van alkalimetaalhaliedhibriede: Strukture en eienskappe

HJ van der Poll, M Rademeyer

Departement Chemie, Universiteit van Pretoria, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Hendrik van der Poll **E-pos:** u16012594@tuks.co.za

Hybrid halide alkali metal perovskites: Structures and properties: In this research, hybrid halide alkali metal perovskites containing either piperazinium (piperazine-1,4-dium) or dabkonium (1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane-1,4-dium) were studied crystallographically and subsequently, their optical band gaps were measured. Specifically, the alkali metal halides NaCl, NaBr, NaI, KCl, KBr, KI, CsCl, CsBr or CsI were combined with the aforementioned organic dications.

Die veld van hibriedmetaalhaliedperowskiet-materiale het uitgebreide aandag oor die afgelope twee dekades geniet, spesifiek na aanleiding van die toepassing van die materiale in opto-elektroniese tegnologie, soos perowskiet-sonelle.

In hierdie navorsing is hibriede van die alkalimetaalhaliedperowskiet-familie kristallografies ondersoek, waar die materiale óf piperasinium (piperasien-1,4-dium) óf dabkonium (1,4-diasabisiklo[2.2.2]oktaan-1,4-dium) katione bevat. Die navorsing het spesifiek gefokus op die alkalimetaalhaliede van NaCl, NaBr, NaI, KCl, KBr, KI, CsCl, CsBr en CsI in kombinasie met die voorgenoemde organiese katione. Bykomend is die optiese bandgapings van die materiale bepaal deur die gebruik van diffusieweerkaatsing-spektroskopie.

Sestien perowskiet-strukture is kristallografies gekarakteriseer, waarvan nege nuut is. Die nege nuwe strukture sluit agt dabkonium bevattende strukture en een piperasinium bevattende struktuur in. Die dabkonium-reeks het een van twee strukturele dimensionaliteite getoon, óf 'n 3-D-perowskiet-struktuur (ses in totaal) óf 'n 1D ABX₃-tipe perowskiet-struktuur (vyf in totaal). Soortgelyk het die piperasinium-reeks ook óf 'n 3-D struktuur (vier in totaal) óf 'n 1-D (100)-tipe struktuur (een struktuur) opgelewer. Dit is opmerklik dat die piperasinium-strukture oor die algemeen met watermolekules in die kristalrooster gekristalliseer het, terwyl dit nie die geval in die dabkonium-reeks was nie.

Verdere waarnemings het getoon dat die dabkonium-reeks in 'n verskeidenheid fases gekristalliseer het, onder meer monoklinies, ortorombies, trigonaal en heksagonaal, terwyl die piperasinium-strukture slegs in een van twee fases gekristalliseer het (3-D-strukture in die ortorombiese fase en die 1-D-struktuur in die monokliniese fase). Algemene strukturele neigings is in beide hierdie twee reeks verbindings geïdentifiseer.

Die bandgapings van al sestien materiale was groter as 3.00 eV en die materiale is dus nie geskik as die aktiewe laag in perowskiet-sonelle nie. Desnieteenstaande kan die materiale geklassifiseer word as óf halfgeleiers (bandgapings kleiner as 5.0 eV) óf isoleerders (bandgapings groter as 5.0 eV).

Al het die materiale beperkte toepassing as die aktiewe laag in perowskiet-sonelle, toon hulle potensiaal as elektron geleidende materiale en kan dus steeds vir toepassing in perowskiet-sonelle oorweeg word.

Die mees merkwaardige aspek van die navorsing was die strukturele- en eienskapbeheerbaarheid wat deur die dabkonium-reeks vertoon is. Die struktuur en dus ook die bandgaping van die materiaal kon aangepas word deur die voorlopersamestelling (dus reaksiemengsel wat tot struktuurvorming lei) sorgvuldig te beheer. Hierdie beheerbaarheid is 'n gesogte eienskap in die veld van materiaalwetenskappe en laat groot ruimte vir verdere ontwikkeling.

Ter afsluiting, verskeie opsies vir toekomstige navorsing is tydens die navorsing geïdentifiseer, onder meer die sintetiese uitbreiding, bepaling van verdere eienskappe, en ander potensiele opto-elektroniese toepassings. Die perowskiet-familieboom groei dus sterk en bied elke dag 'n nuwe bloeisel vir wetenskaplikes om te pluk.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Die ontwikkeling van die T-hoek as 'n vastetoestand-parameter vir die meting van die steriese massa van N-substituenten in bis(difenilfosfien)amien digoud(I) komplekse

C van Staden, M Schutte-Smith, L Moskaleva, DV Kama, HG Visser

Departement Chemie, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Christo van Staden E-Pos: christovanstaden00@gmail.com

The development of the T-angle as a solid-state parameter for the measurement of the steric bulk of N-substituents in bis(diphenylphosphino)amine digold(I) complexes: The T-angle is a new solid-state parameter developed to quantify the steric bulk of N-substituents in PNP ligands. It is applied on optimised structures to establish a trend between the size of the steric bulk of the N-substituent and the Au-Au distance as a measure of the aurophilic interactions in bis(diphenylphosphino)amine digold(I) complexes.

Die Tolman-keëlhoek is 'n eenvoudige manier om die steriese massa van verskeie tersiêre fosfiene te kwantifiseer. Cloete, et al. (2013) het hierdie konsep aangepas om op bis(difenilfosfien)amien (PNP) -ligande van toepassing te wees. In die aangepaste weergawe van die keëlhoek is die N-substituent die steriese massa wat gekwantifiseer word. Die aangepaste weergawe word die effektiewe Tolmangebaserde keëlhoek genoem. In dieselfde studie het hulle 'n korrelasie tussen die grootte van die steriese massa en die katalitiese selektiwiteit van komplekse met die ligande vasgestel. 1-Hekseen of 1-okteen vorm uit die trimerisasie van etileen deur die gebruik van katalisators. Die selektiwiteit van hekseen- of okteen-formasie word deur die katalisator bepaal. Hulle het gevind dat hoe groter die keëlhoek is, hoe groter die opbrengs van die 6-lid-koolstofprodukte is, terwyl die opbrengs van die 8-lid-produkte verminder (Bollmann, et al., 2004; Fan, et al., 2023; Overett, et al., 2012; Shoji & Freidrich, 2012; van der Vlugt & Reek, 2009). Die studie het die manipuleringspotensiaal van die ligande bevestig; dit is ook die motivering vir die gebruik van hierdie ligande in hierdie navorsing. 'n Nuwe benadering tot die evaluering van Au-Au-interaksies is aangepak. Die hoofdoel is om die Au-Au-afstande as 'n maatstaf vir die Au-Au-interaksie te manipuleer. Die Au-Au-afstand vir hierdie interaksies is tussen 2.5 Å en 3.5 Å. Daar is drie verskillende wyses waarop die interaksies geklassifiseer kan word: (i) vry interaksie, (ii) semi-geslote interaksie en (iii) geslote interaksie (Schmidbaur & Schier, 2012). Deur twee goudatome aan die bidentaat-PNP-ligande te koppel, vorm 'n sikliese struktuur met geslote Au-Au-interaksies. Verskeie komplekse is gesintetiseer met 'n reeks PNP-ligande met N-substituenten wat varieer in die grootte van hul steriese massa. Enkelkristaldata vir van die komplekse is opgeneem. Die data vir die kristalstrukture is as invoerkoördinate vir die optimalisering van die komplekse gebruik deur van berekeningschemie gebruik te maak. Die reeks van N-substituenten is vergroot om 'n beter idee van die manipulasie te verkry. Die keëlhoek wat deur Cloete et al. (2013) voorgestel is, is 3-D/konies van aard omdat die navorsing in 'n vloeistoestand gedoen is en daarom kan die N-substituent roteer. Hier word vastetoestand-strukture ondersoek en sal 'n 2-D hoek meer van toepassing wees. Die aangepaste weergawe van die effektiewe Tolmangebaserde keëlhoek word die T-hoek genoem. Deur na verskeie faktore te kyk wat die manipulasie van die Au-Au-interaksie beïnvloed, is die komplekse in groepe verdeel. Die verdeling is gebaseer op die posisie van die fenielringe in die verskeie komplekse. Verskeie korrelasies tussen die faktore en die Au-Au-afstande is vasgestel.

Bronnelys

- Bollmann, A., Blann, K., Dixon, J., et al., 2004, Ethylene Tetramerization: A New Route to Produce 1-Octene in Exceptionally High Selectivities, *Journal of the American Chemical Society* 126, 14712-14713. <https://doi.org/10.1021/ja045602n>.
- Cloete, N., Visser, H., Engelbrecht, I., et al., 2013, Ethylene Tri- and Tetramerization: a Steric Parameter Selectivity Switch from X ray Crystallography and Computational Analysis, *Inorganic Chemistry* 52, 2268–2270. <https://doi.org/10.1021/ic302578a>.
- Fan, H., Yang, X., Ma, J. et al., 2023, Computer-assisted design of asymmetric PNP ligands for ethylene tri-/tetramerization: A combined DFT and artificial neural network approach, *Journal of Catalysis* 418, 121-129. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2023.01.011>.
- Overett, M., Blann, K., Bollmann, A., et al., 2005, Ethylene trimerisation and tetramerisation catalysts with polarsubstituted diphosphinoamine ligands, *Chemical Communications* 5, 622-624. <https://doi.org/10.1039/b412432d>.
- Schmidbaur, H., Schier, A., 2012, Aurophilic interactions as a subject of current research: an up-date, *Chemical Society Review* 41, 370-412. <https://doi.org/10.1039/C1CS15182G>.
- Shoji, M., Freidrich, H., 2012, Heterogenization of Some PNP Ligands for the Oligomerization of Ethylene, *South African Journal of Chemistry* 65, 214-222. <http://journals.sabinet.co.za/sajchem/>.
- Van der Vlugt, J.I., Reek, J.N., 2009, Neutral tridentate PNP ligands and their hybrid analogues: Versatile non-innocent scaffolds for homogeneous catalysis, *Angewandte Chemie International* 48, 8832-8846. <https://doi.org/10.1002/anie.200903193>.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Gebruik van die Suid-Afrikaanse medisinale plant, *Gunnera perpensa*, in 'n soeke na potensiële SARS-CoV-2-behandelings

I Wessels, L Invernizzi, VJ Maharaj

Departement Chemie, Universiteit van Pretoria, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Ilanie Wessels **E-pos:** u19065923@tuks.co.za

Use of the South-African medicinal plant, *Gunnera perpensa*, in search of potential treatments for SARS-CoV-2: Using indigenous knowledge of medicinal plants, *Gunnera perpensa* was selected for analysis in search of compounds showing antagonism to COVID-19. These were isolated by means of advanced, hyphenated analytical techniques. The biological activity of these compounds against COVID-19 was established using enzyme-based as well as whole-cell bioassays.

Die doel van hierdie projek was om *G. perpensa* te ondersoek vir nuwe verbindings wat potensiaal toon in die behandeling van Covid-19. Hierdie doel is bereik deur van 'n hoë-deurset-sisteem gebruik te maak vir die vinnige identifisering en isolasie van verbindings waarvan die aktiwiteit teen Covid-19 met behulp van biologiese toetse vasgestel is. Die metode het begin met 'n metanol/dichlorometaan-ekstraksie van gedroogte *G. perpensa* plantmateriaal om 'n ekstrak te verkry. Die ekstrak is gefraksioneer op C8 SPE-kolomme. Elutie met 'n veranderende gradiënt van 'n verskeidenheid oplosingsmiddels is uitgevoer. Die onderskeidelike semi-suiwer fraksies is opgevang en, saam met die ekstrak, na die Wistar Instituut in Philadelphia gestuur vir AlphaScreen- en Mpro- biologiese toetse. Die aktiwiteit teen die virale-S-proteïen/menslike-ACE2-proteïen- (AlphaScreen) verbinding is bepaal, sowel as aktiwiteit teen die virale Mpro-proteïen. Daar is bevind dat 'n semi-suiwer fraksie die meeste aktiwiteit getoon het in beide biologiese toetse. Hierdie fraksie is verder geanaliseer deur UPLC-QTOF-UV/MS waaruit die hoofverbindings, teenwoordig in die fraksie op grond van akkurate massa sowel as fragmentasie-patrone, tentatief geïdentifiseer is. Twee verbindings, lespedezic-suur en venusol, is op grond van hulle molekulêre massa en UV-absorpsie deur verskeie chromatografiese metodes (insluitend blits-chromatografie en HPLC-UV/MS) geïsoleer. Die verbindings is daarna finaal geïdentifiseer as lespedezic-suur en venusol deur ¹H-KMR en ¹³C-KMR. Die aktiwiteit van die twee verbindings is vasgestel deur middel van ensiem-biologiese toetse soos hierbo genoem, sowel as heel-sel biologiese toetse deur die Universiteit van Basel, Switserland. Die resultate het getoon dat die IK50 van lespedezic-suur teen die Spike/ACE-2 verbinding 0.04 µg/mL is, terwyl die IK50 van venusol 0.07 µg/mL is. Verder is bevind dat die IK50 van lespedezic-suur teen die Mpro- proteïen 90 µg/mL is, en die IK50 vir venusol 65 µg/mL is. Heel-sel biologiese toetse het bevind dat lespedezic-suur 100% inhibisie van die groei van die Wuhan-variant bereik teen 'n konsentrasie van 50 µg/mL en 75% inhibisie teen 'n konsentrasie van 16 µg/mL. Alhoewel aktief teen die Spike/ACE2-verbinding, het venusol geen aktiwiteit in heel-sel toetse getoon nie.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).

Inligting vir Outeurs en Lesers

Oorsig, doelwitte en gehoor

Die *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie (SATNT)* is 'n oop toegang, portuurbeoordeelde tydskrif wat manuskripte in Afrikaans aanlyn en aan die einde van elke jaar as gedrukte kopie publiseer. Die *SATNT* het ook 'n Engelse titel, *The South African Journal of Science and Technology* en outeurs mag ook manuskripte in Engels aanbied. Die Engelse manuskripte sal slegs aanlyn gepubliseer word. Engelse manuskripte sal in Afrikaans vertaal word deur Afrikaanssprekende outeurs. Hulp sal verleen word aan outeurs wat nie Afrikaans magtig is nie.

Authors who do not understand Afrikaans, should contact the administrative assistant for an English copy of the general background and instructions to authors or they can visit the website <http://www.satnt.ac.za/index.php/satnt/about/submissions> for Author Guidelines.

Die tydskrif publiseer navorsing in die wye veld van die natuurwetenskappe. Die doel van die tydskrif is om die uitruil van wetenskaplik-gefundeerde inligting te versprei en te fasiliteer. 'n Tweede doel is die uitbou van Afrikaanse wetenskaplike vaktaal en om navorsers die geleentheid te gee om in Afrikaans te publiseer.

Alle artikels, wat deur die *SATNT* gepubliseer word, moet aan 'n spesifieke formaat, soos in die instruksies vir skrywers uiteengesit, voldoen.

Eweknie-evalueringsproses

Alle manuskripte wat aan die *SATNT* voorgelê word, ge-evalueer deur ten minste twee keurders uit die betrokke veld.

Publikasie gereeldheid en verspreiding

Alle manuskripte wat in die *SATNT* gepubliseer is, is aanlyn beskikbaar by <http://www.satnt.ac.za/>. Artikels word voortdurend, sodra dit vir publikasie gereed is, op hierdie webtuiste gepubliseer. Sodoende poog die *SATNT* om die publikasieproses, vanaf indiening van die manuskrip tot die beskikbaarstelling van die artikel, te bespoedig. Die aanlyn weergawe van die tydskrif is in die vorm van 'n oop-toeganklike publikasie. Die gedrukte kopieë word aan die intekenaars gestuur. Kontak ons asseblief by finansies@akademie.co.za om in te teken.

Gids vir voorbereiding en voorlegging van manuskrip

Alle manuskripte moet aanlyn by <http://www.satnt.ac.za/> ingedien word. Besoek <http://www.satnt.ac.za/> en klik op 'New Submission'. Indien u alreeds as gebruiker geregistreer is, kan u by die tydskrif se webtuiste inteken om met die voorleggingsproses voort te gaan. Indien u egter nog nie as gebruiker geregistreer het nie, moet u asseblief eers registreer om voort te kan gaan.

Voltooi al die vereiste velde. Dit is belangrik om die 'Author' blokkie te merk om u in staat te stel om manuskripte op te laai. (U kan ook as 'n eweknie-evalueerder geregistreer.) Teken met u gebruikersnaam en wagwoord in en volg die stappe om u manuskrip op te laai.

Die tydskrif beskik oor 'n volledige stel riglyne vir outeurs wat noukeurig gevolg moet word voordat 'n manuskrip vir evaluasie voorgelê kan word. Hou asseblief in gedagte dat die leserspubliek wyer as die betrokke dissipline strek. Oorsigartikels (gewoonlik nie langer as 6000 woorde nie) is baie welkom. Outeurs word aangeraai om eers die Hoofredakteur te kontak voordat 'n oorsigartikel voorberei word. Die oorsigartikel moet verslag doen oor belangrike en insiggewende verwikkelinge in 'n afdeling van die wetenskap en aanbevelings maak vir verdere navorsing om die geïdentifiseerde gapings aan te spreek.

Verwysing

Die *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* (afgekort as *SATNT*) word gemerk en gewaarmerk as *SATNT*. Amptelik word na die tydskrif as die *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* verwys.

Kopiereg

Die outeur(s) behou kopiereg op gepubliseerde artikels. Hierdie publikasie is ingevolge die *Creative Commons Attribution*-lisensie gelisensieer. Alle pogings is aangewend om die belange van die kopiereghouer te beskerm. Indien kopiereg onopsetlik oortree is, bied die uitgewer verskoning aan. Daar word verder onderneem om, sonder enige versuim, 'n regstelling te publiseer indien hierdie uitgawe herdruk sou word.

Verspreiding en Indeksering

Die volledige teks van elke artikel word onmiddellik en permanent ná publikasie in die *SATNT* in die argiewe van die volgende groot bibliografiese databasisse gestoor:

- DHET SA List
- Thomson Reuters Web of Science Other Coverage, BIOSIS Previews
- Directory of Open Access Journals (DOAJ)
- EBSCO Host
- GALE, CENGAGE Learning
- Google Scholar
- ProQuest
- Norwegian Register for Scientific Journals, Series and Publishers, Level 1
- Portico
- AOSIS Library
- SA ePublications, Sabinet
- South African Government Libraries

Akkreditering

Die *SATNT* voldoen aan die kriteria gestel deur die Departement van Hoër Onderwys en Opleiding (DHOO) vir publikasiesubsidie aan van goedgekeurde Suid-Afrikaanse tydskrifte soos deur die DHOO gehandhaaf).

Dit word deur die DHOO as 'n navorsingspublikasie gelys.



'n Publikasie van: Die Suid-Afrikaanse Akademie vir Wetenskap en Kuns

Geborg deur: Hiemstra Trust

<http://www.akademie.co.za>

Erkenning aan evalueerders

Die redaksionele span van die *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* erken hiermee die waardevolle, belangrike rol wat eweknie-evalueerders tydens die algehele publikasiesproses vervul – nie alleen in die vorming van individuele manuskripte nie, maar ook in die vestiging van die kredietwaardigheid en aansien van ons joernaal. Ons is daartoe verbind om alle oorspronklike, innoverende bydraes, wat vir publikasie aanvaar word, tydig te publiseer. Daarom is die identifisering en keuse van kundige evalueerders, met belangstelling in die onderwerpe wat deur elke manuskrip gedek word, 'n onontbeerlike element om 'n tydige, produktiewe eweknieevalueringsproses te verseker.

Ons wil graag van hierdie geleentheid gebruik maak om die volgende evalueerders vir hulle bydrae tot die vorming van hierdie uitgawe van die *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* te bedank:

Dirk Conradie
Phillip Crouse
Leon Du Preez
Walter Focke
Emmanuel Freeman
Berna Gerber
Roland Goldberg
Phillipus Stephanus Heyns
Adiél Holtzhauzen
Ivan G Ivanov
Johann Kirsten
Gideon Kotzé
Ted Kroon
Andries Kruger
HS (Salome) Kruger

Laurette Marais
Daniel Pienaar
Herman Potgieter
Hermann Pretorius
André Roodt
Jannie Rossouw
TB Scheffler
Christien Strydom
Elize Symington
Jeannie van der Linde
Tertia van Eeden
Cornie van Sittert
Elize M van Staden
Kobus Wagener

Ons waardeer u tyd en bydrae tot die suksesvolle evaluasie van die artikels.

In 'n poging om die keuse van geskikte eweknie-evalueerders vir die *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* te vergemaklik, versoek ons u om 'n oomblik af te staan om u elektroniese portfolio by <http://www.satnt.ac.za> op datum te bring. Dit sal ons in staat stel om u belangstellingsveld en kundigheid beter te takseer sodat die voorgelegde manuskripte aan die geskikte eweknie-evalueerders toegeken kan word. Indien u belangstel om 'n evalueerder te word, word u versoek om die tydskrif se webwerf te besoek om as evalueerder te registreer. Om toegang tot u besonderhede op die webwerf te verkry, moet die volgende stappe gevolg word:

1. Teken vir die aanlynjoernaal in by:
<http://www.satnt.ac.za>

2. Kies in u 'user home' [<http://www.satnt.ac.za/index.php/satnt/user>] 'edit my profile' onder die opskrif 'my account' en tik alle relevante besonderhede, bio-verklaring en evalueringsbelangstellings in.

Dit is goeie evalueerderspraktyk om u persoonlike besonderhede gereeld op datum te bring om te verseker dat ons gedurende u termyn as evalueerder vir die *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* met u in aanraking kan kom. Moet asseblief nie huiwer om ons te kontak vir verdere navrae nie.

Uitgewer:
Medpharm Publikasies
info@medpharm.co.za
Tel: +27 12 664 7460



Doel van die SA Akademie

Die Suid-Afrikaanse Akademie vir Wetenskap en Kuns – oorspronklik *De Zuid-Afrikaanse Akademie voor Taal, Letteren en Kunst* – is in 1909 gestig. Destyds was die doel om na die ontwikkeling van die Nederlandse (insluitende die Afrikaanse) taal, letterkunde, kuns, geskiedenis en oudheidkunde in Suid-Afrika om te sien en om leiding in hierdie sfeer te gee. Vandag is die Suid-Afrikaanse Akademie vir Wetenskap en Kuns 'n multidisiplinêre organisasie.

Missie en doelstellings van die SA Akademie

Die missie en algemene doelstellings van die Akademie is die bevordering van die wetenskap, die tegnologie en die literatuur in Afrikaans en die kunste, asook die bevordering van die gebruik en die gehalte van Afrikaans, primêr binne Suid-Afrika. Voorts behels dit ook die lewering van diens aan die samelewing. Hierdie multidisiplinêre organisasie wat die belange van alle Suid-Afrikaners wil dien, streef na uitnemendheid, billikheid, hoë wetenskaplike, morele en demokratiese waardes.

Aktiwiteite van die SA Akademie

Binne die raamwerk van sy missie en doelstellings ondersoek die Akademie deurlopend aktuele sake van openbare belang, neem standpunt in, en tree adviserend, fasiliterend en meningsvormend in sake van nasionale belang op.

Meer inligting is beskikbaar by www.akademie.co.za

Oop toegang by www.satnt.ac.za

Hierdie publikasie is gratis in volkleur beskikbaar by www.satnt.ac.za