



KONINKLIJKE NEDERLANDSE  
AKADEMIE VAN WETENSCHAPPEN

LEVENSBERICHTEN  
EN HERDENKINGEN

2018

## **Wolfgang Max Hugo Sachtler**

8 november 1924 – 8 januari 2017



Wolfgang Sachtler is 8 januari 2017 op 92-jarige leeftijd overleden te Evanston in de Verenigde Staten, waar hij sinds 1983 woonde. Hij was geboren op 8 november 1924 te Delitzsch, nabij Dresden, in Duitsland. In 1979 werd hij benoemd tot lid van de Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen (KNAW).

Het professionele leven van Sachtler kan hoofdzakelijk worden verdeeld in twee gedeelten. Gedeeltelijk heeft het zich afgespeeld in Nederland, waar Sachtler vanaf 1952 tot 1983 woonde en werkte. In die periode was hij als directeur van Fundamentele Research werkzaam bij het Koninklijke/Shell Laboratorium Amsterdam (KSLA). Hij was tegelijkertijd als buitengewoon hoogleraar katalyse verbonden aan de Universiteit Leiden (1963-1984). De tweede periode speelde zich af in de Verenigde Staten. Van 1984-1996 was Sachtler als V.N. Ipatieff Professor verbonden aan de Northwestern University te Evanston, waar hij ook na zijn emeritaat tot 2009 actief bleef. Zijn wetenschappelijk werk heeft de fundering geleverd voor wat nu moleculaire heterogene katalyse wordt genoemd.

Wolfgang Sachtler was een helder denkend en strijdvaardig persoon, waardoor hij een belangrijke invloed heeft gehad op het heterogene katalyseonderzoek in de periode van de overgang van heterogene katalyse van vooral empirische technologie naar fysische chemisch wetenschap. Zijn aanpak was die van experimenteel onderzoek, dat veelal sterk doelgericht was en geïnspireerd door een essentiële kritische vraag.

Hij had een groot netwerk van contacten. Zowel in Nederland als in de Verenigde Staten werd Sachtler door studenten vooral ook gewaardeerd om zijn interesse in hen en de stimulerende invloed die op hen had. Sachtler en zijn vrouw Analore waren bijzonder gastvrij. Collega's, gasten uit binnen- en buitenland en ook studenten vonden bij hen een hartelijk welkom.

Sachtler promoveerde in 1952 aan de Technische Hochschule Braunschweig bij Rudolf Suhrmann, hoogleraar fysische chemie aldaar. Een belangrijke rol bij zijn komst naar Nederland werd gespeeld door George Schuit.<sup>1</sup> Schuit was destijds hoofd van het katalyseonderzoek bij het KSLA en zag in Wolfgang Sachtler een aanwinst voor zijn afdeling, mede omdat Wolfgang door zijn promotieonderzoek vertrouwd was met onderzoek van metaalfilm onder hoog vacuüm, een techniek die bij Shell Research in de Verenigde Staten veel belovend was gebleken voor fundamenteel katalyseonderzoek. Dit kan gezien worden als het vroege begin van de zich later spectaculair ontwikkelende 'Surface Science'.

Voor Sachtler en zijn echtgenote was de overstap van het Duitsland naar Nederland groot, vooral – zoals hij later wel eens vertelde – vanwege de sterke anti-Duitse gevoelens zo kort na de oorlog. Hij vertelde daarbij ook van de grote hulp die hij in die tijd van zijn naaste en later vertrouwde medewerker G.J.H. Dorgelo ontving, en waar hij hem zeer dankbaar voor was.

Heterogene katalyse was niet alleen bij Shell, maar ook bij andere (petro) chemische industrieën sterk in de belangstelling gaan staan vanwege de industriële opbouw in Nederland na de oorlog. Nieuwe technologie, vooral uit de Verenigde Staten, was daarvoor veelal de basis. Veel nieuwe processen werden gestart, aanvankelijk vooral voor conversie van aardolie. Hierbij is een heterogene katalysator, het anorganische materiaal dat productie van een gewenst product bij technisch acceptabele thermische condities mogelijk maakt, van essentieel belang. Sachtler onderzocht het werkingsprincipe van deze heterogene katalysatoren. Er ontwikkelde zich in Nederland al snel een sterke interactie van overwegend industriële onderzoekers, verbonden aan verschillende bedrijven, die geïnteresseerd waren in katalyse. In de loop der tijd sloten hoe langer hoe meer universitaire onderzoekers zich bij hen aan. Een belangrijke schakel hierbij was de toen zeer actieve sectie Katalyse van de KNCV (Koninklijke Nederlands Chemische Vereniging), waarin industriële en universitaire onderzoekers elkaar ontmoetten. De internationale uitstraling was groot, zoals onder meer bleek uit de succesvolle organisatie van het derde Internationale Katalyse Congres in 1964 te Amsterdam, waarvan

---

1 R.A. van Santen & L.L. van Reijen, Levensbericht G. Schuit, in: *Levensberichten en herdenkingen*, 2003, Amsterdam, pp. 77-84.

Sachtler een van de organisatoren was. Ook de twee jaarlijkse Roermondconferenties, die de opzet hadden van een Gordon Research Conference, speelden daarin een grote rol. Op het derde Internationale Katalyse Congres in 1964 was voor het eerst sprake van The Dutch School of Catalysis, waarvan Sachtler een van de representanten was, naast vooral Schuit, later hoogleraar in Eindhoven, De Boer en Van Krevelen, hoogleraren te Delft en mede verbonden aan DSM, en Coenen, hoogleraar in Nijmegen en tevens verbonden aan Unilever.

Een primaire vraag waar vooral Sachtler zich op concentreerde was de relatie van reactiviteit van het katalytische actieve materiaal en de structuur en samenstelling daarvan. Dit werd geherformuleerd naar de vraag welke fysische eigenschappen met deze reactiviteit correleren. In moderne termen worden deze fysische eigenschappen *reactivity descriptors* genoemd. Sachtler onderzocht hiertoe in eerste instantie overgangsmetaalkatalysatoren, zoals platina of nikkel. Deze worden vooral gebruikt bij de omzetting van koolwaterstoffen.

Het dispuut dat op het Internationale Katalyse Congres veel aandacht trok, was dat tussen fysisch chemici, zoals Sachtler, die stelden dat de oppervlakte van een metaal een unieke en ook oppervlaktespecifiek gedrag kan vertonen, tegenover degenen die katalytische eigenschappen probeerden te correleren met bulk, niet oppervlaktespecifieke eigenschappen, zoals warmtegeleiding of magnetisme. Met name door met vacuüm fysische technieken films van legeringen van een niet-reactief metaal en reactief metaal te onderzoeken, stelde Sachtler vast dat de oppervlaktesamenstelling aanzienlijk kon afwijken van het bulkgemiddelde en dat reactiviteit met deze oppervlaktesamenstelling correleert. Een belangrijk nieuw inzicht was ook dat deze reactiviteit samenhangt met concentratie van het aantal reactieve atomen aan het oppervlak. De reactieve oppervlakteatomen kunnen worden getitreerd door adsorptie van een reactief gasmolecuul, zoals waterstof of koolmonoxide, dat niet geactiveerd wordt door een niet-reactief metaal als koper of goud. Het is dus beter over reactiviteit te denken in chemische termen waarbij oppervlakteatomen een oppervlaktemolecuul vormen met een reagerend gasfasmolecuul, dan over reactiviteit bepaald door de bulkfysische eigenschappen van de vaste stof voor reactie. De essentie was concentratie op oppervlakken en hun unieke reactiviteit.

Dit inzicht bleek bijzonder vruchtbaar en is ook de huidige moderne zienswijze. De reactiviteit van een oppervlak wordt bepaald door de structuur en samenstelling van een oppervlak. De reactiviteit wordt bepaald door de onderlinge positionering van oppervlakteatomen en de inbedding van een atomair oppervlaktecomplex in de structuur van het materiaal. Veel reacties hebben meerdere oppervlakteatomen nodig, hetgeen Sachtler 'het ensemble-effect' noemde. Verschillen in reactiviteit die het gevolg zijn van andere inbedding noemde hij ligand-effecten.

Een bevestiging van dit moleculaire oppervlaktereactiebeeld werd mogelijk toen de structuur van een oppervlak kon worden onderzocht, zoals toen met de veldemissiemicroscopie. Onderzoek bij Shell in samenwerking met A. Holscher en ook in Leiden in samenwerking met B. Nieuwenhuys maakte de structuur van een reagerend oppervlak zichtbaar. Er werd zelfs ontdekt dat door reactie – bijvoorbeeld met zuurstof – oppervlaktemetaalbindingen konden verzwakken, zodat oppervlakken een andere structuur kunnen innemen. Dat bewees dat de bindingen in het oppervlaktemolecuul sterker zijn dan die tussen de metaaloppervlakteatomen.

Een belangrijke consequentie van het idee van het bestaan van een oppervlaktemolecuul is dat zijn vormingswarmte zou moeten relateren met de vormingswarmte van de corresponderende vaste stof. Dus niet een correlatie met het metaal voor reactie, maar met het analoog van het oppervlaktemolecuul. Deze gedachte bleek een gouden greep.

Nog steeds veel geciteerd is de vulkaancurve die hij, samen met toenmalige Shell-collega's Fahrenfort en Van Reijen construeerde van hydrogeneringsreactie van mierenzuur over verschillende overgangsmetalen als functie van de vormingswarmte van de corresponderende bulk vormiaat (mierenzuurzout) vormingswarmten. Soortgelijke vulkaancurves konden ook worden geconstrueerd voor oxidatiereacties als functie van de vormingswarmte van oxides. Zoals Sabatier meer dan vijftig jaren eerder suggereerde, wordt een maximum in activiteit als functie van vormingswarmte gevonden daar waar de snelheid van het vormen van een oppervlaktemolecuul gelijk wordt aan de snelheid van zijn ontleding. Deze snelheden hebben een tegenovergestelde relatie met de corresponderende oppervlaktemolecuul vormingswarmtes.

Dertig jaar later was het mogelijk soortgelijke curves te construeren op basis van theorie. Zo liet H. Toulhoat bij het Institut Français de Petrol een soortgelijke relatie zien als die eerder gevonden was door Sachtler en consorten, maar nu voor de relatie van katalytisch ontzwellen met de vormingswarmte van complexe sulfides. In zijn hierop volgende Shellperiode richtte het onderzoek zich meer op het mechanisme van voor Shell belangrijke katalytische reacties. Een katalytische reactie is een cyclus van aan elkaar gekoppelde elementaire reacties. Het is van belang dit netwerk te ontrafelen om te weten te komen wat het bepalende oppervlaktemolecuul is dat snelheid of selectiviteit van de katalytische reactie bepaalt. Dit wordt veelal onderzocht door een molecuul met een isotoopatoom te labelen en het verloop van dit isotoopatoom in de reactie te volgen.

Tijdens een kort verblijf bij Shell Research in Houston vond Sachtler dat geadsorbeerd allyl selectiviteit bepaalt van de oxidatie van propyleen naar acroleïne dat wordt gekatalyseerd door koper. Het verklaart waarom geen directe reactie naar het belangrijke propyleenoxide mogelijk is.

Terug bij KSLA genereerde Sachtler een belangrijke discussie over de epoxidatie van ethyleen gekatalyseerd door zilver. Samen met P. Kilty formuleerde hij een theorie van maximale selectiviteit van deze reactie, waarbij molecuulair geadsorbeerd zuurstof het bepalend oppervlaktemolecuul is. Dit was van groot belang aangezien hier een strategisch besluit om vernieuwing van deze katalysatoren mee verbonden was. De discussie hierover verscherpte zich. Ook heeft Sachtler het volgonderzoek zeer gesteund, waarbij alternatieve oppervlakte-intermediären werden gevonden, echter van ethyleen gebonden aan een enkel zuurstofatoom. Dit leidde tot verwerping van de theorie van de maximale selectiviteit en daarmee van het onderzoek naar verdere verbetering van de etheen-epoxidatiekatalysator.

Vanwege toenemende interesse in de omzetting van kool- en aardgas naar transportvloeistof werd eind jaren zeventig van de vorige eeuw bij Shell onderzoek gestart aan de Fischer-Tropsch-reactie. Dit is mogelijk door kool- of aardgas eerst om te zetten in synthesegas. Het synthesegas, een mengsel van overwegend koolmonoxide en waterstof, kan met ijzer of kobalt als katalysator worden omgezet in aromaten of lineair hoofdzakelijk

verzadigde koolwaterstoffen. Met P. Biloen werden elegante studies gedaan met C13-gelabelde koolmonoxidemoleculen, die onomstotelijk aantoonde dat de C-O-binding in koolmonoxide eerst gebroken dient te worden alvorens hogere koolwaterstoffen kunnen worden gevormd. Dit is de basis van het Biloen-Sachtler-carbidemechanisme dat nu algemeen bij het modelleren van de Fischer-Tropsch-reactie wordt toegepast.

Na meer dan dertig jaar verblijf bij KSLA besloot Wolfgang Sachtler de uitnodiging van Northwestern University te accepteren als directeur van het Center for Catalysis and Surface Science en V.N. Ipatieff Professor bij de afdelingen Chemistry en Chemical Engineering. De overstap heeft Sachtler een heel vruchtbare en gelukkige carrière gegeven, weer van ongeveer dertig jaar. Met het gezin gingen twee kinderen mee. De zoon raakte ook geïnteresseerd in de katalyse en volgt nu een industriële loopbaan in de Verenigde Staten.

In de Verenigde Staten ontwikkelde Sachtler een groot netwerk bestaande uit industriële en academische contacten. Dit was van groot belang voor het Center dat hij in Evanston opbouwde. Het oefende een grote aantrekkingskracht uit op nationale en internationale onderzoekers en ook op een groot aantal internationale studenten.

In de jaren tachtig en negentig verlegde de belangstelling voor nieuwe heterogeen-katalytische reacties zich vooral naar reductie van emissies die schadelijk zijn voor het milieu. De ontwikkeling van de auto-uitlaatgaskatalysator voor benzinemotoren is daarvan een voorbeeld. Een grote uitdaging blijkt de ontwikkeling van NO<sub>x</sub>-reducerende emissie van dieselmotoren. Dit vanwege de hoge concentratie zuurstof in de uitlaat. Het is vooral met het onderzoek van katalysatoren van interesse voor NO<sub>x</sub>-reductie dat Wolfgang Sachtler zich in Evanston heeft bezig gehouden. Hij raakte geïnteresseerd in de studie van synthetische zeolieten als katalysator. Dit zijn silico-aluminaatverbindingen met nanoporiën gedefinieerd door hun kristallografische structuur. Deze worden grootschalig toegepast als vaste zuren bij kraakprocessen van ruwe olie naar transportvloeistoffen. Echter, wanneer in plaats van zure protonen katalytisch actieve clusters van een metaal of oxide in de zeolietholtes worden geplaatst, kunnen zeolieten worden gebruikt in vele alternatieve reacties, zoals de reductie van NO<sub>x</sub> in de uitlaat van dieselmotoren.



Het katalytische onderzoek richtte zich nu vooral op de synthese van chemisch goed gedefinieerde clusters in de nanoholtes van de zeoliet. Vanwege de unieke chemische omgeving en de sterische beperking van de nanoholtes is clusteranorganische chemie verrassend verschillend van dat in de vloeistoffase. Het *ship in de bottle*-concept werd ontwikkeld, waarbij stoichiometrische reacties werden gebruikt om in situ de verschillende complexen te maken. In deze studies bereidde Sachtler een van de vroegste *single atom* heterogene katalysatoren. Een overgangsmetaalatom dat, zonder verdere additionele liganden, kon worden gestabiliseerd aan de protonen in een zeolietholte. De interactie met de protonen verhindert diffusie en agglomeratie van de overgangsmetaalatomen.

Sachtler en zijn 'ontdekker' Schuit kunnen worden beschouwd als de grondleggers van het fundamentele heterogeenkatalytisch onderzoek in Nederland, wat mede in handen van opvolgende generaties grote internationale erkenning heeft gekregen. Hun signatuur, een combinatie van een mechanistisch vraag, de ontwikkeling van geavanceerde spectroscopie en een goed gedefinieerd modelsysteem plus interesse voor toepassing van *state of the art*-theorie is nog steeds een dominant kenmerk.

Wolfgang was experimentator pur sang en – hoewel geïnteresseerd – tot aan het eind van de vorige eeuw kritisch over theoretisch onderzoek. Het is overigens pas recent dat methoden en technologie beschikbaar zijn gekomen die *computational chemistry* onmisbaar maakt bij katalytische onderzoek.

Wolfgang Sachtler werd begin 1970 mijn eerste chef bij KSLA, waar ik toen als theoretisch chemicus begon. Zijn scherpe analytische discussiestijl en brede fysische en chemische kennis maakten grote indruk. Theoretische voorspelling, die twijfel weet te genereren of experimentele interpretatie mogelijk maakt, bleek *common ground*. Zijn invloed was groot op mijn verdere experimentele en theoretische exploratie van fundamentele van heterogene katalyse. Hij was een warm persoon, die niet alleen op professioneel vlak, maar ook op persoonlijk niveau een verrijkende vriend kon zijn.