

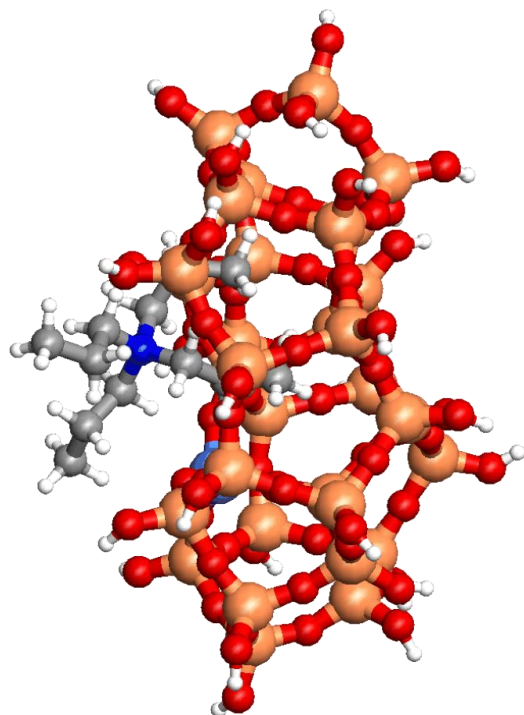
DESIGN VAN NIEUWE ZEOLIETMATERIALEN VIA AGGREGATIE VAN PERCUSOREN EN NANODEELTJES

Keywords: Moleculaire Modelling, aggregatie, nanoblokjes, katalyse, poreuze materialen

In samenwerking met het Centrum voor Oppervlaktechemie en Katalyse, KULeuven

Microporeuze materialen zoals zeolieten zijn de werkpaarden van de petrochemische industrie. De grote variatie aan holtes en kanalen en de snelle ontwikkeling van nieuwe materialen, zorgt ervoor dat steeds meer toepassingsgerichte synthese-procedures worden ontwikkeld. De synthese van zeolieten start vanuit oplossing of hydrogel, in aanwezigheid van moleculaire templatmoleculen. Het zijn net deze templatmoleculen die voor een welgekozen structuur zullen zorgen. Wetenschappelijk inzicht in moleculaire aspecten van de vorming van zeolietkristallen is ondanks wereldwijd intensief onderzoek nog steeds vrij beperkt. In de literatuur is er een intense discussie tussen voorstanders van een klassiek groeiemodel met monomeer additie en aanhangers van aggregatiemodellen. Onder meer voor de groei van Silicaliet-1 (met dezelfde MFI topologie als het vaak gebruikte ZSM-5 zeoliet) in aanwezigheid van tetrapropylammonium (TPA) kationen is er toenemende experimentele evidentie voor de tussenkomst van aggregatiestappen.

De elementaire reactiestappen die aan de basis liggen van de cluster-cluster aggregatie van silicaat oligomeren tot de precursor en de verdere aggregatie van de precursoren tot de nanoplaatjes, zijn tot dusver slechts oppervlakkig begrepen. Vooral de rol van de templatmoleculen is het onderwerp geweest van aanzienlijke discussies in de literatuur.



Doelstelling

Binnen dit thesisonderwerp zullen state-of-the-art moleculaire modelleringstechnieken worden ingezet om de vormingsmechanismen en stabiliteiten van de verschillende nanodeeltjes te bestuderen. Het vertrekpunt voor de modelleertaak is de Silicaliet-1 synthese uitgaande van tetraethyl orthosilicate (TEOS) met TPAOH waterige oplossing. Dit systeem werd door het COK experimenteel uitvoerig onderzocht en vormt een ideaal startpunt voor het modelleerwerk. Er is evidentie dat er verschillende nanodeeltjes kunnen worden gevormd (zoals een pentacyclisch dodecameer, tetracyclisch undecameer, gebrugde dubbele vijftring) die afhankelijk van het medium, de temperatuur en de

interactie met de templaatomoleculen, in elkaar kunnen overgaan of verder kunnen groeien tot een groter nanodeeltje (precursor). In het bijzonder zal de rol van de ladingen en de elektrostatistische interactie van het negatief geladen silicaat met geocludeerd en extern geadsorbeerde TPA+ templaatkationen worden onderzocht. In tweede instantie zal de vorming van nanodeeltjes worden onderzocht in aanwezigheid van andere templaatomoleculen.

Promotoren: Prof. Dr. ir. V. Van Speybroeck - veronique.vanspeybroeck@ugent.be (09/264.65.58),
Prof. Dr. C. Kirschhock (KULeuven, COK) - christine.kirschhock@biw.kuleuven.be / **Begeleiding:** ir. L. Joos
lennart.joos@ugent.be (09/264.65.61) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>