

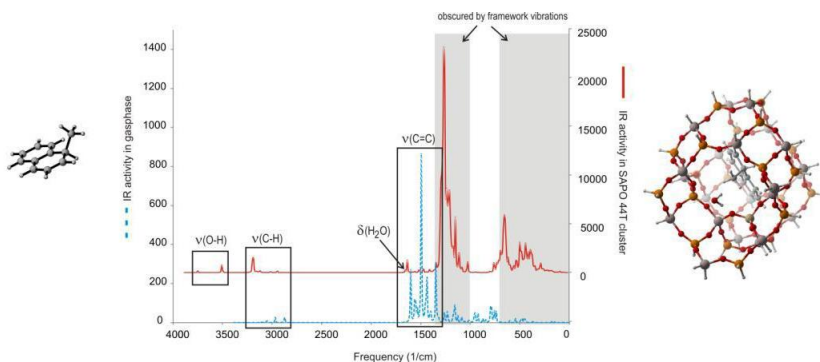
# EEN INNOVATIEVE ANALYSE METHODE VOOR VIBRATIONELE SPECTRA IN TERMEN VAN INTERNE COORDINATEN UIT MOLECULAIRE DYNAMICA SIMULATIES

*Keywords: Moleculaire Dynamica, power spectra, IR en Raman spectra, groei nanoporeuze materialen*

Moleculaire dynamica (MD) simulaties vormen een ideale techniek om experimentele vibrationele spectra zoals infra-rood (IR), Raman, en inelastische neutron verstrooiing (INS) te ontrafelen. Dynamische methodes zijn beter geschikt voor deze doeleinden dan statische methoden, gebaseerd op normale mode analyses, aangezien ze ook anharmonische effecten in rekening brengen en als dusdanig beter met de realiteit overeenkomen. Een accurate toewijzing van pieken in de spectra aan bepaalde specifieke vibraties van een interne coördinaat kan een enorme meerwaarde inhouden om bijvoorbeeld het mechanisme te begrijpen waarmee nanoporeuze materialen zoals zeolieten worden gevormd. Het CMM heeft in deze problematiek al enorme vooruitgang gemaakt, maar het opstellen van een waterdicht protocol voor een accurate analyse van de experimentele spectra is er nog niet. Deze scriptie heeft de intentie deze lacune op te vullen. Hiervoor dient modelontwikkeling te worden verricht met programmeer werk en veel computationele simulaties.

## Doelstelling

Moleculaire dynamica simulaties leveren enorm veel informatie op: atomen van de moleculaire structuren bewegen voortdurend en de atomaire snelheden kunnen opgeslagen worden in databanken. Een recent ontwikkeld algoritme bestaat erin de atomaire snelheidsvectoren te projecteren op de tangentiële richtingen van de trajecten behorend tot een bepaald set van interne coördinaten. Power spectra kunnen berekend worden door de Fourier transformatie van de atomaire snelheids autocorrelatie functies. Bij een geschikte keuze van de interne coördinaten kan een ondubbelzinnige toewijzing gegeven worden van een spectraal signaal aan een specifieke (collectieve) vibratie en op deze wijze een “fingerprint” vastleggen aan een moleculaire structuur (bijvoorbeeld een vijfkringstructuur bij



nanoporeuze silica materialen). De keuze van de interne coördinaat is cruciaal en vraagt intuïtief fysisch inzicht. Het is ook wenselijk een visualisatie te bekomen van de unieke vibratie die gefilterd is geworden.

Analyse van Raman spectra maakt het probleem nog complexer, aangezien deze de respons impliceert van de elektrische dipoolmoment dynamica. Atomaire ladingen spelen hier een grote rol, vandaar dat de dynamica gebruik moet maken van zeer accurate krachtvelden die de polarisatie effecten correct weergeven. Op dit terrein is het CMM prominent aanwezig en kan de scriptie student hier optimaal op inspelen.

Toepassingen zijn er met de vleet. Aangezien de onderzoeksactiviteiten van het CMM grotendeels gericht zijn op modelleren van nanomaterialen, en in het bijzonder nanoporeuze materialen, worden toepassingen van Raman spectra in complexe materialen in die wereld gezocht met grote industriële relevantie. Sommige pieken in een opgenomen Raman spectrum kunnen onderworpen worden aan een significante verschuiving door de aanwezigheid van gast moleculen in de kooien van een zeoliet (bijv. H-SAPO34). Dit helpt de karakterisatie van de materialen en het vinden van een mechanistische verklaring voor chemische processen die plaatsgrijpen binnen de kooien van een zeoliet. Tot nu toe werd de ganse frequentie analyse statisch behandeld op basis van geoptimaliseerde structuren tussen materiaal (zeoliet) en de geadsorbeerde gastmoleculen. De uitbreiding naar dynamische technieken betekent een bijzondere progressie aangezien de tekortkomingen van het statisch model (beperking tot een of twee conformaties) structureel worden opgelost.

---

**Promotoren:** Prof. Dr. ir. V. Van Speybroeck - [veronique.vanspeybroeck@ugent.be](mailto:veronique.vanspeybroeck@ugent.be) (09/264.65.58),  
Dr. ir. T. Verstraelen - [toon.verstraelen@ugent.be](mailto:toon.verstraelen@ugent.be) (09/264.65.56) / **Begeleiding:** ir. A. Van Yperen - De Deyne [andy.vanyperendedeyne@ugent.be](mailto:andy.vanyperendedeyne@ugent.be) (09/264. 66.19) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>