

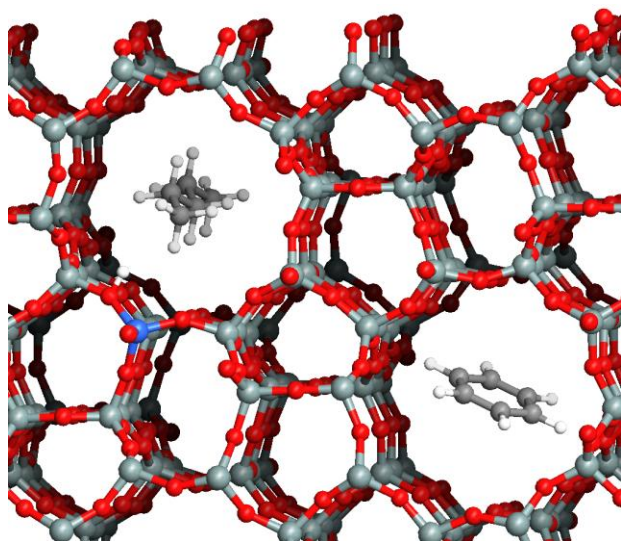
## MODELLERING VAN THERMODYNAMISCHE GROOTHEDEN EN KINETISCHE PARAMETERS IN PERIODIEKE MOLECULAIRE SYSTEMEN

*Keywords: modelontwikkeling, moleculaire modellering, eigentrillingen, poreuze materialen, statistische fysica*

Moleculaire simulaties zijn een computationele uitdaging omwille van het grote aantal vrijheidsgraden. Elke atoom brengt immers drie extra vrijheidsgraden met zich mee. Een eerste techniek is moleculaire dynamica (MD), waarbij het systeem als het ware real-time gevolgd wordt eenmaal er beginposities en – snelheden aan elk atoom zijn toegekend. Een andere techniek is normale-mode-analyse (NMA), een statische methode waarbij enkel lokale informatie wordt bekomen.

Het resultaat van NMA, de eigentrillingen en eigenfrequenties, zijn een belangrijke bron van informatie. De frequenties kunnen geïnterpreteerd worden als de krommingen van het potentiële-energieoppervlak en staan via partitiefuncties (cfr. statistische fysica) direct in verband met macroscopisch waarneembare grootheden. Voorbeelden zijn reactiesnelheden (hoe verplaatsen de reactanten zich op het potentiële-energieoppervlak?), biologische functie (hoe verandert een proteïne van conformatie?), diffusie in poriën (welke trillingen vergroten de poriën zodat het solvent erdoor kan?), of experimenteel opgemeten spectra (welke trilling komt overeen met welke absorptieband?).

De berekening van de frequenties is echter een rekenintensieve taak. Daarom werd in het Centrum voor Moleculaire Modellering recent een benaderende methode ontwikkeld, de Mobile Block Hessian method, die door de introductie van blokken verschillende vrijheidsgraden vastzet. De methode is extensief getest op geïsoleerde systemen, maar nu rijst de vraag in hoeverre de methode ook toepasbaar is in periodieke simulaties. Periodieke randvoorwaarden zijn erg geschikt om uitgebreide



systemen zoals poreuze materialen (bv. zeolieten en metaal-organische roosters) of een systeem in een solvent (bv. biomolecule in water) te simuleren.

**Doelstelling** Het doel van deze thesis is de ontwikkeling van een computationeel voordelige methode om partitiefuncties kunnen opgesteld worden op basis van periodieke simulaties. Dit werk omvat zowel de theoretische uitwerking van een gepast model als de implementatie van dit model in bestaande simulatie software (TAMKin en CP2K). Hierna wordt nagegaan wat de invloed is op de gelokaliseerde frequenties (karakteristieke

pieken in spectrum), de frequenties van lopende-golven (fononen) en de afgeleide grootheden (partitiefuncties, entropie, vrije energie, reactie kinetiek).

Dit thesisonderwerp biedt de mogelijkheid om algemene theoretische modellen te ontwikkelen die op een breed spectrum moleculaire systemen toepasbaar zijn. Hierbij komen verschillende competenties aan bod. Niet alleen moet de thesisstudent gaandeweg het nodige inzicht verwerven in de fysica van een interagerend veeldeeltjessysteem (al dan niet kwantummechanisch), maar ook ontwikkelt de student praktische aspecten zoals programmeren en de analyse van simulaties.

---

**Promotoren:** Prof. Dr. ir. V. Van Speybroeck - [veronique.vanspeybroeck@ugent.be](mailto:veronique.vanspeybroeck@ugent.be) (09/264.65.58)

**Begeleiding:** Dr. ir. A. Ghysels - [an.ghysels@ugent.be](mailto:an.ghysels@ugent.be) (09/264.65.61), Dr. ir. T. Verstraelen - [toon.verstraelen@ugent.be](mailto:toon.verstraelen@ugent.be) (09/264.65.56) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>