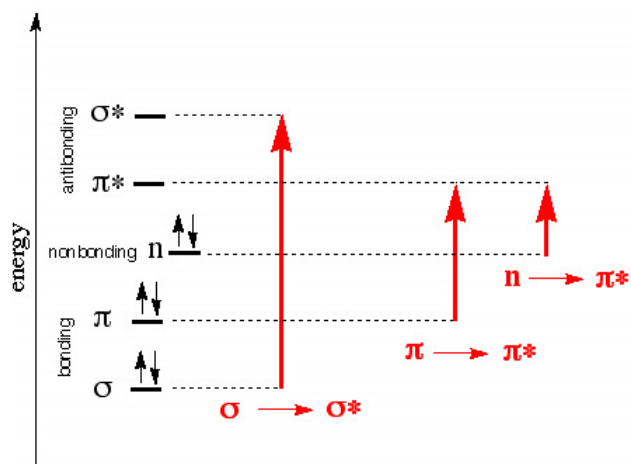


THEORETISCHE MODELONTWIKKELING VOOR DE ACCURATE BEREKENING VAN UV-VIS SPECTRA IN NANOPOREUZE MATERIALEN

Keywords: Model Development, Spectroscopy, Computational Applications

De ontwikkeling van efficiënte theoretische algoritmes is cruciaal voor de snelle vooruitgang binnen het onderzoeksdomein van moleculaire modellering. De modellering van realistische systemen met een groot aantal atomen, zoals bv. enzymen of nanoporeuze materialen, wordt hierdoor mogelijk.

Structuurkarakterisatie en –activiteit vormen vandaag de dag de centrale onderzoeksthema's van dergelijke grote systemen. Spectroscopie is hierbij de belangrijkste techniek die kan leiden tot structuurkarakterisatie. **UV-Vis spectra** vormen in het bijzonder een veel gebruikte toepassing. Deze beschrijven de interacties van materia met licht in het gebied 190-380 nm (UV) en 380-750 nm (Vis).

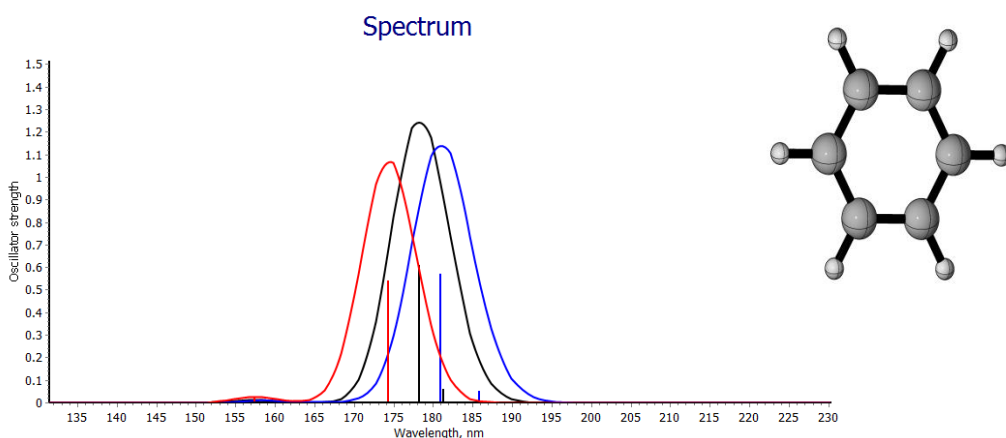


De berekening van UV-Vis spectra vormt echter nog steeds een grote uitdaging aangezien dit de kennis van de geëxciteerde toestanden vereist (Figuur 1). Hiervoor kan gebruikt gemaakt worden van CI (configuration interaction)-methoden, of de tijdsafhankelijke variant van dichtheidsfunctionaaltheorie (TD-DFT). Deze methodes zijn computationeel behoorlijk zwaar waardoor efficiënt moet omgesprongen worden met het aantal vrijheidsgraden.

Figuur 1: Energiediagram met aanduiding van toegelaten elektronische transitie die aanleiding geven tot absorptie in het UV-Vis gebied.

Doelstelling Het doel van deze thesis is de modelontwikkeling en implementatie van ab initio UV-Vis spectra. In eerste instantie zullen de spectra van **modelsystemen** (kleine moleculen) berekend worden d.m.v. bestaande pakketten. Op deze manier kunnen we meer inzicht krijgen in de belangrijke parameters, zoals bv. de invloed van het theoretisch berekeningsniveau. Figuur 2 toont berekende spectra van benzeen. Een volgende stap is het in rekening brengen van een **nanoporeus materiaal**, bv. een zeoliet. Dit zijn microkristallijne aluminosilicaten waarin kleine moleculen kunnen diffunderen en reageren. Dergelijke materialen zijn industrieel enorm belangrijk, ze worden o.a. intensief gebruikt als katalysatoren. De invloed van een nanoporeuze omgeving op het UV-Vis spectrum is zeer interessant, maar nog weinig onderzocht. Voor dit gedeelte zal er overgegaan worden op meer complexe modelleringstechnieken.

Dit thesisonderwerp is uitdagend aangezien de beschrijving van geëxciteerde toestanden niet evident is en veel inzicht vereist in de elektronische systeem van het onderzochte systeem. De geïnteresseerde student kan zijn/haar eigen accenten leggen. Daarnaast biedt dit onderwerp veel afwisseling, aangezien het theoretisch/fysisch modelleringsluik gecombineerd kan worden met de studie van actueel relevante systemen. Deze masterthesis zal in nauwe samenwerking gebeuren met de onderzoeksgroep van Prof. Weckhuysen van de Universiteit van Utrecht. Deze experimentele onderzoeksgroep voert baanbrekend onderzoek uit naar de structuur-activiteitsrelatie van grote systemen, waaronder ook nanoporeuze zeolieten. Het uiteindelijke doel is dat de theoretisch gesimuleerde spectra vergeleken worden met experimentele data om gevormde structuren tijdens katalytische reacties te karakteriseren.



Figuur 2: Berekend UV-Vis spectrum van benzeen, gebruik makend van TD-DFT, testen van 3 verschillende methoden.

Promotoren: Prof. Dr. ir. V. Van Speybroeck - veronique.vanspeybroeck@ugent.be (09/264.65.58),
Dr. ir. K. Hemelsoet - karen.hemelsoet@ugent.be (09/264.65.64) / **Begeleiding:** ir. A. Van Yperen - De
Deyne - andy.vanyperendedeyne@ugent.be (09/264.66.19) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>