

Begeleider Servaas Lips	Promotoren Maarten Sabbe, Vladimir Galvita	Funding BOF
-----------------------------------	--	-----------------------

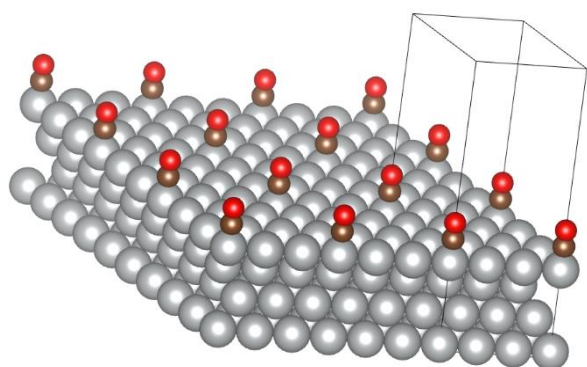
Beter katalysatorbegrip door interpretatie van IR-spectra met behulp van DFT-berekende vibrationele modes

Trefwoorden: heterogene katalyse, DFT, ab initio, vibrationele modes, CO₂ methanatie, CO₂ dry reforming

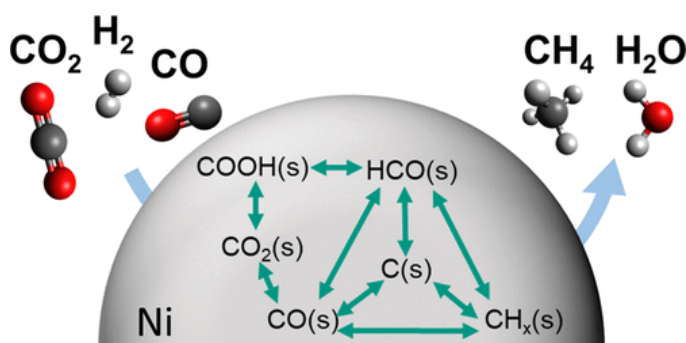
Probleemstelling

In het onderzoek naar heterogene katalyse spelen DFT-berekeningen een steeds prominentere rol. Met behulp van DFT (Density Functional Theory) kan de elektronische structuur van een katalysator beschreven worden en kunnen de interacties tussen het katalysatoroppervlak en de reactieve moleculen op atomair niveau gemodelleerd worden (zie Figuur 1). Dit stelt ons in staat om beter te begrijpen welke reactiemechanismes plaats vinden op dit oppervlak. Deze informatie is essentieel voor het ontwerpen van betere katalysatoren en het optimaliseren van katalytische processen. Door de DFT-berekeningen te combineren met experimentele technieken, zoals spectroscopie, kunnen experimentele resultaten beter worden geïnterpreteerd.

Om dit soort berekeningen uit te voeren zijn verschillende softwarepakketten voorhanden, in dit onderzoek wordt met de VASP (Vienna Ab initio Software Package)-software gewerkt. De focus ligt op het berekenen van frequenties voor de vibrationele modes die spectrometrisch gemeten kunnen worden. Om de nodige inzichten te verkrijgen in deze berekeningen wordt initieel een intensieve samenwerking tussen begeleider en student voorzien. De berekeningen worden uitgevoerd op de HPC (High Performance Computing)-infrastructuur van de UGent. Om met deze infrastructuur te werken is een basiskennis van het Linux besturingssysteem vereist. Ervaring hiermee is dus een voordeel maar geen vereiste.



Figuur 1: Ni(111)-oppervlak met 1/9 ML CO



Figuur 2: Reactienetwerk CO₂ methanatie over Ni (Schmider et al., 2021)

Doelstelling

De doelstelling van deze masterproef is de vibrationele modes van belangrijke reactie-intermediären die voorkomen tijdens de methanatie en dry reforming van CO₂ (zie Figuur 2) te berekenen met behulp van de VASP-software. Om deze resultaten te valideren worden ze vergeleken met experimentele data. Deze resultaten stellen de student in staat om een antwoord te formuleren op volgende vragen.

1. Wat is de invloed van de adsorptiesite op de vibrationele modes?
2. Wat zijn de belangrijkste species op het oppervlak?
3. Hoe veranderen de vibrationele modes bij het veranderen van katalysator?
4. Hoe beïnvloeden functionele groepen de vibrationele modes?