

Moleculaire modellering van industriële processen (E071341)

Cursusomvang (nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)

Studiepunten 6.0

Studietijd 180 u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2024-2025

A (semester 2)

Engels

Gent

werkcollege

hoorcollege

Lesgevers in academiejaar 2024-2025

Van Speybroeck, Veronique

TW17

Verantwoordelijk lesgever

Cnudde, Pieter

TW17

Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025

stptn

aanbodsessie

[Brugprogramma Master of Science in Chemical Engineering](#)

6

A

[Master of Science in Chemical Engineering](#)

6

A

[Master of Science in de bio-ingenieurswetenschappen: chemie en bioprocestechnologie](#)

6

A

Onderwijstalen

Engels

Trefwoorden

Katalyse, chemische kinetiek en thermodynamica, Dichtheidsfunctionaaltheorie, Transitietoestandstheorie, Moleculaire Dynamica.

Situering

Moleculaire modellering en simulaties spelen een centrale rol in hedendaagse ontwikkeling van industriële processen. Het is een multi-disciplinaire aanpak waarbij fysische en chemische inzichten worden gecombineerd om te begrijpen wat er gebeurt op de nanoschaal of op het niveau van de individuele chemische reacties. Door de enorme toename van rekencapaciteiten en geavanceerde fysische en numerieke modellen is deze aanpak niet meer weg te denken uit de huidige chemische technologie. Men kan stellen dat moleculaire modellering nu in staat is een instrumentarium te leveren dat aangewend kan worden voor een computerondersteunde evaluatie, innovatie en optimalisatie van chemische processen en katalysatoren uitgaande van de moleculaire schaal. Door de complexiteit van industriële processen en de vele reacties die simultaan kunnen doorgaan is het veelal onmogelijk om inzicht te bekomen in individuele reacties. Het ontwerpen van katalysatoren en processen gebeurde in het verleden dikwijls op basis van try-and-error. Het inzicht op de kleinste schaal laat toe processen slim te ontwikkelen. Het toepassingsgebied is zeer breed en heeft reeds aanleiding gegeven tot baanbrekende resultaten in de ontwikkeling van groene en schone processen. De cursus beschrijft diverse methoden om de kwantummechanische elektronenstructuur volgens eerste basisprincipes te bepalen. Deze kennis laat toe alle moleculaire eigenschappen af te leiden die nodig zijn om reacties in complexe omgevingen te simuleren. De chemische kinetiek en thermodynamica van individuele reacties komen aan bod, alsook beschrijving van de reactiemechanismen in diverse moleculaire omgevingen. Verder wordt dieper ingegaan op technieken die toelaten industriële relevante katalysatoren en materialen te simuleren op grotere lengte- en tijdsschaal en onder operando condities. In dit opzicht worden moleculaire dynamica technieken en machine learning potentialen die toelaten om het potentieel energieoppervlak meer efficiënt te simuleren geïntroduceerd.

Inhoud

- Moleculaire modellering versus experimentele waarnemingen voor adsorptie, diffusie, kinetiek in nanogestructureerde materialen
- Sequentie van een moleculaire modellering oefening : accurate voorstelling van een moleculaire structuur van realistische materialen, potentieel energie-oppervlak, samplen van de faseruimte (moleculaire dynamica, Monte Carlo) , afleiden van thermodynamische en kinetische eigenschappen
- Interacties werkzaam op de nanoschaal: bindende, niet-bindende, elektrostatische, Van Der Waals interacties, Oorsprong van verschillende types bindingen (covalent, ionair, waterstofbruggen, nietcovalente intermoleculaire interacties)
- Born-Oppenheimer benadering voor moleculaire systemen
- Technieken ter bepaling van de elektronische structuur: Onafhankelijk deeltjesmodel (IPM), Hartree- Fock Concept, Post-Hartree-Fock methoden,
- Dichtheidsfunctionaaltheorie, Semi-empirische methoden, Moleculaire mechanica
- Basissets: Gelokaliseerde Gaussische Basissets, Numerieke implementatie van zelfconsistente schema's, Vlakke Golf pseudopotentiaal methode, Implementatie van dichtheidsfunctionaal methode in elektronische structuurberekeningen
- Moleculaire orbitaaltheorie, afleiden van de chemische binding op basis van symmetrieconcepten
- Externe en interne vrijheidsgraden van moleculen, Ab initio reproductie van thermodynamische grootheden zoals enthalpie, entropie
- Ab initio beschrijving van kinetiek en thermodynamica van chemische reacties
- Technieken om realistische materialen en katalysatoren te beschrijven zoals machine learning potentialen, accurate voorstelling van externe oppervlakken van katalysatoren, geavanceerde sampling technieken en link met spectroscopische grootheden.
- Dynamische modellen om diffusie, adsorptie en kinetiek in industriële katalysatoren te beschrijven.
- Toepassingen binnen het domein van de zeolietkatalyse, industrieel belangrijke separatieprocessen over nanogestructureerde materialen, metaalgekatalyseerde processen.

Begincompetenties

Moleculaire structuur en statistische fysica, organische scheikunde, fysische scheikunde

Eindcompetenties

- 1 BEGRIPPEN: Chemische kinetiek, activeringsenergie, preexponentiele factor, transitietoestand, reactiemechanisme, reactiviteit, chemische structuur, katalysatoreigenschappen en invloed op chemische kinetiek. Inzicht in de belangrijkste interacties werkzaam op de nanoschaal; inzicht in de belangrijkste technieken en methoden om moleculaire systemen van 0.1 naar 50 nm te behandelen. Begrip van veeldeeltjestechnieken om moleculaire systemen en inter- en intramoleculaire interacties te beschrijven
- 2 VAARDIGHEDEN : Chemische kinetiek bepalen van reacties belangrijk in industriële processen. Definieren van een geschikt moleculair modelsysteem en computermodellering van de reacties aan dit modelsysteem. Inzicht hebben in de accuraatheid van de bekomen kinetische en thermodynamische grootheden. Een goed begrip hebben van de moleculaire modelleringstechnieken om realistische materialen en katalysatoren voor industriële toepassingen te modelleren.

Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk na gunstige beoordeling van de competenties

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Werkcollege, Hoorcollege

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

De hoorcolleges omvatten de theorielessen en lessen waarbij dieper wordt ingegaan op actuele onderzoeksthema's binnen het domein van de modellering van industrieel relevante katalysatoren en materialen. In de wekelijkse

(Goedgekeurd)

werkcolleges worden een aantal oefeningen uitgewerkt die tot doel hebben de theorie grondig te beheersen en te begrijpen. Tijdens de PC-klassen wordt de theorie uit de hoorcolleges direct getoetst aan werkelijke moleculaire systemen van industrieel belang door intensieve computeroefeningen. Daarbij wordt gebruik gemaakt van actuele softwareprogramma's die ook gangbaar zijn binnen het onderzoek van chemische processen op de nanoschaal (Gaussian, VASP, CP2K...). Tijdens deze praktische sessies werken de studenten op een laptop en wordt gerekend op de High Performance Computerinfrastructuur van de UGent. Hierbij wordt een zeer intensieve begeleiding gegeven om hands-on assistentie te geven.

Studiemateriaal

Type: Slides

Naam: Slides aangevuld met actuele artikels

Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding

Optioneel: nee

Beschikbaar op Ufora : Ja

Online beschikbaar : Ja

Beschikbaar in de bibliotheek : Nee

Beschikbaar via studentenvereniging : Nee

Referenties

- W. Koch, M.C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory
- D. Mc Quarrie and J.D.Simon , Physical Chemistry – a molecular approach
- Review papers :Challenges in modeling dynamic processes in realistic nanostructured materials at operating conditions,Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 2023, 381, 20220239; <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsta.2022.0239>;V. Van Speybroeck, M. Bocus, P. Cnudde, L. Vanduyfhuys, ACS Catal. 2023, 13, 17, 11455–11493; <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acscatal.3c01945>

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Evaluatiemomenten

periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Mondelinge evaluatie open boek

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Mondelinge evaluatie open boek

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Niet van toepassing

Toelichtingen bij de evaluatievormen

Periodegebonden evaluatie : mondeling examen theorie met open boek, schriftelijke voorbereiding

Het praktisch examen bestaat uit computeroefeningen gevolgd door een mondelinge ondervraging

Eindscoreberekening