

# UITNODIGING DOCTORAATSVERDEDIGING

## MATTHIAS VANDICHEL

*Inzicht in elementaire reactieroutes binnen metaal-organische roosters en zeolieten op basis van ab initio modellen voor chemische kinetiek*

*Bridging the Gap between Experiment and Theory with First-Principles Chemical Kinetics: Unraveling Reaction Pathways within Metal-Organic Frameworks and Zeolites*



# DOCTORAATSVERDEDIGING MATTHIAS VANDICHEL



Woensdag 7 november 2012 om 16u30

Aula, Voldersstraat 9, 9000 Gent

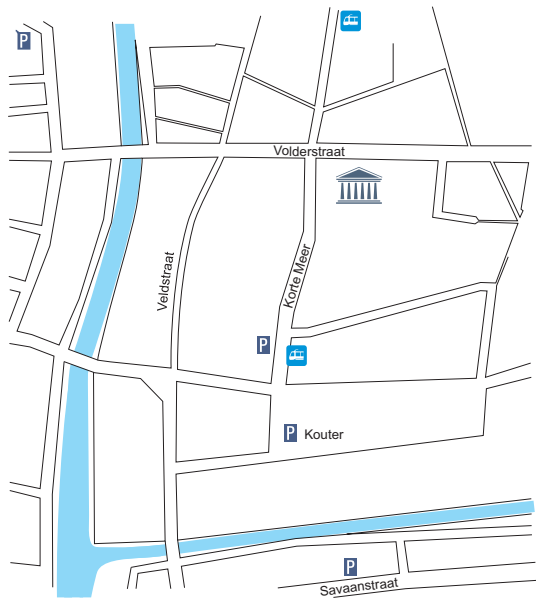
*Matthias Vandichel behaalde zijn diploma van burgerlijk scheikundig ingenieur aan de Universiteit Gent in 2008. In datzelfde jaar startte hij zijn doctoraatsonderzoek met een mandaat van het Bijzonder Onderzoeksfonds van de Universiteit Gent. Sindsdien was en is hij verbonden aan de vakgroep Toegepaste Fysica van de Faculteit Ingenieurswetenschappen. Meer specifiek in het interfacultair Centrum voor Moleculaire Modelling heeft hij onderzoek verricht op katalytische toepassingen van nanoporeuze materialen.*

Nanoporeuze materialen bestaan uit een regelmatig opgebouwd netwerk vol poriën, met typische poriegroottes van ongeveer één nanometer. Ze hebben belangrijke toepassingen zowel in huishoudens (ionenwisselaar in waterverzachters en waspoeders) als in de chemische industrie. Industrieel worden ze als katalysator toegepast om reacties van componenten sneller te laten doorgaan. Daarnaast worden ze ook ingezet om componenten efficiënter te scheiden. Binnen deze klasse van materialen bevinden zich onder andere de zeolieten en de metaal-organische roosters (MOFs). Zeolieten zijn typisch opgebouwd uit tetrahedrale anorganische bouwblokken, terwijl bij MOFs, de anorganische bouwblokken andere vormen hebben en deze verbonden zijn met organische bouwblokken.

Binnen dit doctoraatsonderzoek werden katalytische toepassingen van nanoporeuze materialen; respectievelijk Brønsted zure reacties binnen zeolieten en Lewiszure- en epoxidatiereacties op MOFs onderzocht. De zoektocht naar de aard van de actieve sites binnen die kristallijne nanoporeuze materialen vormde de basis van het onderzoek. Daarbij wordt een theoretisch katalysatormodel eerst vooropgesteld en daarna getest voor een welbepaalde reactie. Een vergelijking met experimentele gegevens werd systematisch nagestreefd om het theoretisch model te valideren. Afhankelijk van de experimentele data kan dan een kwalitatieve of kwantitatieve overeenkomst worden gevonden met de theorie. Zo volgde inzicht in zowel de topologie van de actieve site alsook de hierop plaatsgrijpende reactiemechanismes.

**Voorzitter:** Prof. Rik Van de Walle / **Leden leescommissie:** Dr. ir. An Ghysels (WE05), Dr. German Sastre (Universitat Politècnica de València), Prof. Joris Thybaut (EA12), Prof. Michel Waroquier (WE05, promotor) / **Overige leden:** Prof. Dirk De Vos (KU Leuven), Prof. Karen Hemelsoet (EA17), Prof. Pascal Van Der Voort (WE06), Prof. Dimitri Van Neck (WE05, secretaris), Prof. Rutger van Santen (Technische Universiteit Eindhoven), Prof. Veronique Van Speybroeck (EA17, promotor), Prof. Toon Verstraelen (WE05)

**Aansluitend volgt een receptie waarop u van harte welkom bent. Gelieve uw aanwezigheid op de receptie te bevestigen voor 02/11/2012 via [matthias.vandichel@ugent.be](mailto:matthias.vandichel@ugent.be) of GSM 0484 816 006.**



## Aula Universiteit Gent

Volderstraat 9  
9000 Gent

*Met het openbaar vervoer: vanaf het station Gent Sint-Pieters neemt u Tram 1 richting centrum tot de halte Korte Meer of Korenmarkt.*

*Met de wagen: De parkings Kouter, Korte Meer, en Kouterpoort (Savaanstraat) bevinden zich vlakbij.*