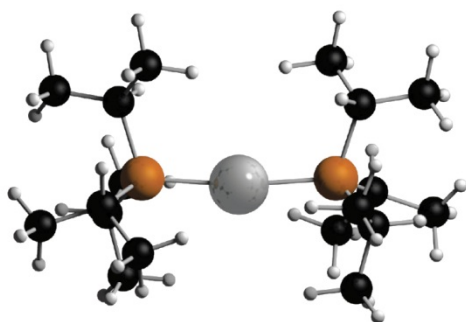


Chemicus Lando Wolters wint Dick Stufkens Prijs 2016

Geavanceerde quantumchemische berekeningen voor optimale katalysatoren

De Dick Stufkens Prijs 2016 voor het beste proefschrift van de Holland Research School of Molecular Chemistry (HRSMC) is toegekend aan Dr. Lando P. Wolters. In zijn proefschrift 'Chemical Bonding and Catalysis' zet Wolters belangrijke stappen in het rationeel ontwerp van katalysatoren, wat wel beschouwd wordt als de heilige graal van de katalyse. Wolters neemt de prijs op 17 november in ontvangst tijdens het jaarlijkse HRSMC symposium in het Gorlaeus Laboratorium in Leiden.

Het promotieonderzoek van Lando Wolters is gericht op katalysatorcomplexen die bestaan uit een overgangsmetaal en twee liganden. Deze d^{10} - ML_2 overgangsmetaalcomplexen faciliteren de oxidatieve additie, een chemische reactie die bij veel katalytische omzettingen een belangrijke rol speelt. Voorbeelden hiervan zijn de synthese van actieve stoffen voor medicijnen en van materialen voor OLED schermen.



Op basis van gedetailleerde analyses van de elektronische structuur met behulp van *state-of-the-art* quantumchemische berekeningen, heeft Wolters opgehelderd hoe het metaal en de liganden de werking van de katalysator beïnvloeden. Dat heeft

een aantal richtlijnen opgeleverd om katalysatoren te optimaliseren via een slimme keuze van metaal en liganden.

Deze inzichten leiden tot een betere selectiviteit van de katalytische omzetting, waarbij bijvoorbeeld gericht C–H of juist C–C bindingen verbroken worden. Of waarbij juist een bepaald type C–H binding wordt verbroken (zoals de methaan C–H binding in plaats van de ethaan C–H binding). Een selectieve katalysator is van groot belang voor de uiteindelijke efficiëntie van de katalytische omzetting.

Geavanceerde modellen

De geavanceerde quantumchemische modellen die Wolters in zijn proefschrift toepast zijn gebaseerd op Kohn-Sham moleculaire orbitaalberekeningen (voor de beschrijving van chemische bindingen en sterische effecten), gecorrigeerd voor relativistische effecten voor de zware overgangsmetalen, en met gebruik van dispersie om aantrekkende ligand-ligand interacties te beschrijven.

Op basis van dit quantumchemische fundament geeft Wolters een zeer doordachte analyse van de elektronische structuur en ontleedt hij de bindingsenergie in verschillende termen. Hij komt tot belangrijke inzichten door zowel de energie te beschouwen die nodig is om de reactanten te vervormen tot de geometrie die ze hebben in de overgangstoestand (de activeringsspanning), als ook de stabiliserende (orbitaal-) interacties die deze spanningsenergie deels compenseren.

Hoge kwaliteit

De jury van de Dick Stufkens Prijs is onder de indruk van de hoge kwaliteit van Wolters' proefschrift. Hij beschrijft tamelijk ingewikkelde chemische bindingen en de rol van een grote serie factoren (σ -binding, π -terugdonatie, sterische repulsie, dispersie, metaal d-orbitaalenergieën, beschikbaarheid van metaal s-orbitalen, *bite angle* flexibiliteit) op gedetailleerde en toch heldere wijze. De verkregen inzichten worden samengevat in eenvoudig te onthouden termen, zoals bijvoorbeeld de “d-regime katalysatoren” en “s-regime katalysatoren”, die zich volledig tegenovergesteld gedragen, afhankelijk van σ -donerende dan wel π -accepterende eigenschappen van de liganden. Hij laat zien hoe al deze factoren gebalanceerd kunnen worden om een specifiek doel te bereiken, zoals het selectief breken van één bepaalde binding. Experimentele onderzoeksgroepen passen de inzichten uit Wolters' proefschrift inmiddels al toe, hetgeen de toenemende relevantie van ‘in silico’ ontwerp van katalysatoren aantoont.



Lando Wolters voerde zijn promotieonderzoek uit bij de afdeling Theoretische Chemie aan de Vrije Universiteit Amsterdam bij promotor prof. dr. F. M. (Matthias) Bickelhaupt. Hij verdedigde zijn proefschrift op 22 maart 2016.

Beste proefschrift

De Dick Stufkens Prijs wordt jaarlijks toegekend voor de beste dissertatie van een promovendus behorend tot de Holland Research School of Molecular Chemistry (HRSMC). De prijs – voor het eerst uitgereikt in 2008 – bestaat uit een certificaat en een bedrag van 1000 Euro. Prof. dr. E.J. (Evert Jan) Baerends zal de prijs op 17 november 2016 namens de jury aan de winnaar uitreiken gedurende het jaarlijks HRSMC symposium dat deze keer wordt gehouden in het Gorlaeus Laboratoria van de Universiteit Leiden. Naast Lando Wolters, die een lezing geeft over zijn promotieonderzoek, zullen diverse promovendi en stafleden van de HRSMC lezingen en posters presenteren. Spinozaprijswinnaar prof. dr. Wilhelm T. S. Huck verzorgt een gastlezing.

Het symposium is ook toegankelijk voor niet-HRSMC leden. Meer informatie vindt u op <http://www.hrsmc.nl/symposium2016>

Over de HRSMC

De Holland Research School of Molecular Chemistry werd opgericht in 1994 en is geaccrediteerd door de Koninklijke Nederlandse Akademie voor Wetenschappen (KNAW). De onderzoeksschool omvat experimentele en theoretische groepen werkzaam op het gebied van de moleculaire chemie en fysica aan de Universiteit van Amsterdam, de Vrije Universiteit Amsterdam en de Universiteit Leiden. De school stelt zich ten doel optimale condities te scheppen voor samenwerking tussen de deelnemende groepen en organiseert bovendien een internationaal hogelijk gewaardeerd onderwijsprogramma voor promovendi. Prof. Dick Stufkens † ,

wetenschappelijk directeur gedurende de periode 1997 - 2001, was een van de drijvende krachten achter de HRSMC. Zijn inspanningen hebben sterk bijgedragen aan de internationale reputatie van de HRSMC.

[Download press release in English](#)

[Download press release in Dutch](#)