



Universiteit
Leiden
The Netherlands

The fight for a reactive site

Groot, I.M.N.

Citation

Groot, I. M. N. (2009, December 10). *The fight for a reactive site*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/14503>

Version: Corrected Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/14503>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

List of publications

This thesis is based on the following publications:

- *The dominance of steps in H_2 dissociation on stepped platinum*,
I. M. N. Groot, K. J. P. Schouten, A. W. Kleyn, and L. B. F. Juurlink,
in preparation. Chapter 8.
- *Reaction mechanisms of hydrogen dissociation on stepped platinum*,
I. M. N. Groot, K. J. P. Schouten, A. W. Kleyn, and L. B. F. Juurlink,
in preparation. Chapter 8.
- *Dynamics of dissociative adsorption of hydrogen on a CO-precovered Ru(0001) surface: A comparison of theoretical and experimental results*,
Irene M. N. Groot, Juan Carlos Juanes-Marcos, Cristina Díaz, Mark F. Somers
Roar A. Olsen and Geert-Jan Kroes,
Phys. Chem. Chem. Phys., submitted. Chapter 6.
- *A theoretical study of H_2 dissociation on $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ CO/Ru(0001)*,
I. M. N. Groot, J. C. Juanes-Marcos, R. A. Olsen, and G. J. Kroes,
J. Chem. Phys., submitted. Chapter 5.
- *Dynamics of hydrogen dissociation on stepped platinum*,
I. M. N. Groot, K. J. P. Schouten, A. W. Kleyn, and L. B. F. Juurlink,
J. Chem. Phys. **129**, 224707 (2008). Chapter 7.
- *Supersonic molecular beam studies of dissociative adsorption of H_2 on Ru(0001)*,
I. M. N. Groot, H. Ueta, M. J. T. C. van der Niet, A. W. Kleyn, and L. B. F. Juurlink,
J. Chem. Phys. **127**, 244701 (2007). Chapter 4.

Other publications:

- *The formation of HD from H_2 and D_2 on stepped platinum*,
I. M. N. Groot, K. J. P. Schouten, A. W. Kleyn, and L. B. F. Juurlink,
in preparation.
- *Selective poisoning of active sites for D_2 dissociation on platinum*,
C. Hahn, J. Shan, **I. M. N. Groot**, A. W. Kleyn, and L. B. F. Juurlink,
in preparation.

- *CO adsorption on Au(310) and Au(321): 6-fold coordinated gold atoms*,
C. J. Weststrate, E. Lundgren, J. N. Andersen, E. D. L. Rienks, A. C. Gluhoi, J. W. Bakker, **I. M. N. Groot**, and B. E. Nieuwenhuis, *Surf. Sci.* **603**, 2152 (2009).
- *CO blocking of D₂ dissociative adsorption on Ru(0001)*,
H. Ueta, **I. M. N. Groot**, M. A. Gleeson, S. Stolte, G. C. McBane, L. B. F. Juurlink, and A. W. Kleyn, *Chem. Phys. Chem.* **9**, 2372 (2008).
- *Infrared spectroscopy of solid CO-CO₂ mixtures and layers*,
F. A. van Broekhuizen, **I. M. N. Groot**, H. J. Fraser, E. F. van Dishoeck, and S. Schlemmer, *Astron. Astrophys.* **451**, 723 (2006).

Curriculum Vitae

Irene Groot werd geboren op 23 december 1980 in Amsterdam. Van 1993 tot 1998 bezocht zij het St.-Ignatiusgymnasium in Amsterdam, waar zij in 1998 eindexamen deed in tien vakken. Daarna heeft zij een jaar doorgebracht in Amurrio, Spanje, als uitwisselingsstudent. Zij heeft daar met goed gevolg het laatste jaar van de middelbare school doorlopen.

In 1999 ging Irene scheikunde studeren aan de Universiteit Leiden. Zij deed twee onderzoeksstages. De eerste in de moleculaire astrofysica groep van Prof. Dr. E. F. van Dishoeck op de Sterrewacht Leiden met als onderwerp het fysisch gedrag van CO en CO₂ ijs onder interstellaire condities. De tweede stage werd gedaan aan de University of California, Santa Barbara, onder leiding van Prof. Dr. A. M. Wodtke, met als onderwerp het bouwen van een ultrahoog vacuum opstelling om inelastische verstrooiing van HCl aan goud te meten.

In september 2005 begon Irene aan haar promotie-onderzoek onder leiding van Prof. Dr. A. W. Kleyn en Prof. Dr. G. J. Kroes, waar dit proefschrift het resultaat van is. Gedurende haar aanstelling begeleidde zij de master- en bachelor stage projecten van drie studenten. Ook was zij assistent bij de practica 'Duurzame synthese' en 'Practicum basisvaardigheden', en bij de werkgroep Theoretische Chemie. Gedurende haar onderzoek heeft Irene haar werk gepresenteerd op nationale (Netherlands Catalysis and Chemistry Conference in 2005-2008, NWO-CW Studiegroep 'Theorie en spectroscopie' bijeenkomst in 2005-2009, het Holland Research School of Molecular Chemistry symposium 2008 en bijeenkomst van de Dutch Vacuum Society 2007) en internationale conferenties (European Surface Science Conference 2006, Gordon Research Conference Dynamics at Surfaces 2007 en 2009, en de Mid-term review meeting van het Marie Curie netwerk 'Hydrogen' in 2008). Voor haar posterpresentatie bij de Dutch Vacuum Society heeft Irene de posterprijs ontvangen. Daarnaast heeft Irene de volgende cursussen en workshops gevolgd: 'Catalysis, an integrated approach' van NIOK, 'Grand challenges in electron chemistry and catalysis at interfaces' van PIRE-ECCI en ICMR in Santa Barbara, California (VS), 'Writing grant applications' van de Universiteit Leiden, en 'Subsidies aanvragen' van NWO.

Vanaf 1 januari 2010 zal Irene haar carrière als onderzoeker voortzetten aan het Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft in Berlijn, waar zij onder leiding van Prof. Dr. H.-J. Freund onderzoek zal doen naar sterke metaal-support interacties in Pt/CeO₂ katalysatoren.

Nawoord

De afgelopen tijd was geen gemakkelijke tijd. Met (letterlijk) veel bloed, zweet en tranen is dit proefschrift tot stand gekomen. Bloed, als ik weer eens wat openhaalde aan POTVIS, zweet om het apparaat open en dicht te krijgen, en tranen als het weer eens tegenzat. Al snel ben ik opgehouden met tellen hoe vaak ik het vacuum heb moeten verbreken om dingen te repareren: van lekkende choppermotor koelingen (nee, kaliumpermanganaat in het UHV is géén goed teken...) tot losgelaten thermokoppels, en van in stukje gechopte fotodiode sensoren tot scheefhangende skimmers. Ik denk dat er weinig NIET stuk is gegaan de afgelopen vier jaar... En dat is dan pas de experimentele kant. Computers lijken dan vriendelijker (geen bloed en zweet, wel tranen), maar dat is maar schijn. Vele bugs en frustraties (ik schrijf mijn commentaar bij mijn codes toch ook niet in het Nederlands, waarom mijn voorgangers dan wel in het Frans of Spaans??) hebben de revue gepasseerd.

Promoveren is als een potentiële energie-oppervlak. Het kent, evenals de dissociatie van waterstof aan CO/Ru(0001), meerdere barrières die overwonnen moeten worden, maar ook verraderlijke putten waar je in kan vallen. Maar als je dan op de top van de barrière staat en naar het eindpunt glijdt, weet je waar je het allemaal voor gedaan hebt. En net als het minimum energiep pad voor mijn systeem niet zo makkelijk te vinden was, gold dat ook voor mijn promotietraject. Maar met de hulp van vele mensen heb ik nu (bijna) het eindpunt bereikt.

Het bekende gezegde 'vele handen maken licht werk' geldt in letterlijke (het openen van die vreselijke ketting van de expansiekamer en het optakelen ervan om hem van POTVIS te tillen), maar ook in figuurlijke zin. Vele mensen hebben mijn eeuwige verhalen over de zoveelste uitbaksessie of de zoveelste gecrashte berekening moeten aanhoren. Nu het er dan bijna opzit, rest mij niets anders dan al deze mensen te bedanken.

Allereerst mijn collega's. Het werken in twee verschillende groepen brengt een hoop voordelen met zich mee: extra veel taart, etentjes en borrels. Thus, I would like to thank everybody from the SurfCat (what CASC??) and Theor group for all their support. De volgende mensen echter in het bijzonder. Ludo en Roar, woorden schieten tekort om uit te drukken hoeveel jullie voor mij gedaan hebben. Van het eindeloze geduld waarmee jullie respectievelijk een thermokoppel aan het kristal puntlassen, dan wel een bug zoeken, kan ik nog veel leren. En als het me even te veel werd, kon ik altijd met mijn verhaal bij jullie terecht. Roar, het is jammer dat je wegging uit Leiden, maar ook via e-mail en je bezoeken aan het Gorlaeus konden we goed blijven overleggen. En als ik weer eens de oplossing van een probleem aan het zoeken ben, denk ik altijd aan je woorden: 're-search, keep searching!'

Aart en Geert-Jan, ook jullie ben ik veel dank verschuldigd. Jullie waren altijd bereikbaar om de verzamelde data te bespreken. En ook als de planningen weer hopeloos uitliepen (Ik citeer Aart: 'UHV en moleculaire bundels samen, dat is ook gewoon wet van behoud van ellende', en 'De gouden regel van UHV: maak een planning, vermenigvuldig met 2 en verhoog

met een ordegrootte'), maakten jullie je geen zorgen dat het allemaal goed zou komen. Dit proefschrift is het bewijs van jullie gelijk. Geert-Jan, je hebt me voor korte tijd op het volgens jou rechte pad van de theorie gebracht. Ondanks dat ik besloten heb verder te gaan in de experimentele fysische chemie, heb ik geen moment spijt gehad van mijn keuze om een gecombineerde promotie te gaan doen. Ik weet zeker dat ik alles wat ik bij jou geleerd heb later nog goed kan gebruiken. En wat ziet het er mooi uit, hè, zo'n proefschrift in Latex?!

Janneke, met de hulp van Ellen hebben we samen de eerste geheimen van POTVIS doorgrond. En ook toen je niet langer mijn student was, maar mijn collega, kon ik altijd bij je terecht voor fysieke hulp en een gezellig praatje. Hirokazu, you came to Leiden because at Rijnhuizen you had difficulty to get HARPOEN to work. Your bad luck there was my luck here and together we took all data for H_2 dissociation on bare and CO-precovered Ru(0001). After you left we kept in touch and our excursions in the US together with Aart where a nice addition to the work we did. Klaas Jan, van het begin af aan ging onze samenwerking erg goed. Je leerde snel en was bereid hard te werken als de metingen af moesten. Ik ben blij dat POTVIS je niet heeft afgeschrikt en dat je nu zelf ook gaat promoveren in de wondere wereld van het ultrahoog vacuum. Juan Carlos, with a lot of patience and precision you were my guide in the maze of Dacapo and the different possible types of DFT calculations. Your way of explaining things was very clear, and if I sometimes got frustrated by the umptieth bug, you were cheerful and ready to help me solve the problem. Cristina, from you I learned the secrets of GROW and how to build a PES and perform QCT calculations. Mark, ik heb een hoop geleerd toen je me uitlegde hoe de QD code te gebruiken. En ook al heeft het even geduurd voor we alles goed werkend hadden met die gekke symmetrie van mijn eenheidscel, uiteindelijk hebben we mooie resultaten gekregen.

Voor de technische ondersteuning om POTVIS up and running te houden, wil ik graag Gijsbert, Martijn, Rob en Thijs van de fijnmechanische dienst, Johan van SurfCat, en Ko en Peter van de elektronische dienst bedanken, en voor ondersteuning bij de computerfaciliteiten Marc en Mark.

Nadat dan alle berekeningen en experimenten voltooid waren, kwam het schrijven van het proefschrift zelf. Goed voorbeeld doet goed volgen, en hierbij wil ik dan ook Ernst hartelijk danken voor zijn Latex template. Daarnaast waren de proefschriften van vele van mijn voorgangers een inspiratiebron voor de eerste drie hoofdstukken van dit boekje. Bernd, Ellen, Ernst, Kees-Jan en Mark: bedankt!

Ook in de persoonlijke sfeer zijn er veel dingen gebeurd de afgelopen vier jaar, leuke en minder leuke. Voor een luisterend oor en het te lijf gaan van alle bureaucratie wil ik graag Lillian, Monique, Paul, Pauline en Stan bedanken. Zonder jullie was het niet gelukt! Paul, ik vind het fantastisch met hoeveel enthousiasme en toewijding je altijd hebt geluisterd naar mijn problemen en overwinningen. Ook al begrijpen we elkaar vaak niet als het over het werk gaat, je nuchterheid maakte dat ik het na zo'n gesprek weer zonniger inzag. Ik ben heel blij dat we samen naar Berlijn gaan, en dat je me inderdaad, zoals de planning was, daarin rechts hebt ingehaald. En als laatste: Lieve papa, hardlopen deden we toch al niet samen. Gelukkig kunnen we nog steeds over de meest uiteenlopende dingen praten, en weet je je nog steeds de meest gekke feitjes te herinneren. Ook je cynische humor blijft geweldig!

Leiden, oktober 2009

Het drukken van dit proefschrift is mede mogelijk gemaakt door een financiële bijdrage van de J. E. Jurriaanse Stichting.