



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Development of highly accurate density functionals for H₂ dissociation on transition metals

Smeets, E.W.F.

Citation

Smeets, E. W. F. (2021, June 29). *Development of highly accurate density functionals for H₂ dissociation on transition metals*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/3193529>

Version: 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/1887/3193529>

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

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <https://hdl.handle.net/1887/3193529> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Smeets, E.W.F.

Title: Developement of highly accurate density functionals for H₂ dissociation on transition metlas

Issue Date: 2021-06-29

Curriculum vitae

Egidius Wilhelmus François Smeets is geboren op 21 mei 1989 te Sittard. In 2007 heeft hij zijn gymnasiumdiploma behaald aan de Trevianum scholengroep, tevens te Sittard. In datzelfde jaar is hij begonnen aan de bachelorstudie "Natuurkunde" aan de Universiteit Leiden. Twee jaar later is hij, in 2009, overgestapt naar de bachelorstudie "Molecular Science and Technology" aan de Universiteit Leiden en de Technische Universiteit Delft. Na deze studie in 2015 met succes te hebben afgerond, is hij aan de masterstudie "Chemistry" aan de Universiteit Leiden begonnen. Als onderdeel van deze studie heeft hij een onderzoeksstage gedaan bij de groep Theoretische Chemie van prof. dr. Geert-Jan Kroes, waar hij begeleid is door dr. Gernot Füchsel. In 2017 heeft hij zijn masterstudie afgerond, waarna hij in datzelfde jaar is begonnen als promovendus in dezelfde groep, in het Leids Instituut voor Chemisch onderzoek.

List of publications

- Füchsel, G.; Cao, K.; Er, S.; Smeets, E. W. F.; Kleyn, A. W.; Juurlink, L. B. F.; Kroes, G.-J. Anomalous dependence of the reactivity on the presence of steps: dissociation of D₂ on Cu(211). *J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, *9*, 170–175
- Ghassemi, E. N.; Smeets, E. W. F.; Somers, M. F.; Kroes, G.-J.; Groot, I. M.; Juurlink, L. B.; Füchsel, G. Transferability of the specific reaction parameter density functional for H₂ + Pt(111) to H₂ + Pt(211). *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 2973–2986
- Smeets, E. W. F.; Voss, J.; Kroes, G.-J. Specific reaction parameter density functional based on the meta-generalized gradient approximation: application to H₂ + Cu(111) and H₂ + Ag(111). *J. Phys. Chem. A* **2019**, *123*, 5395–5406
- Smeets, E. W. F.; Füchsel, G.; Kroes, G.-J. Quantum dynamics of dissociative chemisorption of H₂ on the Stepped Cu(211) Surface. *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 23049–23063
- Tchakoua, T.; Smeets, E. W. F.; Somers, M.; Kroes, G.-J. Toward a specific reaction parameter density functional for H₂ + Ni(111): comparison of theory with molecular beam sticking experiments. *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 20420–20433
- Gerrits, N.; Geweke, J.; Smeets, E. W. F.; Voss, J.; Wodtke, A. M.; Kroes, G.-J. Closing the Gap Between Experiment and Theory: Reactive Scattering of HCl from Au(111). *J. Phys. Chem. C* **2020**, *124*, 15944–15960

- Gerrits, N.; Smeets, E. W. F.; Vuckovic, S.; Powell, A. D.; Doblhoff-Dier, K.; Kroes, G.-J. Density functional theory for molecule–metal surface reactions: When does the generalized gradient approximation get it right, and what to do if it does not. *J. Phys. Chem. Lett.*, **2020**, *11*, 10552–10560
- Smeets, E. W. F.; Kroes, G.-J. Designing new SRP density functionals including non-local vdW-DF2 correlation for $H_2 + Cu(111)$ and their transferability to $H_2 + Ag(111)$, $Au(111)$ and $Pt(111)$. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 7875–7901
- Smeets, E. W. F.; Kroes, G.-J. Performance of made-simple meta-GGA functionals with rVV10 non-local correlation for $H_2 + Cu(111)$, $D_2 + Ag(111)$, $H_2 + Au(111)$ and $D_2 + Pt(111)$. *J. Phys. Chem. C* **2021**, DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c11034