



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

Stellingen behorende bij het proefschrift:

”Development of highly accurate density functionals for H_2 dissociation on transition metals”

- I. Het is mogelijk om niet-empirische dichtheidsfunctionalen te maken op het niveau van de meta-GGA die zowel een goede beschrijving geven van een overgangsmetaal als de interactie van moleculair waterstof met een oppervlak van dat overgangsmetaal. (Hoofdstuk 3)
- II. Moleculaire bundelexperimenten waarbij moleculair waterstof reageert aan Cu(111) of Cu(211) kunnen zeer goed beschreven worden met behulp van quasi-klassieke methoden. (Hoofdstukken 4 en 5)
- III. De overdraagbaarheid van specifieke reactieparameter dichtheidsfunctionalen voor de reactie van moleculair waterstof aan overgangsmetaaloppervlakken kan worden verbeterd door het gebruik van niet-lokale correlatie. (Hoofdstukken 5 en 6)
- IV. Het Cu(211) oppervlak onderscheidt zich van de Cu(111) terrassen en Cu(100) traptredes waaruit het bestaat, en kan niet worden beschreven als een som van zijn onderdelen met betrekking tot de oriëntatie-afhankelijke reactiedynamica van H_2 reagerend aan Cu(211). (Hoofdstuk 4)
- V. Het gebrek aan nauwkeurig beschreven moleculaire bundelexperimenten van de reactie van kleine moleculen aan overgangsmetaaloppervlakken hindert de verdere ontwikkeling van specifieke reactieparameter dichtheidsfunctionalen voor deze systemen. (Kroes G.-J.; Phys. Chem. Chem. Phys., 23, 8962-9048, 2021)
- VI. Zolang het verschil tussen de uitreearbeid van het overgangsmetaal en de elektronaffiniteit van het molecuul groter is dan 7 eV kan een dergelijk systeem prima beschreven worden met een semi-lokale dichtheidsfunctionaal voor de uitwisselingsenergie. (N. Gerrits et al.; J. Phys. Chem. Lett. 11, 24, 10552–10560, 2020)
- VII. Het is een nogal grove benadering om moleculair waterstof te beschouwen als bolvormig in klassieke baan berekeningen. (G.-J. Kroes et al.; J. Chem. Phys., 1990, 93, 287-311)
- VIII. Het kiezen van de juiste (samenstelling van een) dichtheidsfunctionaal om een bepaald experiment te simuleren is geen sinecure gelet op de wildgroei aan mogelijke ingrediënten. (J.P. Perdew et al. Phys. Rev. Lett. 77, 3865-3868, 1996; J.P. Perdew et al.; Phys. Rev. Lett. 100, 136406, 2008.) Helaas is een juiste keuze noodzakelijk om tot een betrouwbare voorspelling te komen.
- IX. Gebrekkige documentatie en tekortschietend onderhoud van wetenschappelijke computer-codes kost meer onderzoekstijd dan het oplevert. (S. Portegies Zwart; Science, 361, 6406, 979-980, 2018)
- X. De druk op promovendi is inmiddels zo hoog opgelopen dat dit tot een onaanvaardbaar hoge prevalentie van ernstige psychische problemen leidt. (C. Woolston; Nature, 575, 403-406, 2019)
- XI. De gebrekkige baanzekerheid voor jonge onderzoekers leidt niet alleen tot een hoge uitstroom maar ook tot een verschraling van nieuwsgierigheidsgedreven onderzoek.
- XII. Gelet op het dalende aantal dialectsprekers in Limburg is het hoogstwaarschijnlijk geen kwestie van geduld tot heel Holland Limburgs lult. (M. Jansen et al.; Atlas van de Nederlandse taal. Terra Lannoo, Amsterdam, 2017)