



Universiteit  
Leiden

The Netherlands

## Highly accurate simulations and benchmarking of molecule-surface reactions

Tchakoua, T.

### Citation

Tchakoua, T. (2023, July 4). *Highly accurate simulations and benchmarking of molecule-surface reactions*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/3628451>

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/1887/3628451>

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

## Curriculum vitae

Théophile Tchakoua is geboren op 3 juni 1988 te Foumban (Kameroen). In 2007 heeft hij zijn baccalauréat behaald aan de Lycée de Foumban. In datzelfde jaar is hij begonnen aan de bachelorstudie "Natuurkunde en scheikunde" aan de Universiteit Douala. Drie jaar later is hij, in 2010, overgestapt naar de bachelorstudie "Natuurkunde en scheikunde" aan de Universiteit Douala (Kameroen). Na deze studie in 2011, is hij aan de masterstudie "Physics and engineering sciences option Physics of matter and radiation" aan de Universiteit Douala begonnen. In 2014 heeft hij zijn masterstudie afgerond, waarna hij in datzelfde jaar is begonnen met de docent Natuurkunde opleiding aan de Universiteit Bamenda (Kameroen). In 2016 heeft hij zijn docent masterstudie afgerond, en in het volgende jaar 2017 heeft hij nog een stralingsdeskundige masterstudie afgerond in het IAEA programma in het Algiers nucleair onderzoekscentrum. In 2018 begon hij zijn promotieonderzoek in de groep Theoretische Chemie van Prof. dr. Geert-Jan Kroes, in het Leids Instituut voor Chemisch onderzoek. Vanaf april 2023 doet hij onderzoek bij de Utrecht Universiteit, in de "Materials Chemistry and Catalysis" groep van Dr. Nongnuch Artrith. Daar zal hij zich richten op het combineren van de voorspellende kracht van kwantumchemische berekeningen met de efficiëntie van AI/machine learning-benaderingen voor snelle en nauwkeurige in silico-voorspellingen voor grote systemen.

## List of publications

- **Tchakoua, T.**; Smeets, E. W.; Somers, M.; Kroes, G. J. Toward a Specific Reaction Parameter Density Functional for  $\text{H}_2 + \text{Ni}(111)$ : Comparison of Theory with Molecular Beam Sticking Experiments. *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 20420–20433
- **Tchakoua, T.**; Gerrits, N.; Smeets, E. W. F.; Kroes, G. J. SBH17: Benchmark Database of Barrier Heights for Dissociative Chemisorption on Transition Metal Surfaces. *J. Chem. Theory Comput.* **2023**, *19*, 245–270
- **Tchakoua, T.**; Powell, A. D.; Gerrits, N.; Somers, M. F.; Doblhoff-Dier, K.; Busnengo, H. F.; Kroes, G. J. Simulating highly activated sticking of  $\text{H}_2$  on  $\text{Al}(110)$ : Quantum versus quasi-classical dynamics. *J. Phys. Chem. C* **2023**, *127*, 1932–7447
- **Tchakoua, T.**; Jansen, T.; van Nies, Y.; van den Elshout, R.; van Boxmeer, B. A. B.; Poort, S. P.; Ackermans, M. G.; Beltrão, G. S.; Hildebrand, S. A.; Beekman, S. E. J.; van der Drift, T.; Kaart, S.; Šantić, A.; Somers, M. F.; Kroes, G. J. Constructing mixed density functionals for describing dissociative chemisorption on metal surfaces: some basic principles. *J. Phys. Chem. C* **Submitted**

## Afterword

Chaque thèse est une histoire. Voici mon histoire, je la raconte. La partie remerciements est généralement un ardu exercice d'un travail de thèse. Ardu car, durant toutes ces années de travail, nous nous sommes côtoyés, nous avons les uns et autres échangés nos humeurs avec comme résultante, une dynamique d'humeurs alternative. Des humeurs parfois positives et négatives, nous avons toutefois su en tirer une leçon positive pour notre travail. Ardu également, car la crainte d'oublier quelqu'un ou chacun de ces moments est toujours présente. Bien qu'incapable de lister tout le monde, qui aurait contribué à la manifestation de la présente conception d'orfèvre, permettez-moi tout naturellement de remercier ceux sans qui cette thèse n'aurait jamais vu le jour: mes encadreurs **Geert-Jan Kroes** et **Mark Frans Somers**. Ils ont eu la patience de m'encadrer pour ces quatre dernières années. Ils m'ont facilité la tâche et ont permis à ce que ce projet de thèse voit le jour aujourd'hui, et ce malgré les deux années difficiles de la crise covid-19. Je vous suis redevable pour des nombreuses discussions que nous avons eues tous ensemble, non seulement au sujet de ce travail, mais aussi sur des orientations adressant la vie en général.

Cette thèse a été réalisé au sein du laboratoire de chimie théorique de l'université de Leiden (LIC). C'est pourquoi je veux remercier collégialement mes collègues de laboratoire **Guido, Elham, Nick, Andrew, Tim, Paul, Sayan, Davide, Francesco, Helen, Soroush, Khosrow, Bauke, Justina, Robert, Marten, Brian, Seeni, Hossein, Jonathon, Lukas, Floris, Joan, Jörg, Katharina, Thanja, Marc** pour les discussions scientifiques et aussi pour les meilleurs moments de chaque jour à la pause café.

Durant cette thèse, j'ai rencontré bien des gens au *Gorlaeus Building* et aussi dans les locaux de l'université de Leiden. Je ne peux sûrement pas tous les citer, mais je tiens à les remercier pour tout. Je remercie la secrétaire du département **Michelle** pour son assistance et ainsi que le personnel du service international pour étudiant étranger (SCIS), particulièrement **Yvonne, Esther, Simone, Saskia** pour toutes assistances en ce qui concerne les procédures administratives de l'IND.

J'adresse également mes remerciements à **Marius de Hond** avec qui j'ai parcouru toutes les artères de Leiden et qui, a pendant deux années été mon coach linguistique en néerlandais. Tu l'as toujours fait avec patience et méthode. Merci également à **Barbera** à travers le programme *Gilde Samenspraak*.

Dans cette longue liste des remerciements, je tiens à exprimer ma communion et toute ma gratitude à la communauté protestante de Leiden (**Protestantse Marekerkgemeente**) où j'ai durant ces dernières années entretenu et cultivé ma foi chrétienne à travers les sermons dominicaux ainsi que les activités des divers groupes d'étude biblique auxquelles j'ai participé. Merci pour l'attention particulière que j'ai reçue de votre part, ceci surtout pendant les moments épineux.

Je tiens aussi à remercier **Yassine Bensenane**, **Omar** et **Boubakar** pour leur amitié. Vous avez su au travers de nos différentes discussions m'encourager.

Et puis, la famille est certainement un soutien indispensable. Je remercie ma maman **Anne** qui a toujours été là pour moi. Tu comprends très bien pourquoi maman et vouloir donner une explication ici pour tout ce que tu as fait dans ma vie serait insignifiant. Je remercie mon grand-frère **Mesmer**, qui a été là et n'a cessé de m'encourager dans cette aventure.

En fin, j'ai réservé les derniers mots de ma plume et les plus beaux à **Cladis** et **Esther**. Je sais que ça n'a pas été facile de vivre pendant cinq années mon absence en tant que époux et père. Notre famille a grandi en même temps que ce projet de thèse, le premier servant de socle solide à l'épanouissement du second. Votre soutien et encouragement constants m'ont été d'un grand réconfort et ont contribué à l'aboutissement de ce travail. Trouvez ici le fruit de votre patience.