

Juryrapport

AkzoNobel Afstudeerprijs voor Chemie en Procestechnologie 2018

E.B. (Ellen) Sterk MSc (Universiteit Utrecht)

CO₂ methanation over Ni and its structure sensitivity. A computational study

De jury van de AkzoNobel Afstudeerprijs voor Chemie en Procestechnologie 2018, bestaande uit Koen Wiedhaup en Matthias Bickelhaupt, is onder de indruk van de doorgaans zeer hoge kwaliteit van de genomineerde kandidaten. Zij is verder verheugd over het feit dat een zorgvuldige voorselectie "zonder aanzien des geslachts" tot een shortlist van potentiële prijswinnaars heeft geleid met een man/vrouw verhouding van exact 2-staat-tot-2.

De uiteindelijke winnaar van de AkzoNobel Afstudeerprijs voor Chemie en Procestechnologie 2018 is Ellen Sterk uit de groep van Prof. Weckhuysen en Dr. Filot van de Universiteit Utrecht. Deze prijs wordt haar verleend voor haar uitstekende werk, beschreven in een afstudeerscriptie met de titel "CO₂ methanation over Ni and its structure sensitivity - A computational study".

Mevrouw Sterk heeft een uitmuntende scriptie geschreven, op indrukwekkende wijze opgebouwd vanuit een heldere vraagstelling inzake de katalytische omzetting van CO₂ in CH₄. Onderzoek en verslag zijn prima gestructureerd en uitgevoerd via het theoretisch en kwantummechanisch modelleren van de drie mogelijke omzettingsmechanismen, uiteindelijk op rationele wijze uitkomend op het meest waarschijnlijke proces, via het zogenaamde carbide-mechanisme. Een belangrijk aspect van dit werk is het diepe inzicht in de onderliggende fysisch-chemische principes, met name de kwestie welke aspecten van het katalytisch actieve nikkeloppervlak van belang zijn voor een gunstig verloop van de CO₂-hydrogenering. Mevrouw Sterk toont hiermee tevens op indrukwekkende wijze de kracht aan van de moderne computationele en theoretische chemie bij het oplossen van praktische scheikundige problemen.

Het onderhavige onderzoek is voorts van aanzienlijke maatschappelijke relevantie. Door de gewonnen inzichten in de vorming van methaan uit kooldioxide en duurzaam geproduceerd waterstof draagt deze studie bij aan de ontwikkeling van duurzame energie en energie-dragers onder gelijktijdige reductie van de effectieve uitstoot van het ongewenste gas CO₂.

Samenvattend: Mevrouw Sterk heeft inventiviteit, doelgerichtheid en praktische vaardigheden (op nanoschaal!) tentoongespreid bij het kwantumchemisch aanpakken van een moeilijk chemisch probleem van grote maatschappelijke relevantie. Vermeldenswaardig is dat zij hierin doorzettingsvermogen heeft betracht: zij heeft haar masterstudie tot een succesvol einde gebracht, ondanks een door persoonlijke omstandigheden noodzakelijke onderbreking van zes jaar. Dit heeft geleid tot belangrijke nieuwe inzichten, neergelegd in een helder geschreven scriptie die ondanks pittige theoretische benaderingen "een genot is om te lezen"!

Prof. dr. F.M. (Matthias) Bickelhaupt FRSC, hoogleraar theoretische organische chemie en biokatalyse Vrije Universiteit, bijzonder hoogleraar theoretische organische chemie Radboud Universiteit Nijmegen

Dr. K. (Koen) Wiedhaup, oud-directeur R&D Organon/Akzo Nobel Pharma

De jury vergaderde op 24 oktober 2018 onder leiding van Mr. M.E. Bierman-Beukema toe Water, oud-ondervoorzitter KHMW. Daarnaast waren ter vergadering aanwezig Prof. dr. A.P. IJzerman, secretaris natuurwetenschappen, en Drs. S. van Manen, secretaris.