

Catalytic methane conversion with single-site porous catalysts: a computational approach

Szécsényi, Ágnes

DOI

[10.4233/uuid:ed0bee26-e6f7-45c0-a56d-1b3fdfbac1e2](https://doi.org/10.4233/uuid:ed0bee26-e6f7-45c0-a56d-1b3fdfbac1e2)

Publication date

2019

Document Version

Final published version

Citation (APA)

Szécsényi, Á. (2019). *Catalytic methane conversion with single-site porous catalysts: a computational approach*. [Dissertation (TU Delft), Delft University of Technology]. <https://doi.org/10.4233/uuid:ed0bee26-e6f7-45c0-a56d-1b3fdfbac1e2>

Important note

To cite this publication, please use the final published version (if applicable). Please check the document version above.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download, forward or distribute the text or part of it, without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license such as Creative Commons.

Takedown policy

Please contact us and provide details if you believe this document breaches copyrights. We will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Propositions

accompanying the dissertation

CATALYTIC METHANE CONVERSION WITH SINGLE-SITE POROUS CATALYSTS: A COMPUTATIONAL APPROACH

by

Ágnes SZÉCSÉNYI

1. H_2O_2 in combination with Fe catalysts will never be a feasible oxidant in selective methane oxidation. (*Chapter 1 and 2*)
2. There is too much attention on C-H bond dissociation, and too little on the rest of the reaction steps. (*Chapter 2*)
3. Our chemical intuition is mainly based on molecular orbital theory. Where multireference treatment is required, there is a high chance that our chemical intuition will fail. (*Chapter 4*)
4. Using single determinant methods for multireference problems is like attempting to model near-light-speed particles with Newton's laws and saying that we don't have anything better.
5. When comparing the catalytic performance of different transition metal clusters with the aid of DFT, researchers should keep in mind that the metals are not directly interchangeable, and their oxidation state has to be adjusted before the calculations. (*Catal. Sci. Technol.*, **7** (2017) 1470-1477.)
6. Research articles should be available to the public free of charge.
7. The affirmative action (the policy of promoting the education and employment of members of groups that are known to have previously suffered from discrimination), of women quota in parliament, at companies or in academia, is harmful for both women and men.
8. Solving overpopulation would mitigate many other pressing problems, like climate change.
9. Making people feel guilty about a certain issue, like environmental pollution, will result in turning away from the problem or even anger towards the subject. Positive attitude is a better motivator for actions.
10. Poor countries cannot afford to invest in renewable energy, because fossil fuel based backup power plants are necessary in equal capacity to compensate for the fluctuation in the energy produced from renewable sources.

These propositions are regarded as opposable and defensible, and have been approved as such by promoters prof. dr. E. A. Pidko and prof. dr. J. Gascon.

Stellingen

behorende bij het proefschrift

CATALYTIC METHANE CONVERSION WITH SINGLE-SITE POROUS CATALYSTS: A COMPUTATIONAL APPROACH

door

Ágnes SZÉCSÉNYI

1. H_2O_2 zal in combinatie met Fe katalysatoren nooit een haalbare oxidator zijn in selectieve methaan oxidatie (Hoofdstuk 1 en 2).
2. Er is teveel aandacht voor de dissociatie-energie van de C-H binding en te weinig voor de overige reactiestappen. (Hoofdstuk 2)
3. Onze chemische intuïtie is voornamelijk gebaseerd op moleculaire orbitaaltheorie. Wanneer een multireferentie benadering is vereist, is de kans groot dat onze chemische intuïtie zal falen. (Hoofdstuk 4)
4. Het gebruik van enkelvoudige determinantmethoden voor multireferentie problemen is vergelijkbaar met pogen deeltjes met bijna-lichtsnelheid te modelleren met de wet van Newton en zeggen dat wij niets beters hebben.
5. Bij het vergelijken van de katalytische prestatie van verschillende overgangsmetaalclusters met behulp van DFT, moeten onderzoekers in gedachten houden dat de metalen niet direct uitwisselbaar zijn en dat hun oxidatietoestand moet worden bijgesteld voor de berekeningen. (*Catal. Sci. Technol.*, 7 (2017) 1470-1477.)
6. Onderzoeksartikelen zouden gratis voor publiek beschikbaar moeten zijn.
7. Positieve actie (het beleid ter bevordering van opleiding en werk voor leden van groepen waarvan bekend is dat deze eerder hebben geleden onder discriminatie), van vrouwen quota in het parlement, binnen bedrijven, of in de academische wereld, is schadelijk voor zowel vrouwen als mannen.
8. Het oplossen van overbevolking zou veel andere dringende problemen verlichten, zoals klimaatverandering.
9. Mensen zich schuldig laten voelen over een bepaalde kwestie, zoals milieuvervuiling, zal leiden tot wegstappen van het probleem of zelfs tot woede ten aanzien van het onderwerp. Een positieve houding is een betere motivator voor gedragsverandering.
10. Arme landen kunnen zich niet veroorloven om te investeren in hernieuwbare energie omdat een gelijke, op fossiele brandstof gebaseerde, reservecapaciteit nodig is om te kunnen compenseren voor de fluctuaties in door hernieuwbare bronnen geproduceerde energie.

Deze stellingen worden oponeerbaar en verdedigbaar geacht en zijn als zodanig goedgekeurd door promotors prof. dr. E. A. Pidko en prof. dr. J. Gascon.