Chemie: onderzoek

Inzicht in de fundamenten: een combinatie van theorie en praktijk

Nagenoeg alle wetenschappen maken gebruik van chemie, dikwijls in min of meer toegepaste vorm. Om chemische processen te begrijpen en te beheersen zijn inzicht in de fundamentele principes en modellen in de chemie essentieel. Deze inzichten worden verkregen door een combinatie van theoretisch en praktisch onderzoek, waarin wiskunde, fysica en chemie hand in hand gaan.

Praktijk vóór de theorie

Wat is de (3D-) structuur van een nieuw gevormde molecule? Welke atomen zijn aanwezig? Welke eigenschappen kunnen we verwachten?

Antwoord op deze vragen kan men krijgen door de nieuwe stof te onderwerpen aan een grondig onderzoek. In de chemie zijn verschillende technieken voorhanden waarmee structuren kunnen worden geanalyseerd en gekarakteriseerd. Eens de structuur gekend, kunnen eigenschappen en (chemisch) gedrag worden voorspeld.

Theorie vóór de praktijk

In de **theoretische chemie** worden, op basis van een model betreffende de structuur van materie, (wiskundige) uitdrukkingen opgesteld die toelaten eigenschappen van deze materie (zoals bijv. reactiviteit) te voorspellen. Deze voorspellingen worden afgetoetst door middel van simulaties en/of concrete experimenten. De overeenkomst tussen theorie en experiment laat toe de validiteit van het model te evalueren.

Deze wiskundige en enigszins abstracte benadering van de chemie wordt o.a. gebruikt om de activiteit van potentiële geneesmiddelen te voorspellen alvorens moleculen zijn gesynthetiseerd en bij het ontwerpen van nieuwe katalysatoren voor de toekomst.

Theorie en praktijk: een wisselwerking!

Het spreekt vanzelf dat, bij onderzoek naar structuur en gedrag van materie, een voortdurende wisselwerking optreedt tussen de theorie en de praktijk: experimenten worden uitgevoerd om het model te testen, het model wordt gebruikt om heel gericht experimenten te ontwerpen. En het is deze voortdurende interactie die uiteindelijk leidt tot verhoogd inzicht in de fundamenten van de chemie!

TOEPASSINGEN

Medicijnontwikkeling, LED-verlichting, supergeleiding, zelfreinigend glas, enzymen, nano-partikels, katalysatoren, lasers, ...