

Digitale Chemie

De Scheikunde van de Toekomst

Dr. Pascal Vermeeren

Universitair Docent
Theoretische Chemie
p.vermeeren@vu.nl

Dr. Thomas Hansen

Universitair Docent
Organische Chemie
t.hansen@vu.nl

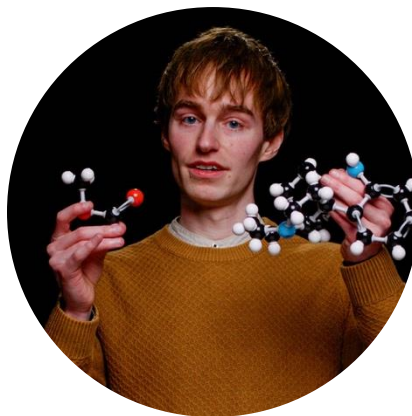
Dr. Guusje van Schaick

Docent
Analytische Chemie
g.van.schaick2@vu.nl

Outreach commissie Scheikunde & Farmaceutische Wetenschappen



Dr. Pascal Vermeeren
Theoretische Chemie



Dr. Thomas Hansen
Organische Chemie



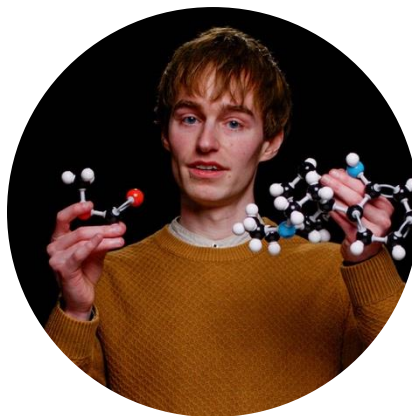
Dr. Guusje van Schaick
Analytische Chemie

- Onderzoeker-in-de-Klas
- Klas-bij-de-Onderzoeker
- Proefstuderen Scheikunde
- B.Sc. & M.Sc. Open Dagen
- Chemie in Amsterdam
- Weekend van de Wetenschap
- Digitale Chemie: De Scheikunde van de Toekomst

Outreach commissie Scheikunde & Farmaceutische Wetenschappen



Dr. Pascal Vermeeren
Theoretische Chemie



Dr. Thomas Hansen
Organische Chemie



Dr. Guusje van Schaick
Analytische Chemie

- Onderzoeker-in-de-Klas
- Klas-bij-de-Onderzoeker
- Proefstuderen Scheikunde
- B.Sc. & M.Sc. Open Dagen
- Chemie in Amsterdam
- Weekend van de Wetenschap
- **Digitale Chemie: De Scheikunde van de Toekomst**

Scheikunde op de middelbare school

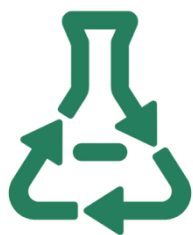
Hoe zien middelbare scholieren scheikunde:

- Proefjes in het lab
- Mol berekeningen
- Zuur-base reacties
- Titratie



Scheikunde is veel meer dan dat!

Verskillende thema's binnen onze studie scheikunde



Synthesis & Sustainability



Analytics & Photonics

Chemistry of Life



Quantum & Computing

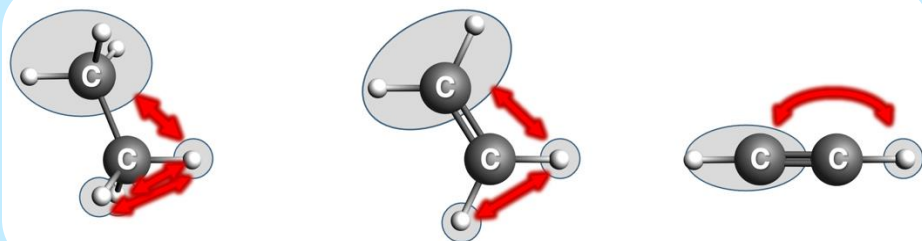




Quantum & Computing

Digitale chemie wordt gebruikt om eigenschappen van atomen, moleculen of systemen te **berekenen**, **begrijpen** en **voorspellen**.

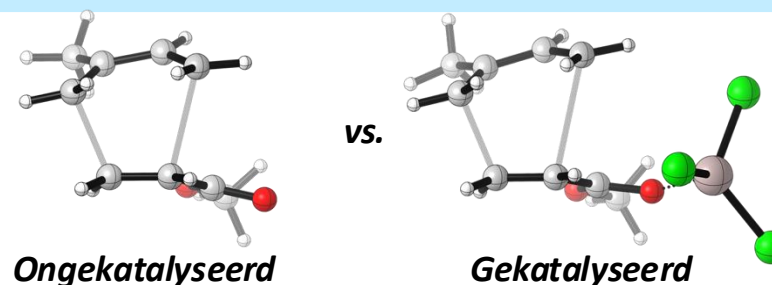
Oorsprong van Chemische Binding



Chem. Eur. J. **2021**, 27, 7074
Nat. Commun. **2023**, 14, 3872

J. Am. Chem. Soc. **2024**, 146, 25701
J. Chem. Phys. **2025**, 162, 044305

Oorsprong van Chemische Reactiviteit



Ongekatalyseerd

Gekatalyseerd

Angew. Chem. Int. Ed. **2020**, 59, 6201

Chem. Sci. **2020**, 11, 8105

Angew. Chem. Int. Ed. **2021**, 60, 20840

Chem. Eur. J. **2025**, e202501810

Digitale chemie – middelbare schoolvakken

Scheikunde



Natuurkunde



Digitale Chemie

Wiskunde



Informatica



Ons project – Digitale Chemie: De Scheikunde van de Toekomst

Doel:

Ontwikkelen lesmateriaal over Digitale Chemie voor het scheikunde VWO curriculum op middelbare scholen.

Hoe?

1. Lesmodule Digitale Chemie met bijbehorende computerpractica.
2. Digitale demonstratieproef database als versterking van het huidige scheikunde curriculum.

Ons project – Digitale Chemie: De Scheikunde van de Toekomst



Home > Nieuws > Bètadecanensubsidie voor Guusje van Schaick, Thomas Hansen en Pascal Vermeeren

Bètadecanensubsidie voor Guusje van Schaick, Thomas Hansen en Pascal Vermeeren



Delen    

16 oktober 2024

De outreach commissie van de afdeling Scheikunde en Farmaceutische Wetenschappen onder leiding van Guusje van Schaick, Thomas Hansen en Pascal Vermeeren heeft subsidie ontvangen vanuit outreach Bètadecanen voor hun project "Digitale Chemie: de Scheikunde van de Toekomst".

Bètadecanen NL

Webpagina van het Landelijk Overleg Bètadecanen

[ABOUT](#) [ONDERZOEK](#) [HOGER ONDERWIJS](#) [OUTREACH](#) [BÈTA-LERARENKAMER](#)

Projecten miv 2025

De volgende projecten hebben voor 2025 een subsidie ontvangen vanuit Outreach Beta:

Digitale Chemie: de scheikunde van de toekomst

Scheikunde wordt traditioneel op de middelbare school gezien als wetenschap waarbij onderzoekers experimenten uitvoeren in het laboratorium, maar in het huidige scheikundige onderzoek is de computer niet meer weg te denken. In dit project wordt een lesmodule Digitale Chemie ontwikkeld die complementair is aan het huidige scheikunde curriculum op de middelbare school en een versterkende rol kan spelen door verschillende scheikundige concepten tot leven te brengen. Dit vernieuwende lesmateriaal zorgt ervoor dat scholieren in een vroeg stadium geënthousiasmeerd worden voor de verschillende facetten binnen de scheikunde en de raakvlakken met de andere bètawetenschappen.



Planning

2025

- In gesprek met scheikunde docenten ☒
- Database samenstellen ☒
- Stap-voor-stap handleiding opstellen ☒
- Woutschoten Chemie ☒

2026

- Lesmodule en computerpracticum ontwikkelen
- Werven van middelbare scholen
- Lesmodule uitrollen

2027

- Verbeteren van de lesmodule & database
- Kant-en-klare lesmodule op landelijk niveau



Ons project – Digitale Chemie: De Scheikunde van de Toekomst

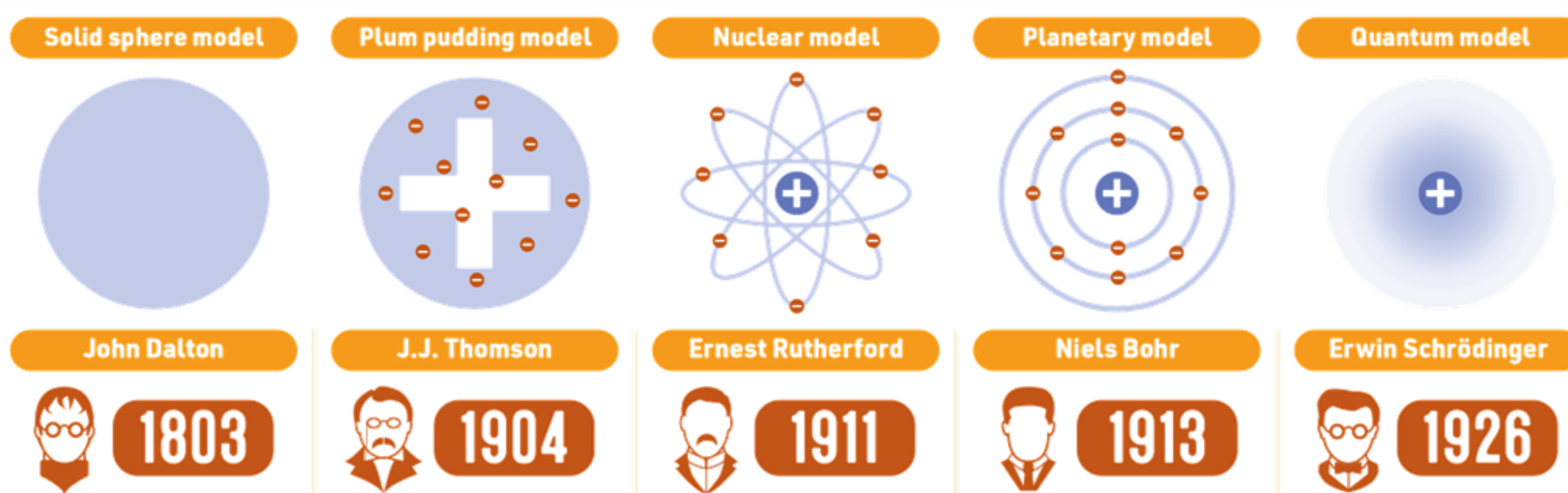
Doel:

Ontwikkelen lesmateriaal over Digitale Chemie voor het scheikunde VWO curriculum op middelbare scholen.

Hoe?

- 1. Lesmodule Digitale Chemie met bijbehorende computerpractica.**
2. Digitale demonstratieproef database als versterking van het huidige scheikunde curriculum.

Atomen: De Bouwstenen van de Chemie



Valentieschil-elektronenpaar-repulsie theorie: VSEPR



Lineair



Plat vlak



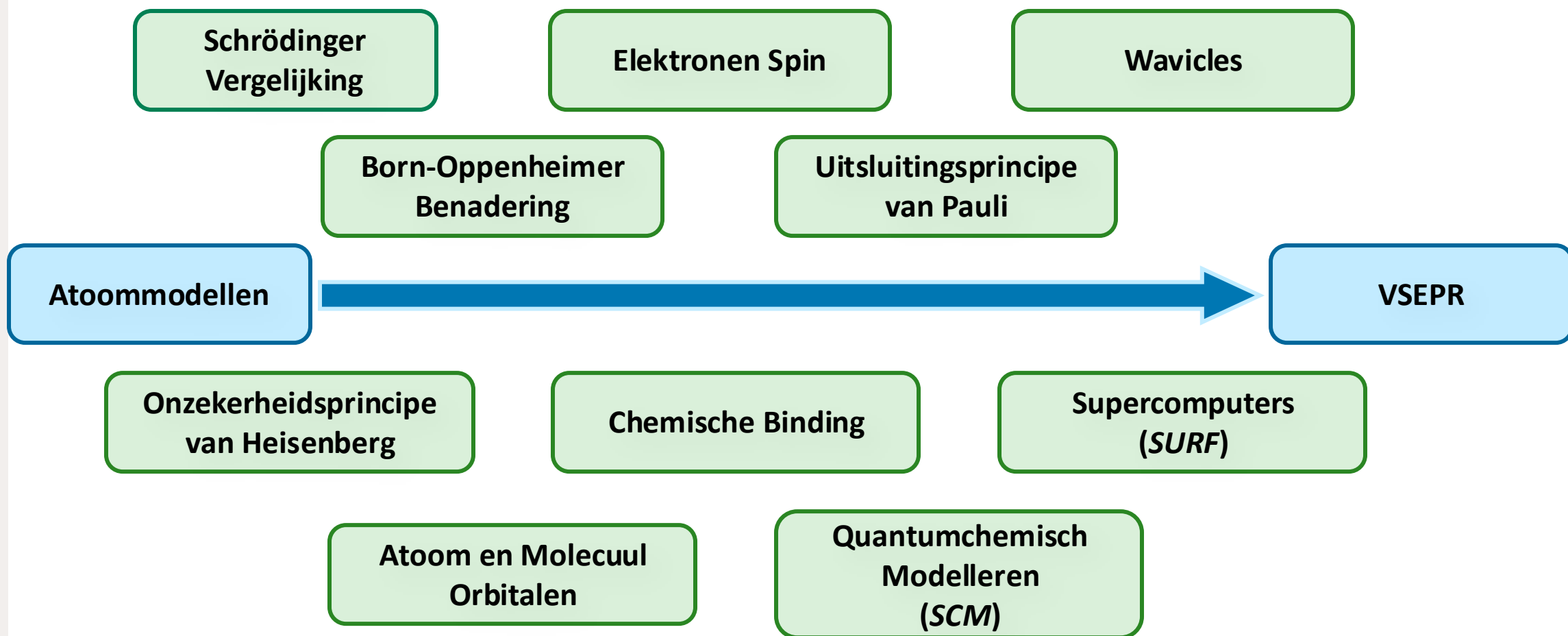
Tetraëder

Lesmodule Digitale Chemie:

- Theorielessen, opdrachten en computerpracticum
- Verschillende vormen:
 - 1 lesuur (alleen theorie en opdrachten)
 - 2 lesuren (alleen theorie en opdrachten)
 - 4 lesuren (theorie, opdrachten en computerpracticum)

Waarom zien moleculen eruit zoals ze eruitzien?

Lesmodule Digitale Chemie: Waarom zien moleculen eruit zoals ze eruitzien?



Veranderingen in het Scheikunde Curriculum

Subdomein D2: Fundamentele vraagstukken

Eindterm 34

De leerling verkent de bouw van atomen en het ontwerp van moleculen met specifieke functies. (E)

Het gaat hierbij om:

- beschrijven van een onderzoeksgebied binnen het onderzoek naar de bouw van deeltjes en stoffen;
- verwerken van een actuele natuurwetenschappelijke reviewstudie bij het beschrijven van concepten die relevant zijn voor het onderzoeksgebied;
- communiceren over verzamelde kennis;
- kwantummechanische atoombouw, kwantummechanische molecuulbouw, moleculair modelleren en het ontwerpen van stoffen vanuit het principe *Sustainable by design*;
- reflecteren op de praktische en maatschappelijke relevantie van dit onderzoek.

Lesmodule is beschikbaar vanaf 2026

Ons project – Digitale Chemie: De Scheikunde van de Toekomst

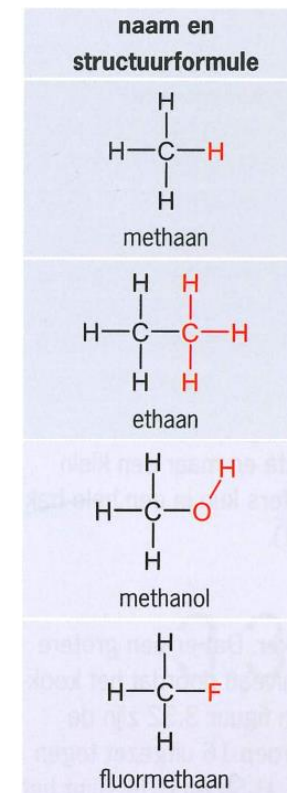
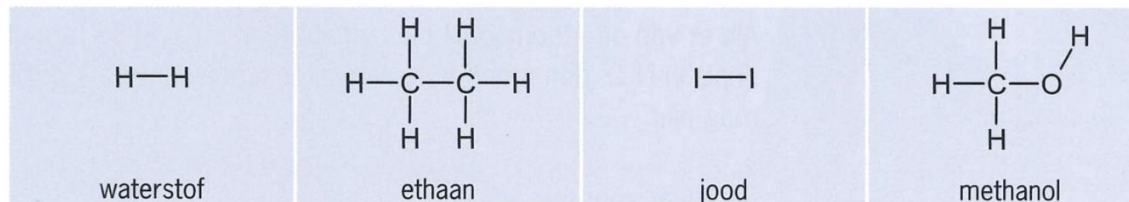
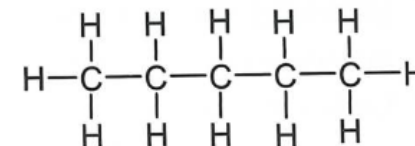
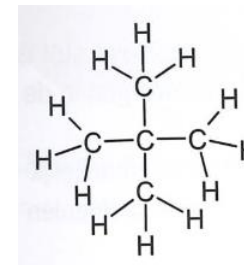
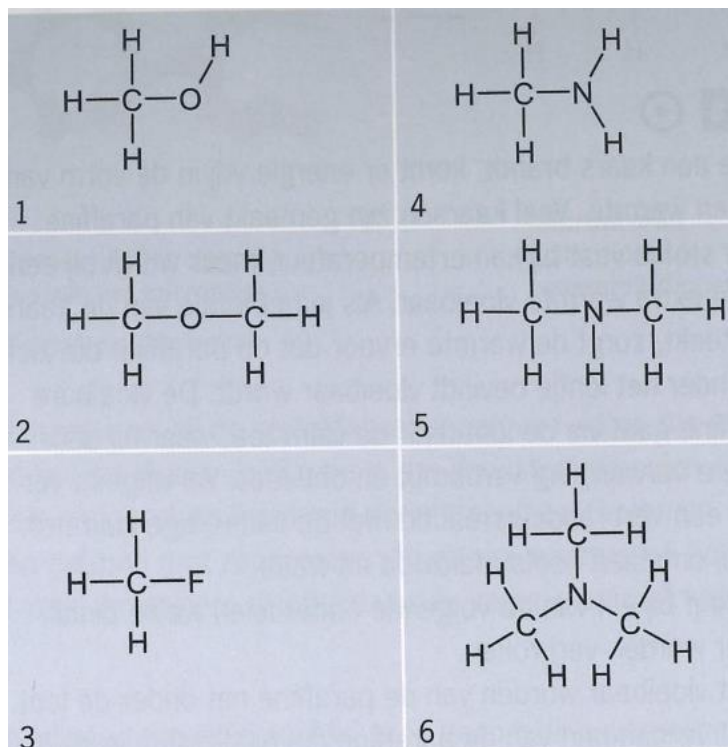
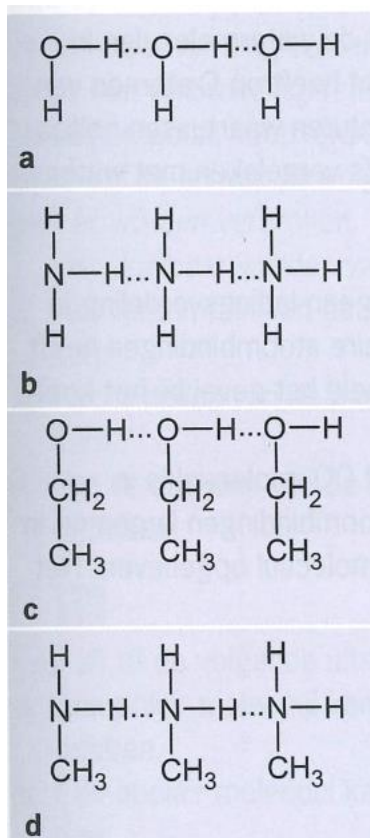
Doel:

Ontwikkelen lesmateriaal over Digitale Chemie voor het scheikunde VWO curriculum op middelbare scholen.

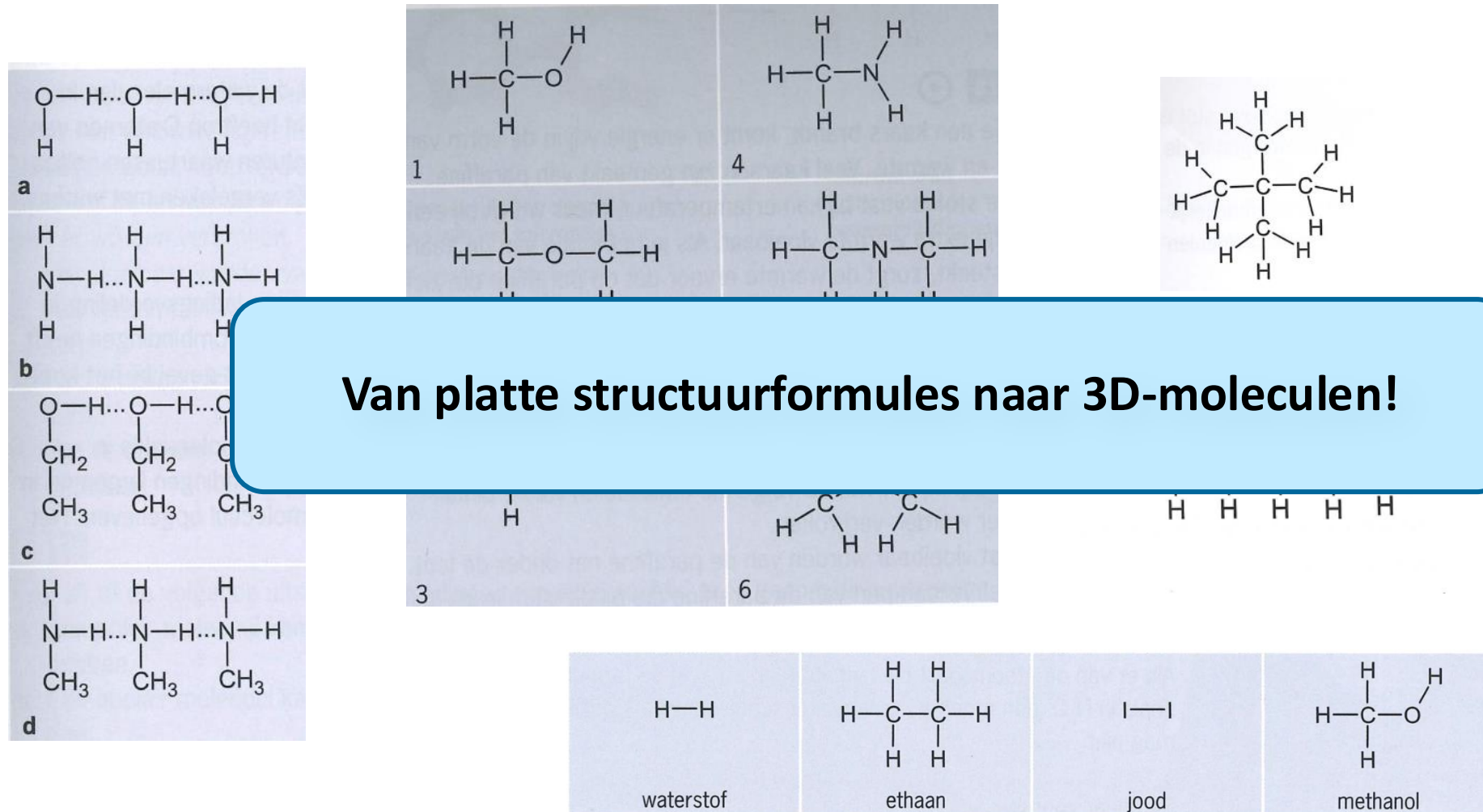
Hoe?

1. Lesmodule Digitale Chemie met bijbehorende computerpractica.
2. **Digitale demonstratieproef database als versterking van het huidige scheikunde curriculum.**

Digitale demonstratieproef database – Moleculen in de boeken

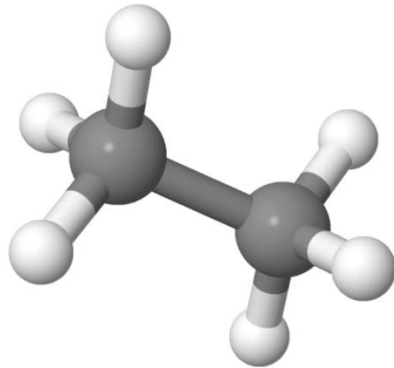
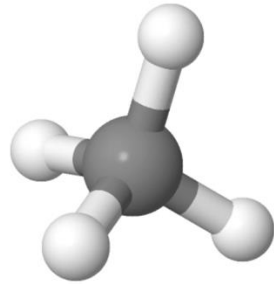


Digitale demonstratieproef database – Moleculen in de boeken

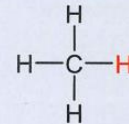


naam en structuurformule
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$ methaan
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$ ethaan
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$ methanol
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{F} \\ \\ \text{H} \end{array}$ fluormethaan

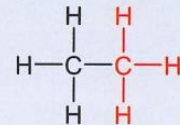
Digitale demonstratieproef database – Moleculen in 3D



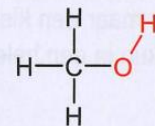
naam en
structuurformule



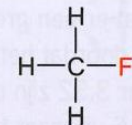
methaan



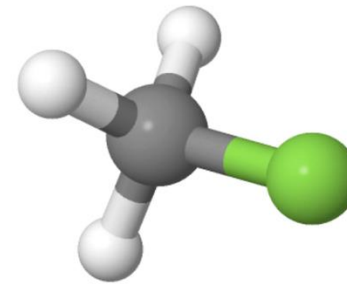
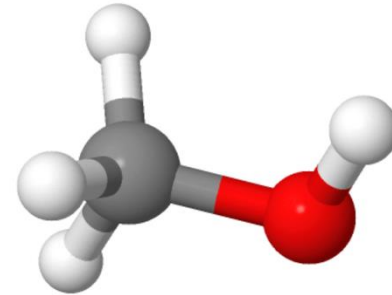
ethaan



methanol



fluormethaan



Digitale demonstratieproef database

Simpele koolwaterstoffen
(met karakteristieke groepen)

VSEPR-methode

DNA en
biologische systemen

Materialen

Vibraties van organische moleculen

C-atoomroosters (diamant)

Cis-trans-isomerie

Verbrandingsreacties

Spiegelbeeldisomerie

Vetten, koolhydraten en
aminozuren

Chemische reacties
en reactiepaden

- Interactieve database om moleculen te visualiseren, analyseren en vergelijken
- Geschikt om om in de les te demonstreren of leerlingen zelf te laten ontdekken
- Uitgebreide handleiding beschikbaar op de website
- Bevat bijna 1000 moleculen en reacties op basis van quantumchemische berekeningen!



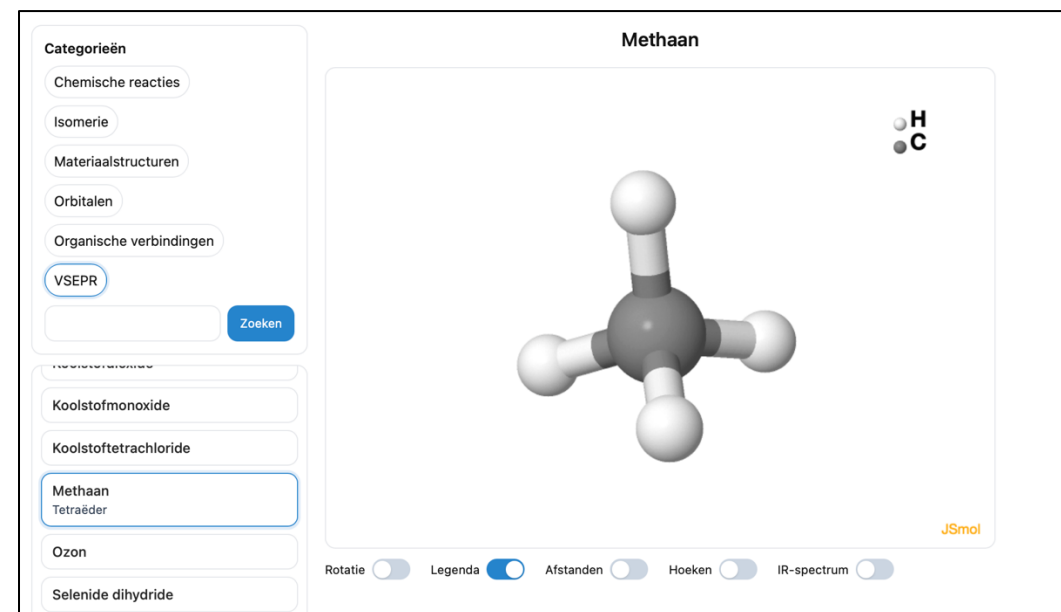
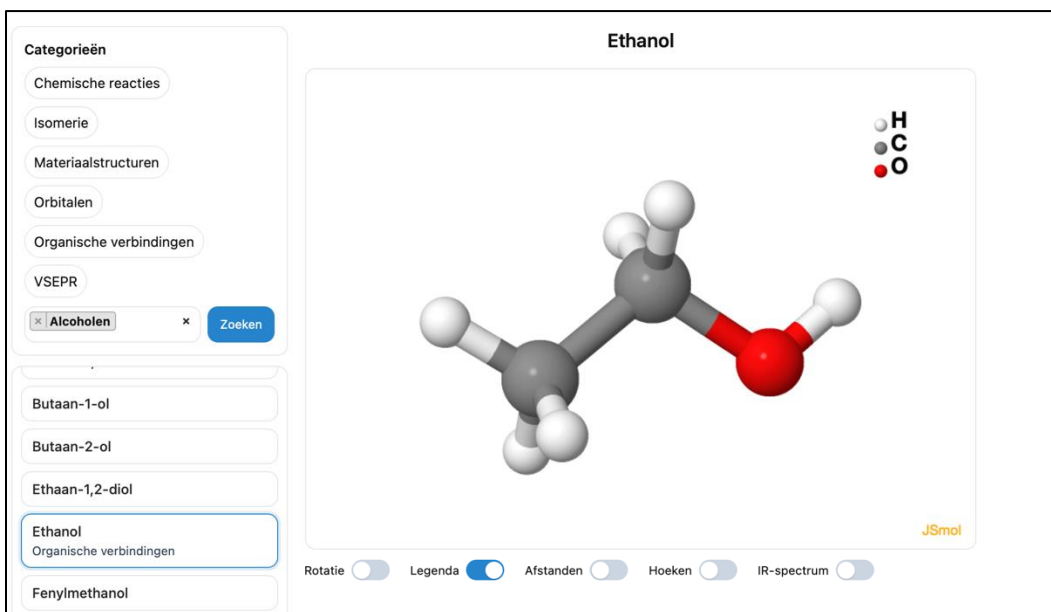
Molecuulwijzer

Molecuulwijzer – functies en toepassingen



Zoeken & visualiseren

- Zoek een molecuulnaam of een kenmerk, zoals alcoholen
- Blader door categorieën, zoals *VSEPR*

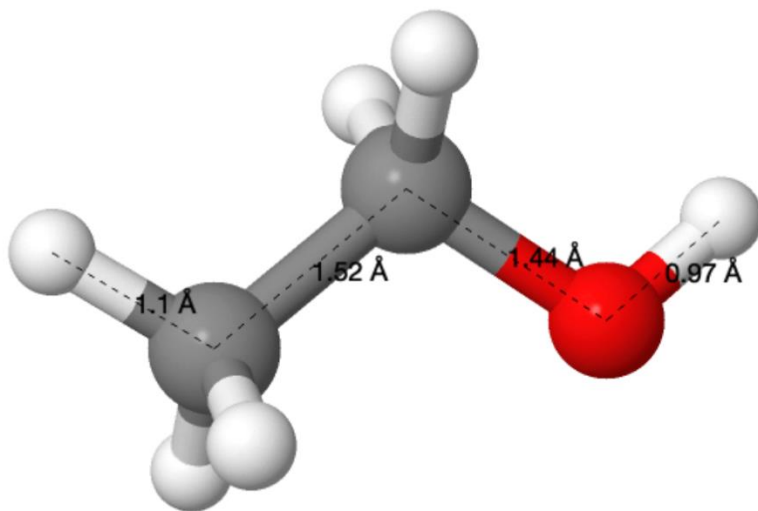


Molecuulwijzer – functies en toepassingen

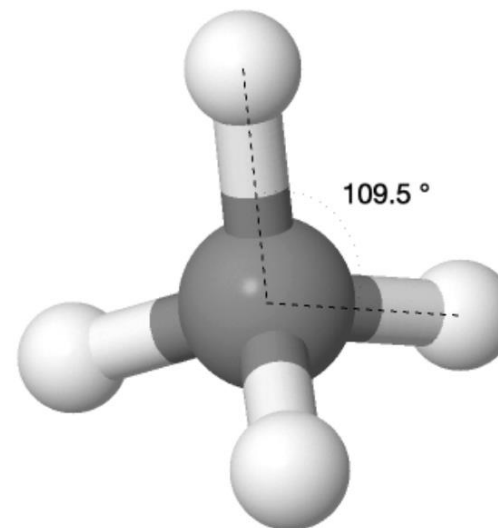


Analyseren en metingen uitvoeren

- Meet bindingslengtes in Ångström (Å) tussen twee atomen
- Meet bindingshoeken in graden (°) tussen drie atomen



Ethanol



Methaan

Meer informatie online!



- Extra details beschikbaar op de website
- Uitleg van basis- en analysefuncties
- Uitgebreide handleiding online

**Digitale Chemie** [Home](#) [Molecuulwijzer](#) [Lesmodule](#) [Over ons](#) [Contact](#)


[Open de Molecuulwijzer](#)

Over de Molecuulwijzer

De Molecuulwijzer is een interactieve tool waarmee je moleculen kunt zoeken, bekijken en analyseren.

Hieronder lees je meer over de meest gebruikte functies.

Download de uitgebreide handleiding voor meer details en praktische tips.

[Download handleiding \(PDF\)](#)

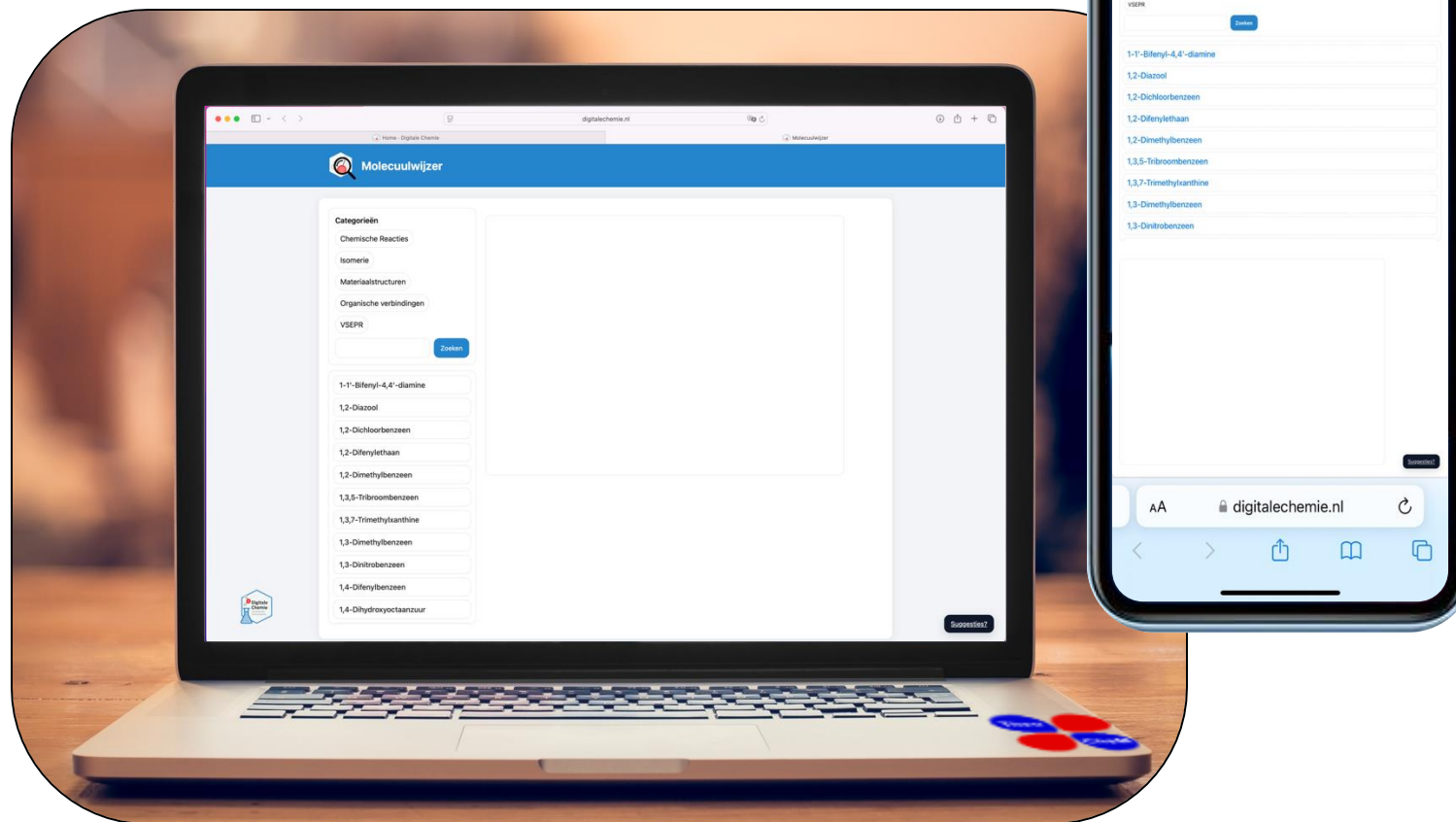
Basisfuncties

- Moleculen vinden en selecteren 
- Molecuulcategorieën verkennen en selecteren 
- Moleculen weergeven 
- Molecuulweergave aanpassen 

Analysefuncties

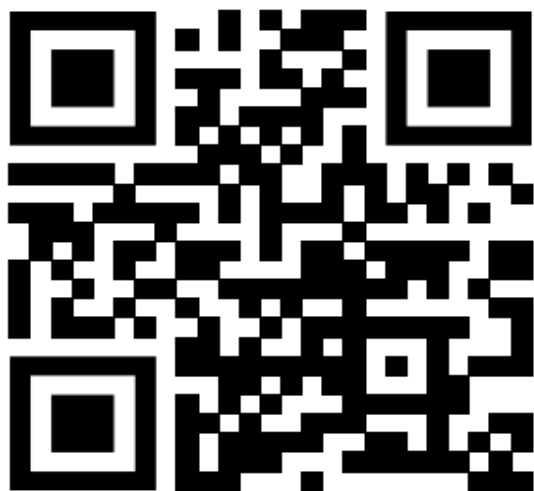
- Afstanden en hoeken meten in moleculen 
- IR-spectra weergeven en analyseren 
- Chemische reacties weergeven en analyseren 

Molecuulwijzer



Ontwikkeld voor de computer, maar werkt ook op de telefoon!

Molecuulwijzer



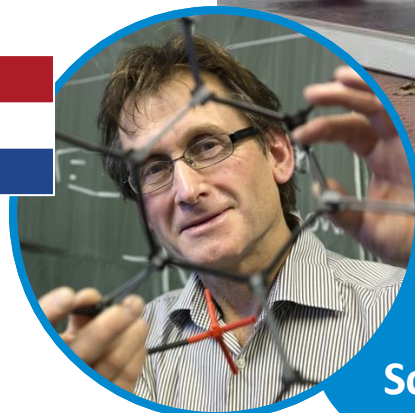
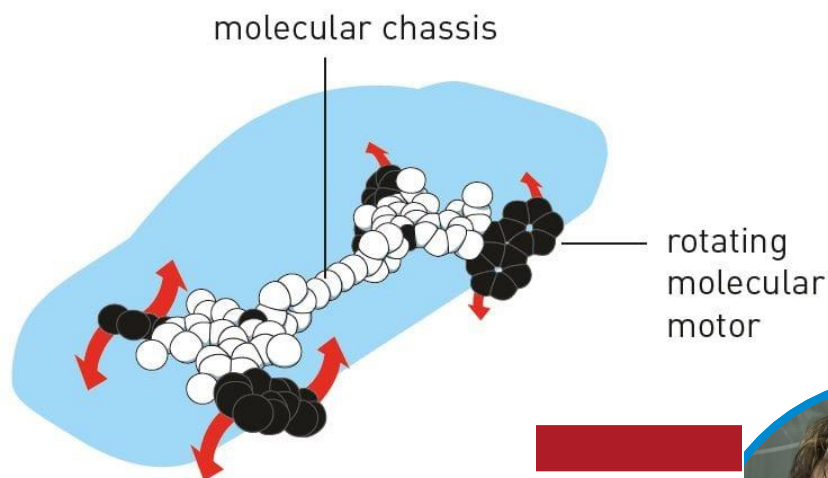
digitalechemie.nl



Ga naar de website en
open de Molecuulwijzer

Molecuulwijzer quiz

Hoe groot is Ben Feringa's moleculaire motor eigenlijk?



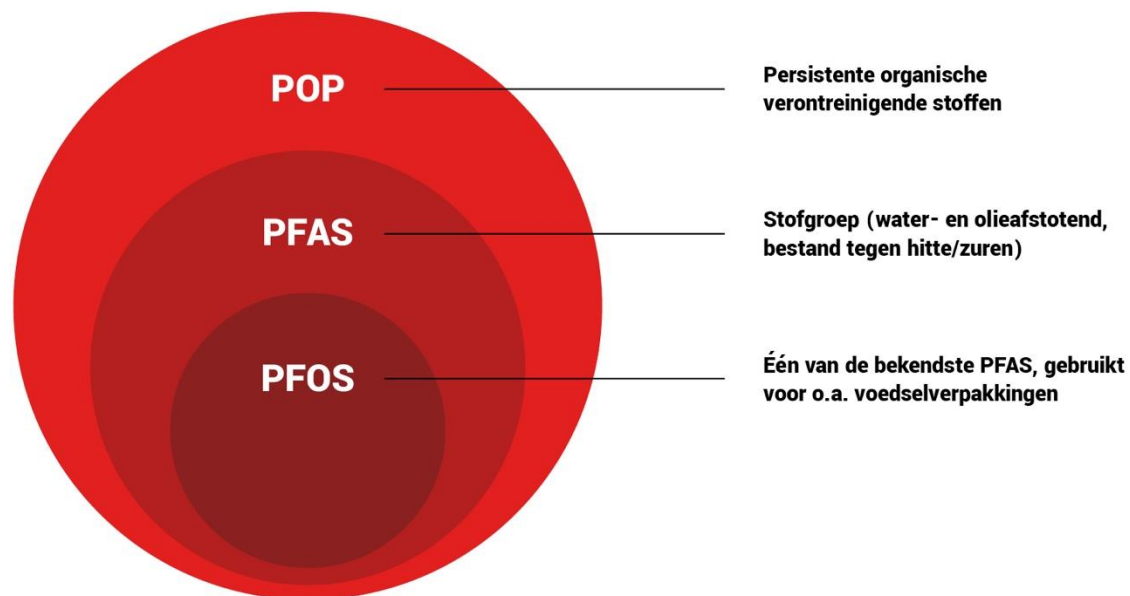
Nobelprijs in de
Scheikunde van 2016



Molecuulwijzer quiz



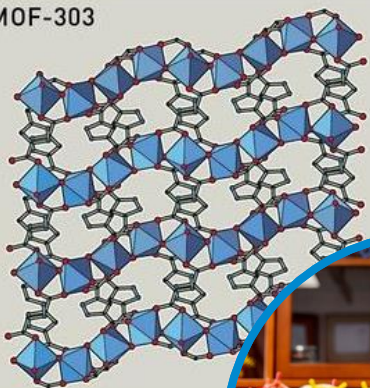
**PFOS: water- en vetafstotend, maar waarom?
En misschien te mooi om waar te zijn..**



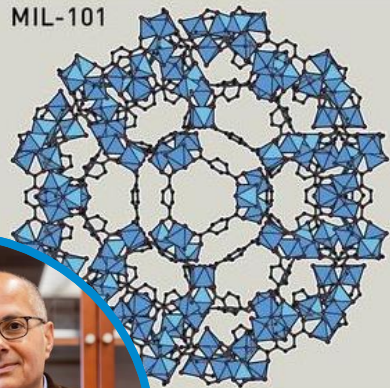
Molecuulwijzer quiz

Wat past er allemaal in de 'moleculaire sponzen' die onlangs de Nobelprijs wonnen?

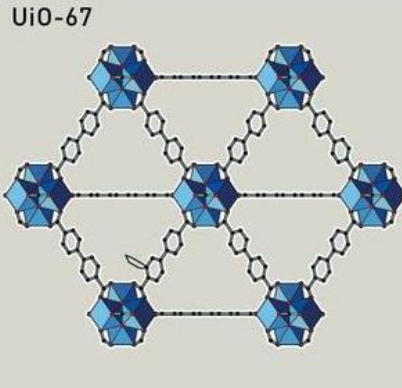
MOF-303



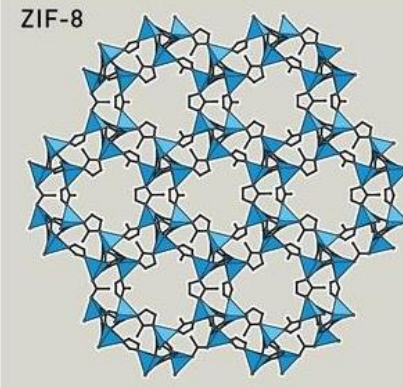
MIL-101



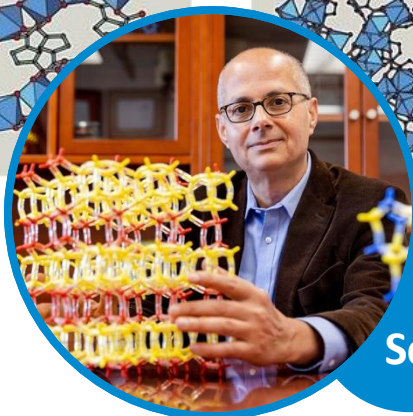
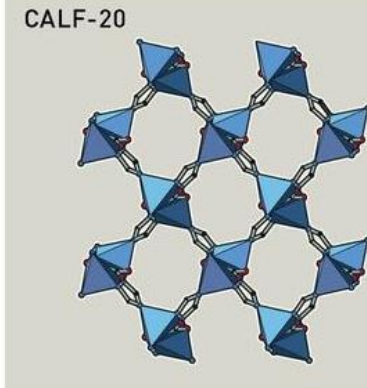
UiO-67



ZIF-8



CALF-20



**Nobelprijs in de
Scheikunde van 2025**

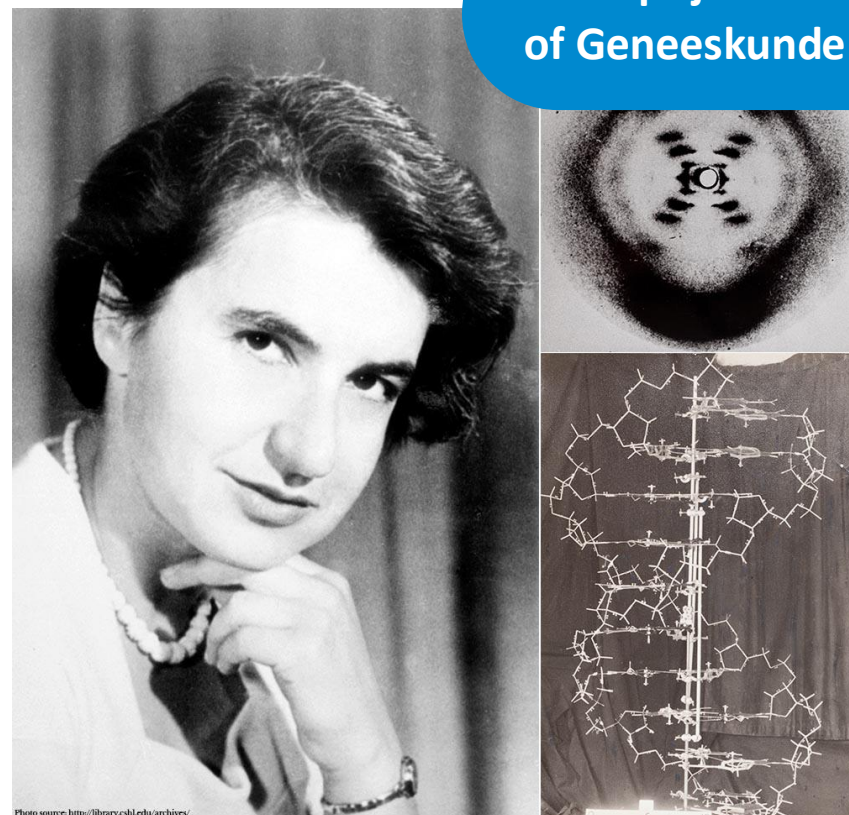


Molecuulwijzer quiz

Welke kant draait DNA ook al weer op?



Nobelprijs in de Fysiologie
of Geneeskunde van 1962



Digitale chemie: *De Scheikunde van de Toekomst*

Heb je vragen, ideeën of wil je samenwerken?

Mail ons!

digitalechemie@vu.nl



digitalechemie.nl

