

nodigt U graag uit op de openbare verdediging van het proefschrift van

Jordi Sans Duñó

ter behaling van de graad van Doctor in Wetenschappen

Gezamenlijk doctoraat met University of Lleida (UdL)

Titel van het proefschrift:

Measuring the availability of metals in large mixtures with diffusive gradients in thin films (DGT) devices

Promotors:

Prof. dr. Jaume Puy (UdL)

Prof. dr. Joan Cecilia (UdL)

Prof. dr. Yue Gao (VUB)

De verdediging heeft plaats op

Dinsdag 4 juli 2023 om 10h u in aula de graus, ETSEA (UdL), Lleida, Spain

De verdediging kan ook online gevolgd worden via: <https://eu.bbcollab.com/guest/9acb79cc779944909fedfb51d6835654>

Samenstelling van de jury

Prof. dr. Francesc Mas (University of Barcelona, voorzitter)

Prof. dr. Carlos Rey (UdL, secretaris)

Prof. dr. Frederik Tielens (VUB)

dr. Pablo Lodeiro (Lleida University)

Em. prof. dr. Willy Baeyens (VUB)

Dr. Sergi Diez (IDAEA-SCIC)

Curriculum vitae

Jordi Sans-Duñó heeft zijn bachelor Scheikunde afgerond en zijn MSc behaald over computationele modellering in Natuurkunde, Scheikunde en Biologie aan de Universiteit van Barcelona (UB). Daarna kreeg hij een PhD-beurs aan de Universiteit van Lleida (UdL) om de beschikbaarheid van metalen in complexe mengsels met DGT-systemen te bestuderen. Tijdens zijn onderzoeksverblijf bij AMGC werd hij tevens medepromovendus aan de VUB, waar hij de beschikbaarheid van Hg in aanwezigheid van DOM analyseerde en ook een MSc-scriptie superviseerde. Tijdens zijn doctoraat was hij co-auteur van drie artikels in internationale peer-reviewed tijdschriften, waarvan twee als eerste auteur.

Abstract van het doctoraatsonderzoek

Sporenmetalen zijn ofwel een voedingsstof of een giftige stof, afhankelijk van hun concentratie en speciatie. Met speciatie bedoelen we de verdeling van de totale concentratie van een element over zijn verschillende chemische vormen. Het is een relevant concept om de biologische beschikbaarheid van sporenmetalen voor planten of micro-organismen te begrijpen, omdat de opname in veel gevallen afhangt van de mobiliteit en dissociatiekinetiek van de verbindingen die in het systeem aanwezig zijn. Om dit probleem aan te pakken, heeft dit proefschrift zich gericht op de interpretatie van de experimentele gegevens van "Diffusive Gradients in Thin-films (DGT)" zodat de beschikbaarheid van metalen in natuurlijke wateren gekend is.

DGT is een passieve sampler die de fysisch-chemische processen nabootst die betrokken zijn bij de opname van metalen door organismen door het meten van een metaalflux die het oppervlak van die micro-organismen en algen bereikt. De flux wordt vervolgens uitgedrukt als een vrije metaalconcentratie die dezelfde accumulatie zou veroorzaken in een systeem met alleen vrij metaal. Deze concentratie staat bekend als de beschikbare DGT-concentratie (c_{DGT}).

In dit proefschrift hebben we een theoretisch raamwerk ontwikkeld dat ons in staat stelt om c_{DGT} op te splitsen in termen van de concentratie, mobiliteit en labiliteit van elke metaalvorm die aanwezig is in het systeem.

Hiertoe hebben we experimentele metingen uitgevoerd in laboratoriumomstandigheden of in natuurlijke wateren met DGT-systemen met verschillende geometrische configuraties (d.w.z. het verhogen van de dikte van de gel of het werken met verschillende harslagen) om toegang te krijgen tot aanvullende informatie over het systeem. Eenvoudige analytische uitdrukkingen met betrekking tot de labiliteit van de complexen leiden tot het verkrijgen van intrinsieke parameters over de metaalcomplexen zoals de diffusiecoëfficiënt en de dissociatiereactiesnelheidsconstante. Om het resultaat van de analytische uitdrukkingen te valideren hebben we ook numerieke simulaties uitgevoerd die de diffusiereactievergelijkingen oplossen onder de randvoorwaarden van de DGT-techniek. Hierdoor kunnen we de experimentele accumulatie van metalen onder bepaalde condities van het systeem, voorspellen.