

De Onderzoeksgroep
Algemene Chemie

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

Mats Denayer

ter behaling van de graad van Doctor in de Wetenschappen

Titel van het proefschrift:

Towards a Reliable Computational Protocol to Predict Polymer Solubility through Molecular Dynamics Simulations: Development and Application to Polymer Recycling

Promotoren:

Prof. dr. Frank De Proft (VUB)
Prof. dr. Frederik Tielens (VUB)
Dr. Jelle Vekeman (UGent)

De verdediging heeft plaats op

**Vrijdag 23 februari 2024 om 16u in aula
I.2.02.**

De verdediging kan via een livestream gevolgd
worden: <https://bit.ly/3HVsqNl>

Samenstelling van de jury

Prof. dr. Ulrich Hennecke (VUB, voorzitter)
Prof. dr. Mercedes Alonso (VUB, secretaris)
Prof. dr. Niko Van den Brande (VUB)
Dr. Julia Contreras-Garcia (Sorbonne Université
and CNRS, Frankrijk)
Prof. dr. ir. Dirk De Vos (KULeuven)
Prof. dr. Farnaz Heidar-Zadeh (Queen's University,
Canada)

Curriculum vitae

Na het voltooien van zijn studie Chemie aan de Vrije Universiteit Brussel (VUB) sloot Mats zich in oktober van datzelfde jaar aan bij de ALGC-groep als predoctoraal student. Zijn onderzoek richtte zich op het voorspellen van de oplosbaarheid van polymeren met als doel bij te dragen aan een circulaire economie. Hij is (mede-) auteur van vier wetenschappelijke artikelen, en nog eens vier manuscripten zijn momenteel in voorbereiding. Naast zijn onderzoek was Mats betrokken bij het onderwijzen van zowel Bachelor- als Mastercursussen.

Abstract van het doctoraatsonderzoek

Bewogen door de impact van het polymeer gebruik op het milieu streeft de Europese Unie naar een transitie van de huidige lineaire “gebruik en werp weg” plastic economie naar een circulair model dat de accumulatie van plastic afval beperkt en de uitputting van fossiele brandstoffen terugdringt. Hiertoe dienen recyclingprocessen ontwikkeld te worden waarbij het oorspronkelijk polymeer kan worden teruggewonnen zonder verlies van productkwaliteit (down-cycling) en zijn de oplosmiddelen gebruikt bij dit proces bij voorkeur “groen” en bruikbaar in beperkte hoeveelheden. Een sleutelement in de ontwikkeling van nieuwe recyclingprocessen is de selectie van efficiënte oplosmiddelen die effectief en duurzaam kunnen worden ingezet. Hierbij zijn voorspellende tools onmisbaar om zowel bestaande oplosmiddelen te optimaliseren als om te zoeken naar capabele nieuwe alternatieven. Huidige benaderingen vertrouwen sterk op experimentele input en missen soms nauwkeurigheid en chemisch inzicht. Bovendien kunnen ze geen rekening houden met polymeerkristalliniteit, en kenmerken zoals polymerenzwelling worden niet eenvoudig vastgelegd.

Dit proefschrift stelt een nieuwe computationele methode voor om de oplosbaarheid van polymeren te voorspellen, door klassieke Moleculaire Dynamica (MD) simulaties te combineren met een conformationele en een Niet-Covalente Interactie (NCI) analyse. Deze methode biedt inzicht in het oplossingsproces op moleculair niveau, terwijl gedetailleerde informatie wordt geleverd over de chemische interacties die het oplosbaarheidsgedrag beheersen. Er wordt een bottom-up benadering gehanteerd, waarbij een enkele polymeerketen in oplossing werd gebracht en een NCI gebaseerde index en het “Solvent Accessible Surface Area” (SASA) anderzijds, als fundamentele grootheden werden genomen om de oplosbaarheid uit te drukken. In een volgende stap van deze progressieve benadering werd een amorfe bundel bestaande uit meerdere polymeerketens ondergedompeld in een oplosmiddel en werd de ontbinding van de bundel bestudeerd. Een “dissociation propensity” werd gedefinieerd wat de oplosbaarheid van het polymeer effectief in één getal vastlegt. De ontwikkelde protocollen werden succesvol toegepast op uitdagingen uit het echte leven die door onze experimentele partners werden ondervonden in het kader van polymeer recyclage en groene alternatieven.