

De Onderzoeksgroep
Algemene Chemie

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

Bin Wang

ter behaling van de graad van Doctor in de wetenschappen

Titel van het proefschrift:
**Towards Analytical Conceptual Density Theory:
Fundamentals, Implementation and Applications**

Promotoren:

Prof. dr. Frank De Proft (VUB)

Em. prof. dr. Paul Geerlings (VUB)

Co-promotor:

**Prof. dr. Shubin Liu (University of North
Carolina, USA)**

De verdediging heeft plaats op

Woensdag 10 september 2025 om 17u

Campus Etterbeek VUB, Pleinlaan 2, Elsene
auditorium I.O.01

De verdediging is ook te volgen via een livestream:
contacteer Bin Wang voor meer informatie.

Samenstelling van de jury

Prof. dr. Frederik Tielens (VUB, voorzitter)

Prof. dr. Mercedes Alonso Giner (VUB)

Prof. dr. Dominique Maes (VUB)

Prof. dr. Mark Sioen (VUB)

Dr. Julia Contreras-Garcia (Sorbonne Université &
CNRS, FR)

Prof. dr. Christophe Morell (Université de Lyon, FR)

Prof. dr. Andrew M. Wibowo-Teale (University of
Nottingham, VK)

Curriculum vitae

Bin Wang behaalde zijn vierjarig bachelordiploma aan de Hunan Universiteit in 2021. Daarna startte hij zijn doctoraatsonderzoek bij de onderzoeksgroep Algemene Chemie (ALGC) aan de VUB, gefinancierd door de Chinese Scholarship Council (CSC).

Tijdens zijn doctoraatsopleiding publiceerde hij zes peer-reviewed artikels als eerste auteur en gaf hij één mondelinge presentatie en vijf posterpresentaties op conferenties. Naast andere onderwijsactiviteiten begeleidde hij ook één bachelorproef en één masterproef.

Abstract van het doctoraatsonderzoek

Conceptuele dichtheidsfunctionaaltheorie (CDFT), afgeleid van de dichtheidsfunctionaaltheorie (DFT), biedt een robuust kader voor het begrijpen van chemische reactiviteit, waarbij chemische concepten worden gekoppeld aan fundamentele fysica. Door de invoering van zogenaamde responsfuncties definieert CDFT op rigoureuze wijze verschillende bekende, maar voorheen vaag gedefinieerde concepten, zoals de elektronisch chemische potentiaal (elektronegativiteit), hardheid, zachtheid en andere.

Dit doctoraatsonderzoek richt zich op de analytische ontwikkeling van CDFT, waarbij een duidelijke en gedetailleerde afleiding en implementatie van elk van deze responsfuncties tot en met de tweede orde wordt gegeven. Numerieke verschillen tussen vaak gebruikte benaderingen van deze responsfuncties (zoals het gebruik van grens moleculaire orbitalen of de eindig verschil benadering) en de analytische benaderingen verkregen via het "Coupled-Perturbed" Kohn-Sham schema werden zorgvuldig onderzocht. Naast het verbeteren van de voorspelling van chemische selectiviteit met traditionele CDFT en het mogelijk maken van nieuwe analyses, zoals bijvoorbeeld het ontleden van reactiviteit in populatie normale modes, voorheen niet mogelijk, opent de analytische evaluatie ook de deur voor het onderzoeken van fundamentele tekortkomingen van DFT, zoals de delocalisatiefout in moderne dichtheidsfunctionaalbenaderingen. Vervolgens werd een uitbreiding op bindingsniveau via de nieuw geïntroduceerde conceptuele dichtheidsmatrixfunctionaaltheorie (CDMFT) uitgewerkt. CDMFT biedt hierbij een nieuw perspectief voor het onderzoeken van bindingsreactiviteit, met inbegrip van de beschrijving van polariseerbaarheid van chemische bindingen. Een belangrijke toepassing van CDMFT-responsfuncties is de simulatie van primaire bindingsbreking van belang in elektronenimpact-massaspectrometrie.

Bovendien wordt een methode voorgesteld om automatisch responsfuncties van willekeurige orde te evalueren zonder expliciet de "Coupled-Perturbed Self Consistent Field" vergelijkingen op te lossen. Tot slot wordt, door een combinatie van CDFT en concepten uit de informatie-theoretische benadering binnen DFT, een nieuwe methode voorgesteld om de reactiviteit langs een elementaire reactiestap op te splitsen. Dit laat toe om het volledige reactiepad op te delen in segmenten die worden gecontroleerd door fysisch betekenisvolle concepten zoals elektrofiliciteit/nucleofiliciteit en sterische effecten.