

De Onderzoeksgroep
Algemene Chemie

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

Charlotte Titeca

ter behaling van de graad van Doctor in de wetenschappen

Gezamenlijk doctoraat met KU Leuven

Titel van het proefschrift:
**Computational and Conceptual Density Functional Theory
for Electronic Resonances**

Promotoren:

Prof. dr. Thomas-C. Jagau (KU Leuven)

Prof. dr. Frank De Proft (VUB)

De verdediging heeft plaats op

Dinsdag 14 oktober 2025 om 17u

in Justus Lipsiuszaal, Erasmushuis,
Blijde-Inkomststraat 21, 3000 Leuven

Registratie en livestream:

<https://forms.office.com/e/88bpu3QV4L>

Samenstelling van de jury

Prof. dr. Alessandro Ianiro (KU Leuven,
voorzitter)

Prof. dr. Mercedes Alonso Giner (VUB)

Prof. dr. Daniel Escudero (KU Leuven)

Prof. dr. Luc Van Meervelt (KU Leuven)

Prof. dr. Nigel Mason (University of Kent, VK)

Curriculum vitae

Charlotte Titeca behaalde een Master in de Chemie in 2021 aan KU Leuven, waarbij ze reeds aan VUB actief geweest was als stagiaire in de onderzoeksgroep Algemene Chemie. Na haar masterthesis over de solvatatie van anionen, waarvoor ze de Chemici Leuven Prijs mocht ontvangen, startte ze als FWO-onderzoeker met een gezamenlijk doctoraat bij KU Leuven en VUB. Hierin combineerde ze de theoretische beschrijving van ongebonden elektronen met conceptuele dichtheidsfunctionaaltheorie. Charlotte heeft twee publicaties als eerste auteur en een derde als co-auteur. Verder stelde ze haar werk als poster of als presentatie tentoon op acht internationale conferenties en voltooide ze een onderzoeksverblijf in Californië. Ze begeleidde ook werkzittingen voor eerstejaarsstudenten en maakte haar onderzoek door middel van een Eos-blog bij het bredere publiek bekend.

Abstract van het doctoraatsonderzoek

Het onderzoek gepresenteerd in deze thesis heeft als doel een verhoogd inzicht te verkrijgen in moleculaire processen waarin verbindingen met ongebonden elektronen, zogenaamde elektronische resonanties, betrokken zijn. Hiervoor worden kwantumchemische methoden gebruikt, meer specifiek dichtheidsfunctionaaltheorie. Dit is een veelzijdige methode die toestaat om de energie en de eigenschappen te berekenen van een uitgebreide verzameling systemen aan redelijke computationale kost, alsook de bindingspatronen en reactiviteit van moleculen te begrijpen. Bijzondere aandacht wordt besteed aan dissociatieve elektronen-aanhechting, wat plaatsvindt wanneer elektronenaanhechting aan een stabiel molecuul leidt tot vorming van een elektronische resonantie waarvan vervolgens een binding breekt. Dit proces is alomtegenwoordig en doet zich bijvoorbeeld voor in DNA na blootstelling aan straling, en wordt als dusdanig geëxploiteerd voor kankerbehandelingen door middel van radiotherapie.

De aanwezigheid van een ongebonden elektron vereist het gebruik van aangepaste technieken. In het huidige werk worden twee verschillende methoden gebruikt: ladingsstabilisatie en toevoeging van een complexe absorberende potentiaal. In de eerste methode wordt het molecuul artificieel aangepast opdat het ongebonden elektron gebonden wordt en beschreven kan worden met de conventionele kwantumchemische methoden. We presenteren een uitbreiding van de originele ladingsstabilisatiemethode, die toelaat om meer dan enkel de energetische waarden te berekenen, en rapporteren over zijn toepassing om de elektronenlokalisatiefunctie te verkrijgen die weergeeft waar het ongebonden elektron gelokaliseerd is. Dit liet ons toe om een aanpak te ontwikkelen om te voorspellen of dissociatieve elektronenaanhechting zal plaatsvinden en welke binding(en) het meest vatbaar zijn.

Daarna hebben we onze aandacht gericht op moleculen met een kooi-achtige structuur, waarover gespeculeerd wordt dat ze een elektron in de kooi kunnen opnemen. Het gebonden of ongebonden karakter van dit elektron hangt af van de specifieke methode die gebruikt wordt om deze moleculen te beschrijven. We pasten onze uitbreiding van de ladingsstabilisatietechniek toe om te bestuderen of het elektron werkelijk in de kooi gelokaliseerd is, en hoe zijn beschrijving varieert naargelang de gebruikte methode.

In het laatste project werd de complexe absorberende potentiaal beschouwd. Het vervult de rol van een muur die verhindert dat het ongebonden elektron het systeem verlaat. Combinaties van deze aanpak met dichtheidsgebaseerde methoden zijn zeer zeldzaam in de wetenschappelijke literatuur en beschikbare software. We beschrijven onze implementatie van complexe absorberende potentialen voor dichtheidsfunctionaaltheorie en rapporteren over de eerste resultaten die verkregen werden met deze veelbelovende methode.