

De Onderzoeksgroep
Algemene Chemie

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

Jochen Eeckhoudt

ter behaling van de graad van Doctor in de wetenschappen

Titel van het proefschrift:

**Electronic Structure and Reactivity at High Pressure
using Hydrostatic Pressure Models**

Promotoren:

Prof. dr. Frank De Proft (VUB)

Prof. dr. Mercedes Alonso Giner (VUB)

De verdediging heeft plaats op

Donderdag 11 december 2025 om 16u30

Campus Etterbeek VUB, Pleinlaan 2, Elsene
auditorium I.O.03

De verdediging is ook te volgen via een
livestream: [Klik Hier](#)

Samenstelling van de jury

Prof. dr. Ulrich Hennecke (VUB, voorzitter)

Prof. dr. Charlotte Martin (VUB)

Prof. dr. ir. Freija De Vleeschouwer (VUB)

Prof. dr. Wim Vranken (VUB)

Prof. dr. Eduard Matito (DIPC/Ikerbasque Foundation for
Science, ES)

Prof. dr. Tim Neudecker (University of Bremen, DE)

Prof. dr. Martin Rahm (Chalmers University of
Technology, SE)

Curriculum vitae

Jochen behaalde zijn Ba in scheikunde aan de VUB in 2019 en zijn Ma in 2021. Ondersteund door een FWO-beurs startte hij vervolgens een doctoraat waarbij hij onderzoek verrichtte in hogedrukchemie. Tijdens zijn doctoraat publiceerde hij twee publicaties als eerste auteur. Hij nam deel aan acht internationale congressen en presenteerde zijn werk in zowel postersessies als een mondelinge presentatie op het Young Research Symposium van CBOND2024. Naast zijn onderzoek begeleidde Jochen vijf thesissen en gaf hij les in talloze WPOs. Tot slot vertegenwoordigde hij de OAP geleding van zijn faculteit in diverse universitaire commissies.

Abstract van het doctoraatsonderzoek

Hoge druk chemie is een interdisciplinaire subcategorie van chemie en fysica met een lange en rijke geschiedenis die meer dan een eeuw teruggaat. Controle over chemische synthese, supergeleiding, superharde materialen en exotische stoffen zijn slechts enkele van de verwezenlijkingen die het op zijn mouw mag spelden. Het modelleren van chemische reacties en materialen bij de hoge druk die bv. op de bodem van de oceaan of in de kernen van planeten bereikt wordt, heeft hier zeker toe bijgedragen. Recentelijk zijn er modellen ontwikkeld die moleculen kwantum mechanisch kunnen beschrijven onder hoge druk en net deze modellen worden in dit werk gebruikt om verscheidene aspecten van hoge druk chemie te bestuderen. Eerst werden chemische concepten zoals elektronegativiteit en chemische hardheid onderzocht onder druk door de conceptuele dichtheidsfunctionaaltheorie uit te breiden. De bevindingen hierbij konden reeds enkele observaties uit de experimentele hoge druk wereld verklaren. Vervolgens werden enkele modellen om druk te simuleren voor het eerst diepgaand met elkaar vergeleken. De bekomen resultaten benadrukken het belang van een gepaste beschrijving van de overgang tussen de molecule en het omringende medium. In een meer theoretisch deel werd een vergelijking voor en een berekening van de verandering van het dipoolmoment onder druk voorgesteld. Als een stap naar grotere moleculen werd ook het concept van aromaticiteit onderzocht voor benzeen onder druk. Dit leidde tot een aantal aanbevelingen voor het evalueren van aromaticiteit onder druk. Finaal werd ook de ring opening reactie van Dewar benzeen bestudeerd en werd aangetoond dat eigenschappen uit hoge druk experimenten informatie kunnen verschaffen over de onderliggende mechanismen wanneer ze met theoretische waarden vergeleken worden. Als epiloog werden kation- π interacties tussen de zijtakken van aminozuren in proteïnes onderzocht via een gecombineerde statistische en theoretische aanpak. Dit suggereerde dat het voorkomen en belang van deze interacties wel eens overschat zou kunnen zijn.