

De Onderzoeksgroep
ALGC/SUME

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

Lise Vermeersch

ter behaling van de graad van Doctor in de wetenschappen

Titel van het proefschrift:

Breaking Down the Building Blocks: Computational Exploration of Sustainable Covalent Adaptable Networks Based on Diels-Alder Chemistry

Promotor:

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

Co-promotor:

Prof. dr. Niko Van den Brande (VUB)

De verdediging heeft plaats op

29 mei 2026 om 17u

Campus Etterbeek VUB, Pleinlaan 2, Elsene,
gebouw LIC, lokaal LIC LT.

Samenstelling van de jury

Prof. dr. Frank De Proft (VUB, Chair)

Prof. dr. Mercedes Alonso (VUB)

Prof. dr. Cathy Macharis (VUB)

Prof. dr. ir. Guy Van Assche (VUB)

Prof. dr. Thijs Stuyver (PSL University in France)

Prof. dr. Jelle Vekeman (University of Antwerp)

Curriculum vitae

Lise Vermeersch behaalde in 2018 een bachelordiploma als ingenieur architect en voltooide vervolgens zowel een bachelor- als een masteropleiding als scheikundig ingenieur aan de Vrije Universiteit Brussel. Sinds 2021 volgt ze een doctoraat in kwantum- en computationele chemie, waarbij haar onderzoek zich richt op de computationele modellering van duurzame zelfherstellende materialen met behulp van benaderingen die variëren van dichtheidsfunctionaaltheorie tot moleculaire dynamicsimulaties. Haar doctoraatsonderzoek wordt ondersteund door een FWO-beurs en werd aangevuld met een internationaal onderzoeksverblijf aan de Pennsylvania State University, naast bijdragen aan interdisciplinair duurzaamheidsonderzoek en academische begeleiding.

Abstract van het doctoraatsonderzoek

Veel moderne kunststoffen zijn sterk en licht, maar moeilijk te herstellen of te recyclen. Een veelbelovende oplossing is het gebruik van chemische reacties die bindingen gecontroleerd kunnen vormen en verbreken. De Diels-Alder-reactie maakt zo materialen mogelijk die zichzelf kunnen herstellen, hervormd kunnen worden of recycleerbaar zijn. Dit proefschrift onderzoekt hoe deze reacties beter begrepen en geoptimaliseerd kunnen worden om duurzamere materialen te ontwerpen. Met behulp van computerberekeningen werd een brede reeks Diels-Alder-reacties bestudeerd om trends in reactiesnelheid en stabiliteit te identificeren. De resultaten werden samengebracht in een database, waarna machine learning werd geëvalueerd als een snelle methode om veelbelovende reacties te voorspellen zonder telkens uitgebreide berekeningen uit te voeren. Daarnaast wordt onderzocht hoe Diels-Alder-reacties kunnen worden versneld met katalysatoren. Hierbij ligt de focus op zwakke, reversibele interacties die de reactie versnellen zonder het zelfherstellende en recycleerbare karakter van het materiaal te verstoren. Omdat grote moleculen flexibel zijn en in verschillende vormen kunnen voorkomen, introduceert dit proefschrift BoltCAR, een computationeel hulpmiddel dat rekening houdt met alle relevante moleculaire conformaties en hun bijdrage aan het globale reactiegedrag. Deze moleculaire inzichten worden vervolgens gekoppeld aan grootschaligere simulaties van polymeervorming en -gedrag, en gevalideerd aan de hand van laboratoriumexperimenten. Tot slot wordt een praktisch kader voorgesteld om te beoordelen of nieuwe materiaalconcepten niet alleen wetenschappelijk sterk zijn, maar ook ecologisch en sociaal verantwoord, vóór verdere ontwikkeling.