

Juryrapport

Koninklijke Van Wijhe Verf Afstudeerprijs voor Chemie en Procestechologie 2021

M.P.M. (Max) Schelling MSc, TU Eindhoven

The effect of depletion interactions on the phase behavior of colloidal dispersions.

Theoretical and experimental investigations.

Max Schelling is een briljant student. Op de cijferlijst voor zijn Master's diploma prijken, naast een acht en een 8.5, zes negens en maar liefst vijf tienen. Met deze uitzonderlijke score steekt hij uit boven bijna alle genomineerden. Zijn afstudeerwerk 'The Effect of Depletion Interactions on the Phase Behavior of Colloidal Dispersions' werd gewaardeerd met het cijfer 9. De jury constateert na bestudering van dat werk dat het die waardering meer dan verdient.

Max Schellings afstudeerwerk gaat over colloïdale systemen, in het bijzonder dispersies van submicron deeltjes in water. Een eigenschap van zulke systemen is dat binaire mengsels van deeltjes met ongelijke afmetingen de neiging hebben zich te scheiden in twee fasen, één met vooral de kleine en één met vooral de grote deeltjes. De oorzaak van dat verschijnsel is dat – aangezien twee deeltjes elkaar niet kunnen doordringen – er om elk deeltje een zone is waarin het middelpunt van een ander deeltje niet kan binnentreden. Dit wordt de 'depletiezone' genoemd. Het gezamenlijk volume van alle depletiezones – het 'uitgesloten volume' – vermindert het volume waarin deeltjes zich vrij kunnen bewegen en daarmee de entropie van het mengsel. Wanneer een binair mengsel ontmengt neemt het uitgesloten volume af en de entropie derhalve toe; dit wordt 'depletion interaction' genoemd en is de zuiver geometrische oorzaak van de ontmenging.

Max treedt met zijn scriptie in de voetsporen van kolloïdchemici als Lekkerkerker die in de jaren negentig een eerste 'free volume theory' (FVT) formuleerde waarmee fase-diagrammen, als functie van overall concentratie, samenstelling en grootteverhouding van de deeltjes kunnen worden berekend. De theorie maakt echter benaderingen, en de resultaten ervan komen daardoor vaak niet goed overeen met data verkregen uit computersimulaties en experimenten. Ook Max' examinerator Prof. Tuinier had zich erover gebogen, maar vooralsnog geen kans gezien het probleem te kraken.

Max ontwikkelt in zijn scriptie een nieuwe versie van de theorie waarbij de benaderingen worden omzeild. De resultaten komen nu veel beter overeen met die uit computersimulaties. Bovendien zag hij kans de theorie uit te breiden voor mengsels van bolletjes en staafjes, en ook die resultaten sporen goed met experimenten. Het werk werd gepubliceerd in twee artikelen in *Journal of Chemical Physics*. De jury constateert dat Max hiermee een prestatie heeft geleverd die ver uitgaat boven hetgeen van een student verwacht mag worden. Het is een *eigen* bijdrage aan een lastig stuk statistische fysica waarvoor een hoog abstractieniveau en aanzienlijke wiskundige vaardigheden vereist zijn, en de jury vindt dat Max hiermee blijkt geeft van bijzondere intellectuele kwaliteiten.

De jury is daarom unaniem van oordeel dat Max Schelling de terechte winnaar is van de Koninklijke Van Wijhe Afstudeerprijs voor Chemie en Procestechologie 2021.

Prof. dr. F.M. (Matthias) Bickelhaupt FRSC, hoogleraar theoretische organische chemie en biokatalyse Vrije Universiteit Amsterdam, bijzonder hoogleraar theoretische organische chemie Radboud Universiteit Nijmegen

Prof. dr. M.A. (Martien) Cohen Stuart, hoogleraar fysische chemie en kolloïdkunde Wageningen Universiteit

Prof. dr. ir. J.C.M. (Jan) van Hest, hoogleraar bio-organische chemie Technische Universiteit Eindhoven, wetenschappelijk directeur Institute for Complex Molecular Systems (ICMS)

De jury vergaderde op 18 oktober 2021 onder leiding van KHMW-directeur Dr. ir. P.M.M. (Peter) Blauwhoff. Tevens waren ter vergadering aanwezig Prof. dr. A.P. (Ad) IJzerman, secretaris natuurwetenschappen KHMW en Drs. S. (Saskia) van Manen, secretaris KHMW (verslag).