

Toespraak – Van Speybroeck 8 oktober 2024

Sire,

Het is een buitengewone eer om vandaag de Francqui prijs te mogen ontvangen uit handen van Uwe Majesteit. Hiermee toont u dat u wetenschappelijk onderzoek hoog in het vaandel draagt en dat u de boodschap wenst uit te dragen dat wetenschap en onderwijs de basisfondamenten vormen van een sterke kennismaatschappij.

Sire, Excellencies, Excellences, zeer geachte Dames en Heren, Mes Dames, Messieurs,

Les fondateurs de la Fondation Francqui étaient pleinement conscients, en tant que visionnaires, de l'importance de la recherche scientifique et de l'enseignement pour le développement d'une Belgique tournée vers l'avenir. La Fondation Francqui joue toujours un rôle primordial pour encourager la recherche scientifique de haut niveau, l'internationalisation et la collaboration.

Ik ben bijzonder erkentelijk dat de jury mijn dossier en mijn onderzoeksdomein van de moleculaire modellering heeft geselecteerd voor deze prestigieuze onderscheiding. Ik wil de Francquistichting, haar Raad van Bestuur en alle leden van de jury hiervoor ten zeerste danken. Ik ben ook erkentelijk ten aanzien van mijn twee promotoren Prof. Johan Martens en Prof. Bert Weckhuysen. Dat ik ooit voor u allen in dit Paleis der Academiën zou staan, had ik nooit verwacht en was al zeker niet bij mij opgekomen toen ik als twintigjarige startte als eerste onderzoeker aan de UGent in het nieuwe onderzoeksgebied van de Moleculaire Modellering.

Het verheugt me dat de jury het onderzoeksgebied van de moleculaire modellering als belangrijke schakel voor de ontwikkeling van toekomstige technologieën voor een duurzame industrie volop heeft erkend. De toekenning van deze prijs is een aanmoediging om sterker dan ooit top wetenschappelijk onderzoek te bedrijven, jonge onderzoekers te inspireren en bij te dragen aan het oplossen van belangrijke maatschappelijke vraagstukken.

1. Over Discipline-overschrijdende samenwerking

Het onderzoeksgebied van de moleculaire modellering en de toepassing ervan op belangrijke katalytische processen is gesitueerd op het grensvlak van de natuurkunde, chemie, materiaalkunde en ingenieurswetenschappen. Samenwerking over disciplines heen heeft me altijd bijzonder geboeid. Samen kijken naar een probleem vanuit verschillende invalshoeken, op zoek gaan naar het onbekende en geïnspireerd worden door onderzoekers uit andere vakgebieden, vind ik bijzonder intrigerend. Een dergelijke discipline overschrijdende blik is cruciaal om grote maatschappelijke vraagstukken op te lossen.

2. Over Moleculaire Modellering en de toepassing op industriële systemen

J'ai commencé mes recherches dans le domaine de la modélisation moléculaire à la fin des années 90 à l'Université de Gand. En 1998, le prix Nobel de chimie a été décerné à Walter Kohn et John Pople pour le développement de la théorie de la fonctionnelle de la densité et des méthodes computationnelles en chimie quantique. Grâce au développement de moyens de calculs de plus en plus puissants, cela a inauguré une nouvelle ère à partir de laquelle des molécules et des matériaux réalistes pouvaient être modélisés et visualisés avec une grande précision.

Dans d'autres universités, des groupes de chimie quantique importants étaient déjà actifs, mais à l'Université de Gand, le domaine de la modélisation moléculaire était encore inexploré. Lorsque j'ai découvert la théorie abstraite de la mécanique quantique pendant mes études

d'Ingénieur Civil en physique, j'étais profondément intriguée. Peu de temps après, j'ai suivi le cours "Théorie quantique de la liaison chimique" et j'ai compris comment cette théorie abstraite était nécessaire pour décrire le comportement des molécules. Ce lien entre le fondamental et l'appliqué constitue le fil conducteur de toute ma carrière scientifique.

De wereld van de moleculen speelt zich af op de nanoschaal, wat vele malen kleiner is dan wat we met het blote oog kunnen zien. Op dergelijke kleine schaal ageren andere wetten en fenomenen dan wat we dagelijks waarnemen. Deeltjes gedragen zich probabilistisch, hebben geen wel gedefinieerde plaats en snelheid. In het begin van de jaren 1900, vonden grote discussies plaats tussen iconische fysici, nota bene hier in Brussel tijdens de Solvay conferenties. De iconische foto's van de beroemde Solvay conferentie in 1927 en de eerste chemie Solvay conferentie van 1922 hangen in mijn bureau. Ze blijven mij en mijn studenten inspireren. Het laat ons dromen over de immense mogelijkheden van wetenschap en toont dat ontdekkingen in fundamenteel onderzoek zelfs jaren later een grote impact kunnen hebben op ons dagelijks leven.

Na mijn afstuderen als Burgerlijk Natuurkundig Ingenieur besloot ik een onderzoeksstage te verrichten bij DSM Research. Ik kwam er in contact met Dr. Rob Meier en Dr. Franco Buda die voor het eerst een katalytische reactie hadden gesimuleerd met kwantummechanisch gebaseerde moleculaire dynamica technieken. Dit liet een enorme indruk op me na. Kort nadien startte ik mijn doctoraatsonderzoek aan de UGent aan het Instituut voor Nucleaire Wetenschappen onder het promoterschap van Prof. Michel Waroquier. Ik zocht actief samenwerkingen met experimenteel georiënteerde chemische groepen en probeerde hun wetenschappelijke vragen te begrijpen. Dit inspireerde me om nieuwe methoden te ontwikkelen voor het modelleren van realistische moleculaire systemen met praktische toepassingen. Het was uitdagend om me met mijn natuurkundige achtergrond te verdiepen in de taal van de chemici. Juist die brug naar het onbekende fascineerde me enorm.

Mijn initieel onderzoekswerk situeerde zich binnen de polymeerchemie en klassieke petrochemische processen. Tijdens mijn postdoc periode, kreeg ik interesse in nanoporeuze materialen en heterogene katalyse. Samen met zeer getalenteerde onderzoekers en experimentele labo's wereldwijd, verdiepten we ons in de chemie die aan de grondslag ligt van de conversie van methanol naar olefinen. Dit proces boeide mij als alternatief om chemische bouwstenen te produceren startende van nieuwe voedingsstromen zoals biomassa of afval in plaats van fossiele grondstoffen. Mijn vele interacties met experimentele partners, leerden me al snel dat de modellering van realistische katalytische processen zeer complex is. Het streven om dergelijke complexe processen zo accuraat mogelijk te modelleren heeft me blijvend aangezet om de grenzen van simulatietechnieken te verleggen.

3. Over het Belang van mijn onderzoek voor een duurzame maatschappij

Aujourd'hui, mon groupe travaille dans des domaines importants pour la transition vers une société durable. La production des certains composés chimiques repose encore largement sur des matières premières fossiles. Pour réaliser la transition vers une économie neutre en carbone, nous devons passer à des processus radicalement différents qui partent d'autres sources de carbone. Par exemple, le CO₂ que nous capturons peut être reconverti en produits chimiques utiles, ou le plastique et la biomasse peuvent être utilisés de manière circulaire. Pour rendre cela possible, nous avons besoin de catalyseurs performants capables de traiter les nouvelles matières premières et de fonctionner dans des conditions différentes de celles des processus pétrochimiques classiques. La conception moléculaire joue un rôle crucial à cet égard. Non

seulement dans le domaine de la catalyse, mais aussi pour la conception de matériaux pour le stockage de l'hydrogène ou pour détecter les substances nocives dans l'air, une conception minutieuse à l'échelle nanométrique est nécessaire. Au lieu de deviner à quoi devrait ressembler un catalyseur idéal, nous voulons le prédire.

Eenvoudig is dit zeker niet. De functie van een industriële katalysator is uitermate complex en wordt sterk beïnvloed door de omstandigheden waarin het materiaal het werk doet. Verder is geen enkel materiaal perfect en kleine of grote imperfecties beïnvloeden hun gedrag zelfs soms in de positieve zin. Vergelijk het met ons mensen: wij presteren ook anders onder verschillende omstandigheden en niemand van ons is perfect.

Modellering van dergelijke realistische materialen is bijzonder ambitieus. Om de connectie te kunnen maken met het experiment, zouden we al gauw meer dan een miljoen aantal atomen kwantummechanisch moeten kunnen volgen in de tijd. Zelfs met de nieuwste zeer performante exascale computers, kunnen we slechts een 1000- tal atomen kwantummechanisch doorrekenen. Een fundamenteel nieuwe stap is nodig om een paradigmashift te initiëren.

Dit brengt mij bij onze meest recente onderzoeksactiviteiten waarbij we de brug slaan naar artificiële intelligentie en Machine Learning technieken. We hebben de ambitie om systemen met miljoenen atomen te simuleren met machinaal geleerde modellen die getraind worden op kleinere kwantummechanisch gesimuleerde systemen. Zodoende willen we een realistisch katalytisch experiment nabootsen. Ik wil graag op de computer zien hoe een voedingsstroom zoals CO₂, biomassa of methanol wordt omgezet en hoe de katalysator evolueert in de tijd. Ik ben ervan overtuigd dat een nieuwe paradigmashift mogelijk is door het vakgebied van de moleculaire modellering te verruimen naar de artificiële intelligentie mits deze met de nodige theoretische bagage, fysische en chemische kennis van het systeem wordt toegepast.

4. Vooruit en achteruit kijken – Een aantal Reflecties

De Francquiprijs heeft me doen nadenken over het verleden en de toekomst.

Een dergelijke erkenning bekomt men niet alleen. Ik besef dat ik zeer geprivilegieerd ben omdat ik volop kansen heb gekregen en steun heb ontvangen.

Vooreerst zijn er mijn ouders, die mij en mijn zussen een waardenpatroon hebben meegegeven van integriteit, eerlijkheid en werkethiek en ons altijd hebben aangemoedigd om het beste van ons zelf te geven in alles wat we ondernamen. Het behalen van een universitair diploma beschouwden ze als het hoogste goed. Mijn mama is er spijtig genoeg vandaag niet meer bij, maar haar ongelooflijk doorzettingsvermogen, gedrevenheid en kracht is een blijvende inspiratiebron.

Ik mag mij gelukkig prijzen om opgegroeid te zijn in het Belgisch onderwijs- en onderzoekslandschap waarbij kansen worden gecreëerd voor eenieder.

Onderzoek te mogen doen aan een academische instelling – in mijn geval de UGent - is een bijzonder voorrecht, men krijgt de vrijheid om zichzelf te ontplooien. Kansen krijgen om dingen te ontdekken met vallen en opstaan en daaruit leren, is het mooiste wat we kunnen meegeven aan jonge mensen. Hierdoor vormen we kritische denkers die zelf impact zullen hebben in de maatschappij van morgen.

Ook ik heb dergelijke kansen gekregen. Ik wil in het bijzonder Prof. Michel Waroquier danken, met wie ik samen het Centrum voor Moleculaire Modellering heb opgericht. Hij heeft me begeleid

tijdens mijn doctoraat en postdoc periode en de volledige vrijheid gegeven om mijn onderzoek uit te bouwen en samenwerkingen aan te gaan met collega's van andere labo's. Samen moesten we op zoek gaan naar de fondsen om een nieuwe onderzoekslijn uit te bouwen aan de UGent. Evident was dit zeker niet, maar het enthousiasme van jonge onderzoekers om mee te schrijven aan dit verhaal en het geloof dat we iets uniek aan het uitbouwen waren heeft ons voortgestuwd.

Today the Center for Molecular Modeling has grown towards an multidisciplinary research center with about 40 researchers. Our slogan is "Stronger through collaboration". Collaboration across boundaries of faculties, departments, disciplines and with colleagues worldwide is our compass to achieve scientific excellence. We strongly believe in the power of each individual with their unique talents. I had the privilege of working with incredibly talented people.

Ik ben bijzonder erkentelijk ten aanzien van de instellingen die mijn onderzoek hebben gesteund.

De onderzoeksraad van de UGent met de financiering van het bijzonder onderzoeksfonds, heeft een belangrijke rol gespeeld in mijn carrière. Zoals vele jonge vorsers werd ik in mijn postdocperiode geconfronteerd met de onzekerheid om een vaste positie te verwerven in het academisch korps. Dankzij de onderzoeksraad, kon ik los van een specifieke vacature met vastgelegd vakgebied solliciteren voor een onderzoeksprofessoraat, waarbij je enkel werd beoordeeld op je wetenschappelijke merites en excellentie.

Het Fonds voor Wetenschappelijk Onderzoek draag ik een bijzonder warm hart toe. Voor academici die fundamenteel onderzoek doen, is het één van de van de belangrijkste instellingen op Vlaams niveau om top wetenschappelijk onderzoek mogelijk te maken. Ik heb destijds een postdoctoraal mandaat van het FWO bekomen wat me vleugels heeft gegeven om me verder te ontwikkelen.

Ik ben dan ook een grote pleitbezorger van een sterk FWO en ik wil alle beleidsmakers oproepen om blijvend te investeren in ongebonden fundamenteel onderzoek met voldoende middelen om een vruchtbare voedingsbodem te creëren voor innovatie en creativiteit op langere termijn.

I am deeply grateful to the European Research Council (ERC) that supports researchers across Europe to pursue investigator-driven frontier research. Selection is based on scientific excellence to pursue cutting-edge, exploratory research that pushes the boundaries of current knowledge. Securing an ERC grant is highly challenging but has enabled me to pursue groundbreaking research.

5. Een aantal persoonlijke reflecties

Onderzoek doen op het hoogste niveau is dikwijls bergop fietsen, je moet leren omgaan met tegenslagen, zoals projecten die je niet binnenhaalt, of artikels die je moeilijk gepubliceerd krijgt. Ik wil vandaag ook expliciet die boodschap uitspreken, zeker ten aanzien van de jonge onderzoekers die aan het begin van hun loopbaan staan. Iedereen, zelfs de meest succesvolle onderzoekers, worden geconfronteerd met tegenslagen en falen. De wetenschap dat collega toponderzoekers soortgelijke ervaringen hadden, gaf mij de kracht en moed om nooit op te geven.

Tot slot nog dit. Mijn onderzoek was en blijft mijn hobby: aan een artikel schrijven, blijft ontspanning voor mij. Dit vergt wel een omgeving die dit begrijpt, je aanmoedigt en stimuleert. Mijn echtgenoot Piet heeft me steeds gestimuleerd, ratio gebracht. Kinderen zetten alles in perspectief, laten je de juiste dimensies van het leven zien. De combinatie van werk en gezin is

zeker niet altijd evident, maar het is belangrijk mee te geven aan jonge collega onderzoekers dat het mogelijk is.

De Francqui-prijs zie ik als een enorme stimulans om ook in de komende jaren met mijn medewerkers onderzoek te doen op wereldniveau. Ik hoop blijvend jonge mensen te kunnen passioneren en inspireren, omdat ik erg geloof dat zij de toekomst vormen. Aan hen wil ik volgende boodschap geven : laat u niet teveel leiden door de waan van de dag of lange termijn carrièreplanningen. Laat u niet afschrikken, ga voor uw passies en geloof dat er zeer veel mogelijk is.

Ik dank u allen voor uw welgemeende aandacht en aanwezigheid.

Je vous remercie de tout cœur.