



Dr Hubert Jóźwiak

Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

Rozmowa z autorem pracy:

„Collisions of simple molecules and atoms in fundamental studies”

Pana praca dotyczy bardzo specjalistycznego tematu. Czy mógłby Pan w krótkich słowach wyjaśnić, na czym polegają Pana badania?

Moja praca dotyczy zderzeń między prostymi cząsteczkami i atomami – zjawisk, które zachodzą wokół nas nieustannie, choć rzadko kiedy zajmują naszą uwagę. W temperaturze pokojowej cząsteczki azotu i tlenu w powietrzu poruszają się z zawrotną prędkością, zderzając się miliardy razy na sekundę. Na co dzień nie myślimy o tym, ale te procesy mają ogromne znaczenie – np. w atmosferze Ziemi, w kosmosie czy w precyzyjnych eksperymentach laboratoryjnych.

W swojej pracy przyjrzałem się takim zderzeniom na poziomie pojedynczych cząsteczek, wykonując precyzyjne obliczenia wykorzystujące mechanikę kwantową. Zależało mi na dwóch rzeczach: stworzeniu dokładnych danych, które pomogą np. w monitorowaniu gazów cieplarnianych i zanieczyszczeń w atmosferze ziemskiej, oraz zbadaniu kilku bardziej fundamentalnych kwestii w teorii kwantowej: jak interpretować zderzenia nierozróżnialnych cząsteczek w obecności promieniowania, albo jaki wpływ na zderzenia cząsteczek mają słabe oddziaływania między jądrami atomowymi.

W jaki sposób wyniki Pana badań mogą być wykorzystane w astrofizyce?

Na dwa sposoby. Po pierwsze – w przestrzeni międzygwiazdowej, gdzie rodzą się gwiazdy, panują ekstremalne warunki: cząsteczek jest tam bardzo mało, a temperatura i ciśnienie są ekstremalnie niskie. Żeby zrozumieć, co tam się dzieje, trzeba wiedzieć, jak dokładnie zderzają się pojedyncze cząsteczki i jak oddziałują z promieniowaniem. Bez tej wiedzy łatwo źle zinterpretować obserwacje przeprowadzane m.in. przez Teleskop Jamesa Webba.

Po drugie – moje badania pomagają analizować atmosfery planet i egzoplanet. Tam z kolei cząsteczek jest bardzo dużo, i zderzają się nieustannie, co zniekształca sygnał, który obserwujemy. Dzięki dokładnym danym z mojej pracy można lepiej „odszyfrować” te obserwacje: określić skład chemiczny atmosfery, warunki fizyczne, a nawet procesy chemiczne czy, do pewnego stopnia, historię planety.

W jakim stopniu zasoby udostępnione przez Cyfronet wsparły realizację obliczeniowej części Pana rozprawy?

Choć teoria, na której opiera się moja praca, mieści się w równaniu zapisanym w jednej linijce, jego rozwiązanie wymaga potężnych mocy obliczeniowych. W badaniach nad gazami cieplarnianymi, na przykład, chcemy znać koncentrację danych cząsteczek z precyzją lepszą niż jedna tysięczna. To oznacza miliony godzin pracy procesora i zaawansowane programy do rozwiązywania równania Schrödingera, które rozwijamy w naszej grupie badawczej. Dzięki zasobom Cyfronetu mogłem prowadzić takie obliczenia na dużą skalę, badając cząsteczki będące na granicy tego, co uznaje się w takich badaniach za wykonalne. Bez nich musiałbym ograniczyć się do najprostszych układów o znikomych zastosowaniach praktycznych.

Który etap badań okazał się najbardziej wymagający?

Najtrudniejsze technicznie były oczywiście obliczenia rozpraszania kwantowego – to bardzo złożony proces. Ale gdy już przygotuje się program, skrypty i strategię obliczeń, samo ich uruchamianie nie jest już zbyt wymagające.

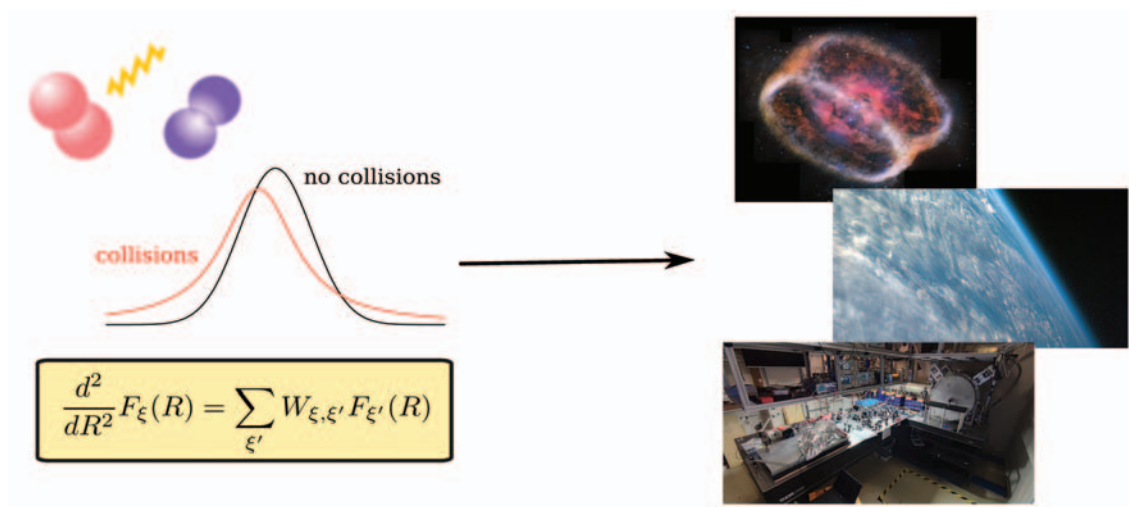
Najwięcej wyzwań (i radości!) dawało jednak samo rozwiązywanie problemów fizycznych. Szukanie najlepszego podejścia, czasem zupełnie nowej drogi – to było najbardziej rozwijające. A trudności traktowałem raczej jak łamigłówki, które po prostu trzeba rozwiązać.

Jakie podejście pomogło Panu przetrwać trudniejsze momenty w pracy badawczej i co poleciłby Pan młodym badaczom, którzy zmagają się z trudnościami na początku swojej drogi?

W pracy badawczej nie da się uniknąć momentów, w których utkniesz – coś nie działa, kod się sypie, teoria daje absurdalne wyniki. To frustrujące. Dlatego kluczem jest współpraca – rozmowy z innymi badaczami, nawet spoza naszej dziedziny, często przynoszą nowe pomysły.

Dobrze też mieć odskocznik – mniejszy projekt, hobby, sport, muzykę. Mózg potrzebuje różnych bodźców, by pracować efektywnie.

Młodym badaczom poleciłbym jedno: zacznijcie jak najwcześniej. Im szybciej zaczniecie się angażować w realną pracę badawczą, tym więcej zyskacie – i wiedzy, i pewności siebie.



Zderzenia cząsteczek wpływają na sposób, w jaki oddziałują one ze światłem. Powodują poszerzenie i przesunięcie linii widmowych (dwie krzywe po lewej stronie grafiki). Poprawne opisanie tych efektów wymaga złożonych obliczeń kwantowych (równanie w lewym dolnym rogu).

Wyniki takich badań są kluczowe m.in. w:

- **interpretacji obserwacji astrofizycznych** (górne prawe zdjęcie: mgławica NGC 1514, teleskop Jamesa Webba, www.webbtelescope.org)
- **badaniach atmosfery Ziemi** (środkowe prawe zdjęcie, NASA EarthKAM, www.images.nasa.gov.pl)
- **precyzyjnej spektroskopii molekularnej**, wykorzystywanej do testowania teorii kwantowej (dolne prawe zdjęcie, laboratorium kriogenicznej spektroskopii molekularnej w KL FAMO w Toruniu).