



Dr Yizhi Xu

Uniwersytet Warszawski

Rozmowa z autorką pracy:

„Computational crystal structure and property prediction of metal-organic frameworks”

Czy może Pani przedstawić czytelnikom swoją drogę do wybranej dziedziny badań?

Zawsze ciekawiły mnie materiały, które tworzą nasz świat i to, jak możemy je modyfikować do istotnych zastosowań. Na mojej ścieżce akademickiej szczególnie pociągała mnie chemia obliczeniowa, ze względu na jej zdolność do niezwykle precyzyjnego i wydajnego modelowania i przewidywania różnych właściwości materiałów. To zainteresowanie doprowadziło mnie do skupienia się na sieciach metaloorganicznych (MOF), które są niezwykle wszechstronnymi materiałami o zmiennych właściwościach. Zafascynował mnie ich wszechstronny potencjał w takich obszarach jak magazynowanie i separacja gazów, czy materiały energetyczne. Są to zastosowania, które mają realny wpływ na czystą energię, zrównoważony rozwój środowiska i bezpieczeństwo. Podstawową motywacją dla moich badań jest zastosowanie wiedzy teoretycznej do poszukiwania praktycznych rozwiązań, które mogą odpowiedzieć na niektóre z najbardziej naglących wyzwań współczesności.

Proszę wyjaśnić, czym są sieci metaloorganiczne i dlaczego przewidywanie ich struktury jest tak trudne?

Sieci metaloorganiczne (MOF) to klasa bardzo uniwersalnych materiałów składających się z jonów lub klastrów jonów metali połączonych organicznymi linkerami cząsteczkowymi w celu utworzenia trójwymiarowych porowatych struktur polimerowych. Istnieje już wiele fascynujących zastosowań MOF-ów w różnych gałęziach przemysłu, które służą społeczeństwu, takich jak transport paliw, absorpcja gazów cieplarnianych, oczyszczanie wody, platformy dostarczania leków, katalizatory, paliwa hipergoliczne i wiele innych.

Mając na uwadze, że każde z różnych zastosowań MOF-ów jest bezpośrednio związane z wybranym węzłem metalicznym i składem linkera, w zasadzie istnieje nieograniczona liczba kombinacji, które można wypróbować w celu uzyskania pożądanых właściwości. Co więcej, w porównaniu z kryształami molekularnymi lub materiałami nieorganicznymi, MOF są polimeryczne, co oznacza, że cała powtarzająca się struktura jest pojedynczą cząsteczką bez żadnych separacji między- lub wewnątrzcząsteczkowych. Takie zjawisko sprawiło, że przewidywanie struktur MOF jest trudniejsze, a także bardziej wymagające obliczeniowo niż wcześniej wspomnianych struktur. Wraz z moimi współpracownikami podjęliśmy się rozwiązania tego wyzwania predykcyjnego, stosując metodę *ab initio* random structure search (AIRSS) wraz z algorytmem Wyckoff Alignment of Molecules (WAM), które wykorzystują symetrię w celu znacznego zwiększenia ogólnej wydajności obliczeniowej, umożliwiając systematyczne uzyskiwanie struktur MOF o pożądanых właściwościach.

Jakie było najciekawsze odkrycie, którego dokonała Pani podczas swoich badań?

Najciekawszym odkryciem było przewidzenie serii wcześniej niezaobserwowanych hipergolicznych MOF-ów, które mogą potencjalnie zastąpić wysoce toksyczne i rakotwórcze paliwa raketowe na bazie hydrazyny. Przełom ten został osiągnięty dzięki naszej metodzie przewidywania struktury krystalicznej *ab initio* (CSP) dla MOF-ów, wspartej walidacjami eksperymentalnymi. Stanowi to znaczący postęp w projektowaniu bezpieczniejszych i bardziej zrównoważonych materiałów napędowych.

W badaniu wykorzystaliśmy CSP do zbadania krajobrazu strukturalnego MOF-ów złożonych z energetycznych ligandów i hipergolicznych linkerów. Poprzez systematyczne modyfikowanie organicznych linkerów, zidentyfikowaliśmy nowe struktury

MOF wykazujące spontaniczny zapłon w kontakcie z utleniaczami – cechą charakterystyczną dla zachowania hipergolicznego. Te modele obliczeniowe zostały następnie potwierdzone poprzez eksperymentalną syntezę i testy, co zademonstrowało skuteczność CSP w kierowaniu procesem odkrywania funkcjonalnych materiałów. Efekty tej pracy wykraczają poza napęd lotniczy wskazując drogę do projektowania zaawansowanych materiałów do różnych zastosowań technologicznych.

W jaki sposób wyniki Pani badań można przełożyć na zastosowania praktyczne?

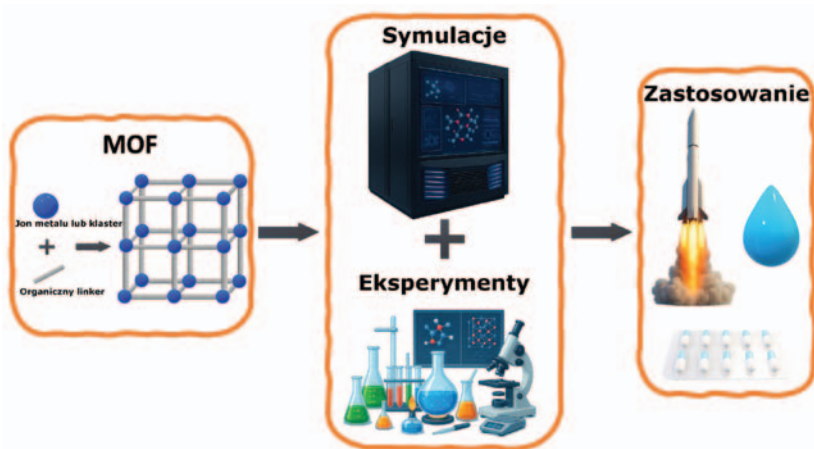
Główną siłą napędową moich badań jest poprawa efektywności projektowania MOF-ów dostosowanych do konkretnych zastosowań. Poprzez opracowanie narzędzi obliczeniowych i modeli predykcyjnych, moja praca ma na celu usprawnienie odkrywania MOF-ów o określonych właściwościach – niezależnie od tego, czy chodzi o magazynowanie gazu, separację, katalizę, materiały energetyczne i wiele innych. Odkrycia te można bezpośrednio przełożyć na praktyczne zastosowania, redukując czas i koszty związane z eksperymentalnymi próbami i błędami. Jak dotąd, taka idea projektowania MOF-ów została już zaprezentowana w jednej z moich ostatnio opublikowanych prac (DOI: 10.1021/jacs.2c12095), w której opisano nowe nietoksyczne materiały napędowe na bazie MOF. Generalnie, moje badania mogą wspierać bardziej ukierunkowaną i wydajną ścieżkę prowadzącą od teorii molekularnej do projektowania funkcjonalnych MOF-ów.

Jaki był wkład infrastruktury superkomputerowej Cyfronetu w Pani badania?

Infrastruktura Cyfronetu, w szczególności superkomputery Prometheus i Ares, odegrała kluczową rolę w moich badaniach nad projektowaniem MOF o pożądanych właściwościach. Wykorzystałam klastry CPU do przeprowadzenia obliczeniowo złożonych symulacji CSP w oparciu o teorię funkcjonału gęstości (DFT), co znacząco przyspieszyło generowanie i selekcję struktur. Dodatkowo, rdzenie GPU superkomputera Ares umożliwiły mi trenowanie modeli uczenia maszynowego, które efektywnie przyspieszały obliczenia CSP, osiągając dokładność porównywalną z DFT przy znacznie niższych kosztach obliczeniowych.

Jakiej rady udzieliłaby Pani osobom dopiero rozważającym karierę naukową?

Moja najważniejsza rada to podążajcie za swoją pasją i pozwólcie, żeby ciekawość wskazywała Wam drogę. Kariera naukowa wykracza poza zapamiętywanie faktów lub rozwiązywanie równań – polega na zadawaniu ważnych pytań i odpowiadaniu na nie. Jeśli istnieje temat, który Was fascynuje lub problem, o którym nie możecie przestać myśleć, jest to wskazówka, że jesteście na właściwej ścieżce. Co ważniejsze, pamiętajcie, że to zupełnie normalne, że na początku nie da się uzyskać wszystkich odpowiedzi, dlatego skupcie się na rozwiązywaniu jednego zagadnienia na raz. Wreszcie, pamiętajcie, że w nauce bardzo ważna jest współpraca, więc nie bójcie się prosić innych o pomoc.



Schematyczny przegląd procesu projektowania sieci metaloorganicznych (MOF-ów) dostosowanych do konkretnych zastosowań: symulacje komputerowe z wykorzystaniem metody przewidywania struktur krystalicznych (CSP), prowadzące do odkrywania obiecujących kandydatów MOF, a następnie walidacja eksperymentalna w celu realizacji zamierzonych zastosowań.