



Fot. Jan Zych, PK

Dr inż. Izabela Kurzydym Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki

Rozmowa z autorką pracy:

„Modelowanie reakcji katalitycznych w procesach deNO_x i deN₂O na drodze Selekttywnej Redukcji Katalitycznej”

Co stało u podstaw decyzji, by pracę doktorską poświęcić procesom związanym z redukcją tlenków azotu?

Temat ekologii w nauce jest aktualnie odmieniany chyba przez wszystkie przypadki. Jako mieszkanka Krakowa, na co dzień doświadczam tego, czym jest zjawisko smogu. Chciałam, aby moja praca doktorska, której poświęcę kilka lat, miała wpływ na poprawienie jakości życia. Możliwość zbadania katalizatorów bardziej efektywnych w procesach redukcji tlenków azotu, a więc związków wchodzących w skład zanieczyszczeń powietrza, wydała mi się niesamowicie interesująca. Opracowywanie mechanizmów, odkrywanie zależności, ale i różnic, dało mi ogrom satysfakcji. Od ponad 30 lat Unia Europejska wprowadza coraz bardziej restrykcyjne dyrektywy dotyczące emisji gazów, aby nasze powietrze było czyste a komfort naszego życia lepszy. Dlatego miałam nadzieję, że zakres moich badań może mieć pozytywny wpływ na opracowanie nowych technologii oczyszczania gazów odlotowych w przemyśle, zwłaszcza azotowym, który jest tak istotny z punktu widzenia produkcji m.in. nawozów sztucznych.

Jak mogłaby Pani krótko przybliżyć czytelnikom katalizatory zeolitowe i ich potencjał wdrożeniowy?

Zeolity to struktury krystaliczne składające się z atomów krzemu, tlenu i glinu, czasami z dodatkiem innych atomów metali, jeśli zeolit pochodzi ze źródeł naturalnych. Ze względu na swoją porowatą strukturę posiadają dużą powierzchnię właściwą, co pozwala w łatwy sposób osadzić wewnątrz porów np. metale przejściowe, które z kolei stanowią aktywne centra katalityczne. Dodatkowo zeolity charakteryzują się termostabilnością oraz brakiem toksyczności, co znacząco ułatwia ich wykorzystanie w procesach przemysłowych, często przebiegających w wysokich temperaturach. Ponadto, w przypadku reakcji, w których reagenty są w stanie ciekłym lub gazowym, łatwość separacji katalizatora zeolitowego od produktu ma istotne znaczenie dla przemysłu.

Jak, w świetle własnej pracy, ale też w szerszym kontekście, ocenia Pani zasadność komputerowego modelowania procesów przemysłowych?

Mogę tutaj przytoczyć pewną anegdotę. W swojej pracy prowadziłam obliczenia dla procesu redukcji tlenku azotu z amoniakiem, mogącej mieć miejsce równocześnie z redukcją tlenku azotu z podtlenkiem azotu. Na jednej z konferencji przedstawiany był badany przeze mnie zeolit klinoptylolit, który został wdrożony do przemysłowej instalacji redukcji tlenków azotu w gazach odpadowych w procesie produkcji kwasu azotowego. Badacze wykazali obniżenie stężenia tlenku azotu oraz podtlenku azotu w gazach odpadowych, jednak nie rozumieli tego drugiego zjawiska. Dzięki moim obliczeniom mogłam przedstawić mechanizm, który wpływa na obniżenie stężenia podtlenku azotu i pomóc im zrozumieć procesy zachodzące na katalizatorze. Pokazuje to, jak istotne jest prowadzenie połączonych badań eksperymentalnych i teoretycznych, które mogą wzajemnie się uzupełniać.

Do czego i w jakim zakresie wykorzystywała Pani zasoby Cyfronetu?

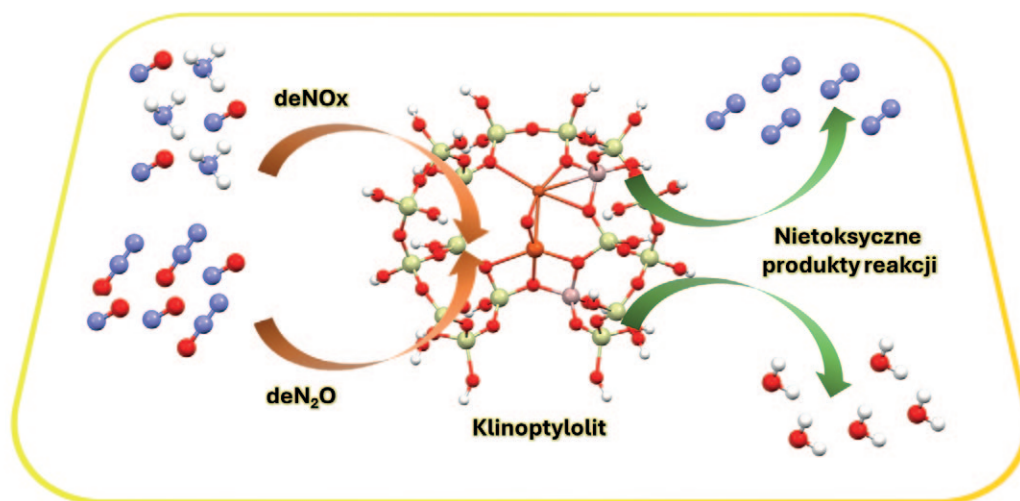
Zasoby superkomputerów Cyfronetu pozwoliły mi na prowadzenie wielu obliczeń jednocześnie. Dzięki dużym mocom obliczeniowym mogłam bez trudu prowadzić obliczenia dla struktur składających się z wielu atomów i otrzymywać wyniki do

analizy w relatywnie krótkim czasie. W swojej pracy doktorskiej zawarłam 72 diagramy opisujące mechanizm deNOx i deN₂O. Wymagało to wykonania tysięcy pojedynczych obliczeń, co było możliwe tylko i wyłącznie dzięki zasobom Cyfronetu. Miałam również okazję przekonać się, jak prężnie rozwija się infrastruktura superkomputerów w Cyfronecie. W tej chwili kontynuuję swoją karierę naukową korzystając z zasobów nowego superkomputera Ares i z niecierpliwością czekam na możliwość przetestowania Heliosa. Wspaniale obserwuje się rozwój infrastruktury, który przekłada się na zwiększenie efektywności pracy naukowców. Jestem bardzo wdzięczna za możliwość korzystania z zasobów Cyfronetu.

Co mogłaby Pani doradzić badaczom na początku drogi naukowej? Przed czym chciałaby Pani ich przestrzec, do czego zachęcić?

Mam czasem wrażenie, że chemia obliczeniowa budzi wśród młodych naukowców pewien lęk. Wydaje się skomplikowana i mało przystępna. Jednak ważne jest, by nie zrażać się do danego tematu. Dzisiaj chemia i cała nauka rozwija się w stronę wykorzystywania metod obliczeniowych czy sztucznej inteligencji, aby można było dogłębnie poznać świat, który nas otacza. Warto więc chociaż w minimalnym stopniu zawrzeć w swoich pracach chemię obliczeniową, jeżeli nie prowadzoną samodzielnie, to dzięki współpracy z innymi naukowcami.

Młodzi badacze powinni też mieć otwarty umysł i słuchać dobrych rad bardziej doświadczonych naukowców. Jednak warto pamiętać o tym, żeby nie bać się mówić o swoich nowatorskich pomysłach. Dobrze jest wytyczyć sobie główną drogę kariery naukowej, ale należy brać pod uwagę, że odchodzi od niej wiele interesujących ścieżek, na które warto wejść chociaż na chwilę, aby wzbogacić naszą wiedzę o świecie, zarówno tym makro, mikro jak i kwantowym.



Schematyczne przedstawienie połączonego procesu deNOx i deN₂O na katalizatorze klinoptylolite