



## Dr Leszek Malec Uniwersytet Jagielloński

**Rozmowa z autorem pracy:**  
**„Experimental and *In Silico* Study of Polar Crystals”**

*Czemu postanowił Pan skupić badania na oddziaływaniach międzycząsteczkowych w kryształach wieloskładnikowych?*

Projektowanie nowych materiałów do zastosowania w różnych gałęziach przemysłu oraz medycyny pochłania ogromne ilości zasobów naturalnych, pieniędzy i czasu. Z tego względu, na znaczeniu zyskują metody oparte na przewidywaniu struktury materiału w skali atomowej. Jedną z najważniejszych gałęzi projektowania struktur kryształów wieloskładnikowych w celu uzyskania materiału o pożądanej własności fizycznej jest inżynieria krystaliczna, wykorzystująca zrozumienie oddziaływań międzycząsteczkowych w kontekście upakowania kryształów. Własności kryształów nie są prostą funkcją właściwości poszczególnych elementów struktury. Zamiast tego zależą one silnie od interakcji między cząsteczkami w strukturze oraz ich względnej orientacji i położenia. Zatem, aby w racjonalny i efektywny sposób tworzyć nowe materiały, musimy poznać sposób ich „działania” w skali atomowej w obecnie znanych materiałach funkcjonalnych. Motywacją moich badań było stworzenie metodologii, opartej o obliczenia kwantowo-chemiczne oraz dyfraktometrię rentgenowską, pozwalającej na skorelowanie dynamiki oddziaływań w kryształach z jego makroskopowymi własnościami. Dodatkowo, każdy z trzech badanych typów układów posiadał cechy, których wytłumaczenie umykało dotychczas wykorzystanym metodom eksperymentalnym, co już samo w sobie było ciekawym wyzwaniem badawczym.

*Jakie dalsze kroki badawcze mogą być podjęte na podstawie otrzymanych przez Pana wyników?*

Zarówno zastosowany schemat badawczy jak i użyte metody i programy mogą zostać zaadaptowane do zbadania wielu własności fizycznych w szerokim spektrum materiałów. Opracowany sposób analizy jest skuteczny w opisie strukturalnych przejść fazowych oraz dynamicznego nieporządku występującego w fazach krystalicznych. Liczę, że zaproponowane przeze mnie podejście, jak również otrzymane wyniki pozwolą lepiej zrozumieć dynamiczne zjawiska strukturalne i związane z nimi efekty makroskopowe, co umożliwi inżynierię nowych materiałów funkcjonalnych. Przykładem mogłyby być materiały ferrokaloryczne, takie jak badany siarczan(VI) amonu, które mogą zostać wykorzystane do stworzenia bardziej efektywnych i przede wszystkim przyjaznych dla środowiska systemów chłodzących. Problem znikania danej fazy krystalicznej jest znany w przemyśle farmaceutycznym, generując ogromne straty w przypadku gdy dana forma polimorficzna zostaje użyta w leku wprowadzonym do produkcji. Uzyskane wyniki, tłumaczące znikanie jednej z odmian polimorficznych kokryształu mocznik-kwas barbiturowy, powinny pozwolić na lepsze zrozumienie tego zjawiska, a także powinny stanowić impuls do dalszych badań nad wpływem porządkowania się cząsteczek w roztworze na efekt krystalizacji.

*W pracy wspomina Pan o wykorzystaniu autorskich skryptów do analizy dynamiki układów wiązań wodorowych. Czy możemy poprosić o krótkie przybliżenie oprogramowania?*

Głównym celem przygotowanego oprogramowania była analiza korelacji czasowych oraz przestrzennych pomiędzy zmianami parametrów geometrycznych indywidualnych cząsteczek w badanych układach. Oprogramowanie pozwala na badanie parametrów każdego jonu, cząsteczki oraz wiązania w klastrze obliczeniowym w sposób indywidualny, umożliwiającą

analizę dynamicznego nieporządku w symulowanych strukturach krystalicznych. Możliwe jest także uśrednienie każdego obliczonego parametru w czasie i przestrzeni (z uwzględnieniem symetrii przestrzennej kryształu) pozwalające na porównanie wyników symulacji z danymi uzyskanymi z użyciem dyfraktometrii rentgenowskiej. W programie, każda cząsteczka/ion jest instancją wybranej klasy, która przechowuje współrzędne kartezjańskie wszystkich atomów. Pozwala to na szybkie obliczenie wybranych długości wiązań, kątów walencyjnych i kątów torsyjnych dla wybranego typu cząsteczki. Dodatkowo, w niektórych przypadkach zaimplementowałem wyznaczanie bardziej złożonych parametrów geometrycznych, m.in. objętości cząsteczki w oparciu o wyznaczenie jej otoczki wypukłej. Cała część obliczeniowa programu została połączona z modulem graficznym w celu zautomatyzowania wizualizacji wyników.

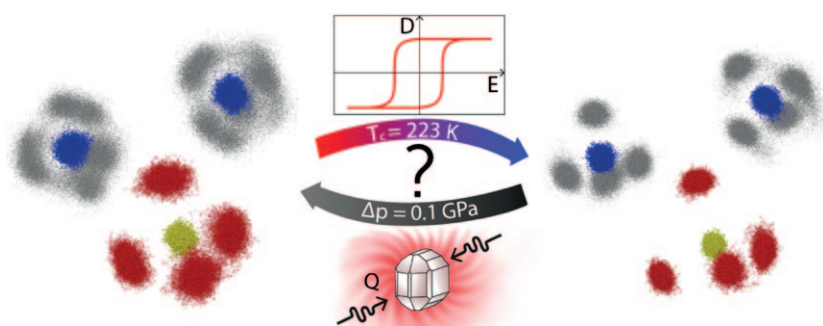
*W jaki sposób wykorzystał Pan zasoby informatyczne udostępniane przez Cyfronet?*

Wykorzystując superkomputery Ares oraz Prometheus, wykonałem ponad 70 symulacji metodą dynamiki molekularnej Born-Oppenheimera dla kilku typów kryształów w programie CP2K. Symulowane z uwzględnieniem okresowych warunków brzegowych klastry zawierały od kilkudziesięciu do kilku tysięcy atomów. Ze względu na wielkość układów i złożoność obliczeń, większość z nich wykorzystywała od 288 do 432 rdzeni. Uzyskane zasoby pozwoliły na analizę wibracyjną każdego układu z wykorzystaniem wygenerowanych widm mocy oraz ich dekompozycji. Otrzymane zasoby dyskowe umożliwiły mi analizę oddziaływań międzycząsteczkowych w badanych kryształach z wykorzystaniem wyżej omówionego, autorskiego oprogramowania. Dodatkowo, dla dwóch badanych układów wykonałem dekompozycję energii oddziaływań dla kilku tysięcy wybranych geometrii z wyznaczonych trajektorii. W tym celu wykorzystałem metodę backfill, wymagającą użycia tysięcy krótkich zadań na klastrze obliczeniowym. Przeprowadzone obliczenia pozwoliły mi wyjaśnić mechanizm przejścia fazowego w ferroelektrycznym siarczanie(VI) amonu, a także opisać zjawisko transferu protonu w trójskładnikowych kryształach zawierających motyw łańcucha polikationowego. Rozwiązałem również zagadkę znikającej formy polimorficznej kokryształu mocznik-kwas barbiturowy, co pozwoliło mi opracować eksperymentalną metodę jej otrzymywania w sposób powtarzalny.

*Jaką poradę mógłby Pan przekazać osobom rozpoczynającym szkołę doktorską?*

Ze względu na swój unikalny charakter praca naukowa daje dużą swobodę w organizowaniu swojego czasu i tego, czym się zajmujemy. Istotne jest, aby w doborze własnej tematyki kierować się przede wszystkim tym, co nas interesuje i tym, co nasze badania

mogą dać innym. Nie należy bać się zmian i przywiązywać się do tego, czym zajmowaliśmy się na wcześniejszych etapach edukacji. Studia doktoranckie dają czas, aby wykształcić swój własny warsztat naukowy, nauczyć się przekazywać swoją wiedzę, a także nawiązać współpracę z innymi naukowcami. Od naszych samodzielnych wyborów zależy, czy nasza praca będzie zarówno satysfakcjonująca jak i wartościowa. Brak radości z tego, co robimy, może łatwo prowadzić do utraty ciekawości, która dla mnie zawsze była główną motywacją do prowadzenia badań. Dlatego od początku doktoratu powinniśmy być świadomi, dlaczego chcemy zajmować się daną tematyką i koncentrować się na tych aspektach badawczych, które pomogą nam się rozwijać.



*Graficzna reprezentacja przejścia fazowego w siarczanie(VI) amonu (przedrukowano z L. M. Malec et al. Acta Materialia, 2021, zgodnie z CC BY 4.0)*