dr inż. Kamil Kurleto

Rozmowa z autorem pracy:
„Teoretyczne badania struktury form tlenkowych molibdenu i wolframu na krzemionce oraz ich aktywności w metatezie olefin".

Gdyby miał Pan wyjaśnić swoje badania osobie niezwiązanej z dziedziną, jak by Pan to zrobił?

Mam takie ulubione porównanie, które pomaga zrozumieć, po co wykonywaliśmy te obliczenia. Każdy, kto zajmuje się eksperymentem w chemii, wie, co wkłada do kolby i wie, czy też raczej jest w stanie przewidzieć, co z niej wyciągnie. Ale tak na dobrą sprawę nie jesteśmy w stanie określić, co tam się dzieje w środku w trakcie reakcji. Za pomocą obliczeń możemy dokładniej prześledzić dany mechanizm reakcji, co umożliwia nam lepsze poznanie danego procesu, a to z kolei ostatecznie może przełożyć się na jego ulepszenie. Warto też zaznaczyć, że wykonywane obliczenia nie są oderwane od rzeczywistych procesów. To wszystko wiąże się ściśle z eksperymentem.

Analizowaną przez Pana metatezą olefin zajmują się nawet duże koncerny chemiczne. Pomimo tego znalazł Pan dziedzinę, w której do tej pory było więcej pytań niż odpowiedzi.

Proces metatezy, jeśli chodzi o generowanie olefin, jest dość dobrze poznany – mam tu na myśli mechanizm karbenowy. Jednak do tej pory nie wyjaśniono, w jaki sposób powstają centra aktywne katalizatorów, które są stosowane w przemyśle. Cały proces dzielimy na 3 etapy: inicjacji, propagacji i terminacji. Wiemy, jak przebiega etap propagacji. Nie do końca wiadomo, według jakiego mechanizmu przebiega etap inicjacji (tj. powstawania centrów aktywnych) oraz etap terminacji (tj. zakończenia reakcji). Dlatego właśnie w swoich badaniach skupiłem się przede wszystkim na tych etapach.

Czy mógłby Pan krótko opowiedzieć o praktycznych zastosowaniach reakcji metatezy?

Reakcja metatezy olefin jest przede wszystkim wykorzystywana w przemysłowym procesie produkcji propylenu. Inne zastosowanie znalazła między innymi w przemyśle oleochemicznym, agrochemicznym, aromatycznym oraz farmakologicznym.

Jakie były największe wyzwania podczas Pana badań?

Myślę, że największym wyzwaniem było stworzenie odpowiedniego modelu katalizatora, który w sposób wystarczający oddawałby rzeczywistość. Jest to o tyle istotne, ponieważ im dokładniejsze uzyskamy wyniki obliczeń, tym łatwiej będzie je porównać z wynikami uzyskanymi na drodze eksperymentu. Innym wyzwaniem było przebadanie dużej liczby, zarówno proponowanych w literaturze, jak i przeze mnie, potencjalnych ścieżek etapu inicjacji metatezy olefin.

W jaki sposób zasoby Cyfronetu pomogły Panu przy tworzeniu nowego, funkcjonalnego modelu?

Cyfronet pomógł mi przede wszystkim poprzez udostępnienie ogromnej mocy obliczeniowej, którą dysponuje w postaci superkomputerów, jak Zeus czy Prometheus. Zaletą chemii obliczeniowej jest to, że posiadając odpowiednie oprogramowanie możemy wykonać obliczenia praktycznie wszędzie. Ale w takiej sytuacji tracimy bardzo dużo cennego czasu. To właśnie dzięki superkomputerom Cyfronetu mogłem w sposób sprawny i szybki wykonywać obliczenia, efektem czego było powstanie mojej pracy doktorskiej.

Jakie widzi Pan następstwa przeprowadzonych badań? Jakie kolejne kroki mogą zostać podjęte?

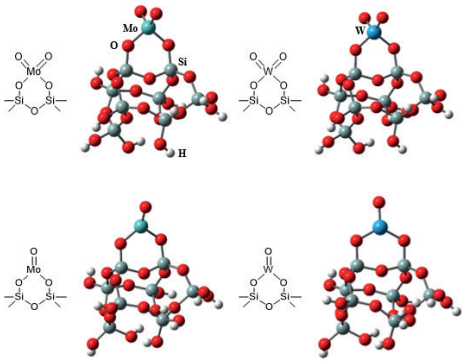
Grant, jaki otrzymaliśmy, dzielił się na dwie części. W pierwszej, nasza część zespołu wykonywała obliczenia teoretyczne, a równolegle do nich, druga część zespołu zajmowała się eksperymentem. Naszym zadaniem było zaproponowanie nowych modeli katalizatorów metatezy olefin, zbadanie mechanizmu tego procesu oraz równocześnie z badaniami eksperymentalnymi prowadzenie obliczeń teoretycznych. Ostatecznie, efektem tej pracy może być opracowanie nowego, wydajniejszego układu katalitycznego dla procesu metatezy olefin. Ze względu na to, że w swojej pracy skupiłem się na badaniu katalizatorów molibdenowych i wolframowych osadzonych na krzemionce, myślę, że naturalną koleją rzeczy będzie wykonanie obliczeń dla tych katalizatorów osadzonych na nośnikach glinokrzemianowym lub tlenku glinu.

Co w pracy naukowej daje Panu największą satysfakcję?

Zawsze dużą radością był dla mnie satysfakcjonujący wynik końcowy wymagającej ścieżki syntetycznej lub obliczeniowej, która sprawiała mi dużo problemów. Również możliwość ciągłego rozwoju oraz różnorodność tematów podejmowanych przeze mnie badań – w pracy dyplomowej zajmowałem się badaniem aktywności antyoksydacyjnej wybranych roślin, w trakcie doktoratu zdobyłem wiedzę i umiejętności z zakresu metatezy olefin i chemii obliczeniowej, a aktualnie pracuję jako specjalista ds. syntezy – jest dla mnie bardzo ważna i czerpię z niej dużo satysfakcji.

Broniąc pracę doktorską zamknął Pan pewien etap. Co mógłby Pan poradzić młodym naukowcom, którzy dopiero ten etap otworzyli?

Osobom, które jeszcze nie zaczęły studiów doktoranckich, radziłbym przede wszystkim mądrze wybrać promotora. Natomiast jeśli miałbym coś poradzić osobom, które są już w trakcie doktoratu – skupić się na doktoracie i go realizować. Jednocześnie, jeżeli pojawiają się możliwości nawiązania obiecującej współpracy, odbycia stażu naukowego lub stażu w przemyśle, to warto z nich skorzystać. I to, co jeszcze chciałbym poradzić, to branie czynnego udziału w konferencjach naukowych. Zawsze daje to okazję do prezentacji wyników swojej pracy, obycia się w środowisku naukowym i podszlifowania języka obcego.



Struktury zaproponowanych w pracy doktorskiej badanych układów katalitycznych procesu metatezy olefin (tlenkowe prekursory Mo(IV), Mo(VI), W(IV) i W(VI), osadzone na powierzchni amorficznej krzemionki)