



Justyna Mech – autorka rozprawy doktorskiej zatytułowanej „Synteza i charakterystyka materiałów hybrydowych w oparciu o nanostrukturalny TiO_2 modyfikowany związkami aromatycznymi”. Wykazuje w niej, że nietypowe połączenia dostępnych materiałów są źródłem nowoczesnych materiałów o pożądanych własnościach.

Kiedy pojawiła się u Pani pasja do nauki?

Od dziecka imponowali mi ludzie posiadający praktyczną wiedzę, potrafiący prosto i ciekawie wytłumaczyć zjawiska, czy też zachowania, jakie obserwujemy na co dzień. Wydaje mi się, że już wtedy postanowiłam osiągnąć jak najwięcej jako naukowiec. Decydująca była jednak rozmowa z moim przyszłym promotorem, tuż po ukończeniu studiów magisterskich. Tematyka mnie zafascynowała, a możliwość rozwinięcia jej w najbardziej interesującym mnie kierunku bardzo mnie pociągała.

Czym ostatecznie zdecydowała się Pani zająć?

Skoncentrowałam się na właściwościach materiałów hybrydowych, powstałych z połączenia diametralnie różniących się między sobą rodzajów materii: organicznej i nieorganicznej. Zastanawiałam się, jak wygląda i czy w ogóle zachodzi między nimi jakiegokolwiek oddziaływanie. Dzięki symulacjom komputerowym mogłam wyjaśnić pewne zjawiska obserwowane makroskopowo, analizując je na poziomie atomowym, np. zjawisko przełączenia fotoprądu. Jedne materiały hybrydowe wykazują taką właściwość, a inne nie. Co więcej, cząsteczki barwników o tej samej stechiometrii, posiadające podobną budowę, wchodzące w skład tych samych materiałów hybrydowych, wykazują odmienny charakter fotoprądowy. Do symulacji geometrii oraz rozmieszczenia ładunku w materiale hybrydowym w stanie podstawowym używałam metody DFT, natomiast do analizowania własności w stanach wzbudzonych posłużyłam się jej odpowiednikiem – TDDFT. Właśnie dzięki analizie stanów wzbudzonych uzyskałam odpowiedź na pytanie, dlaczego jedne cząsteczki organiczne oddziałujące z tą samą matrycą nieorganiczną wykazują przełączenie fotoprądów, a inne nie.

Jakich narzędzi używała Pani w pracy?

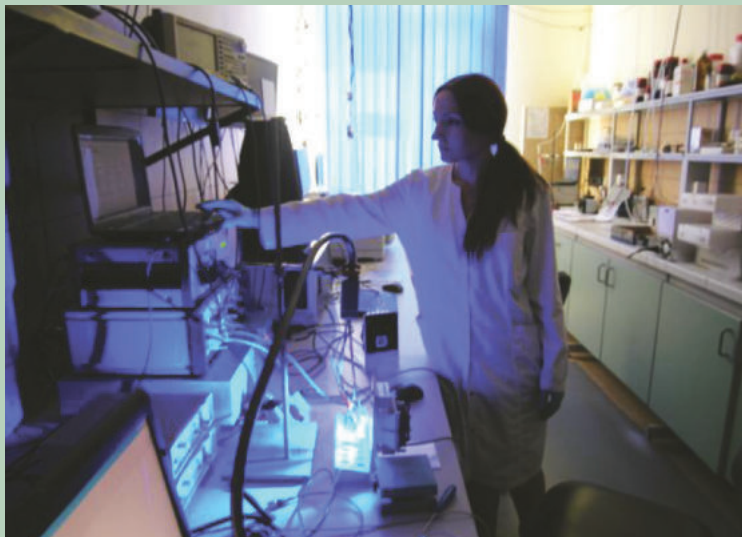
Studia literaturowe trwały przez cały czas. Używałam standardowych metod badawczych, takich jak spektroskopia UV-VIS i w podczerwieni. Do bardziej wyrafinowanych metod, odgrywających kluczową rolę w prowadzonych przeze mnie badaniach, można zaliczyć spektroskopię fotoprądów oraz fotonapięć powierzchniowych. Ich innowacyjność polega na łączeniu dwóch różnych technik: pomiarów elektrycznych/elektrochemicznych i spektroskopii. Do obliczeń własności badanych związków wykorzystywałam pakiet Gaussian, otrzymując bardzo dobrą zgodność wyników symulacji z danymi eksperymentalnymi.

Część obliczeniowa nie mogłaby zostać wykonana bez wsparcia Cyfronetu. Zdecydowałam się korzystać z oferowanych w Centrum możliwości przede wszystkim ze względu na czas, jaki trzeba by było przeznaczyć na przeprowadzenie obliczeń. Pierwsze zadania obliczeniowe zostały zrealizowane przy pomocy komputera *Baribal*, ale później – po odbyciu szkolenia przygotowującego

– postanowiłam korzystać z Zeusa. Zapewne etap obliczeń zakończyłby się szybciej, gdybym zdecydowała się wykorzystać w pełni potencjał superkomputera i uruchamiać zadania równolegle.

Na co wskazują wyniki Pani pracy?

Opisane w rozprawie doktorskiej materiały hybrydowe nie były syntetyzowane pod kątem konkretnego zastosowania. Możliwości wyboru komponentów – zarówno organicznych jak i nieorganicznych – są praktycznie nieograniczone. W swojej pracy wskazuję kryterium wyboru komponentów, tak aby zminimalizować pracę doświadczalną związaną z uzyskaniem materiału o określonych właściwościach. Jest to pierwszy krok do zaprojektowania i syntezy materiałów hybrydowych wykazujących pożądane, unikatowe właściwości. Mimo iż moje badania początkowo nie miały charakteru aplikacyjnego, mój promotor znalazł dla nich zastosowanie. Otóż wykorzysta je przy ochronie zabytków, ponieważ te materiały hybrydowe absorbują promieniowanie powodujące uszkodzenia dzieł sztuki.



W trakcie pracy w laboratorium

Na co, Pani zdaniem, powinni zwracać uwagę młodzi naukowcy?

W pracy naukowej najważniejsze są solidne podstawy wiedzy, ale nie tylko tej „książkowej”. Definicje, prawa i równania, które należy przyswoić, mają zastosowanie w życiu codziennym – we wszystkim, co nas otacza. Dopiero wtedy zauważymy sens i „magię” nauki. Poza tym, dzięki odpowiedniemu przygotowaniu młody badacz może dokonać wstępnej selekcji optymistycznych i mniej obiecujących doniesień ze świata nauki. To z kolei posłuży do wyboru dziedziny, której rozwijanie da mu mnóstwo satysfakcji.

Jakie są Pani plany na najbliższą przyszłość?

Chciałabym dokończyć rozpoczęte badania. Przez najbliższe 3 lata będę zajmować się tematyką materiałów hybrydowych zawierających kompleksy lantanowców. Planuję umieścić kompleksy lantanowców w matrycy dwutlenku tytanu, po czym postaram się zamknąć uzyskany twór w otoczkach z tlenku aluminium lub tlenku tytanu. Umieszczenie kompleksów w sztywnej tlenkowej matrycy zwiększy ich stabilność mechaniczną, natomiast zewnętrzna otoczka będzie je chronić przed wpływem czynników zewnętrznych. Aby usprawnić prowadzone eksperymenty, chciałabym nadal współpracować z Cyfronetem.

Bardzo dziękuję za interesującą rozmowę.