



## dr Mateusz Brela

**Rozmowa z autorem pracy: „Zastosowanie metody ETS-NOCV w oparciu o obliczenia DFT w podejściu statycznym i dynamicznym w modelowaniu struktury elektronowej i reaktywności układów o potencjalnym znaczeniu technologicznym”.**

*Jak wyglądały początki Pańskiego zainteresowania nauką, a w szczególności chemią?*

Fascynacja chemią rozpoczęła się już w gimnazjum. Wynikała w mniejszym stopniu z posiadanej wiedzy i zainteresowania teorią, a w większym stopniu z przeprowadzanych eksperymentów. Pasjonujące było wtedy przeprowadzanie doświadczeń, których efekt widoczny był natychmiastowo. W okresie uczęszczania do liceum nastąpił jednak zwrot moich zainteresowań w kierunku fizyki teoretycznej. Wtedy również powstał dylemat – chemia czy fizyka. Poważnie rozważałem możliwość podjęcia studiów w kierunku fizyki, zostałem nawet przyjęty na obydwa kierunki: chemię i fizykę na UJ. Podjąłem wtedy decyzję: rozpocznę studia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego.

*W recenzjach Pańskiej pracy doktorskiej często pojawiało się sformułowanie mówiące o Pańskiej dojrzałości naukowej. Chodziło nie tylko o znajomość i umiejętność stosowania metod badawczych, ale także o dotychczasowy dorobek naukowy. Proszę opowiedzieć o swoich osiągnięciach.*

Studia oraz sam doktorat to był bardzo intensywny czas. Statystycznie podchodząc to tego czasu, studia doktoranckie to było około sześciu wizyt w Korei Południowej w ramach programu KORANET, osiem międzynarodowych konferencji naukowych, sześć miesięcy spędzonych w Kanadzie na Uniwersytecie Calgary, gdzie miałem zaszczyt pracować w zespole Prof. Toma Zieglera, oraz wiele innych zobowiązań, takich jak np. praca dydaktyczna. Proszę sobie wyobrazić, że bywały momenty, gdzie zdecydowaną większość część roku spędzałem poza Polską. W tym czasie ukazało się 12 publikacji w międzynarodowych czasopismach oraz jedno zgłoszenie patentowe, których jestem współautorem. Jednym z większych osiągnięć jest dla mnie fakt, że jestem autorem korespondencyjnym i byłem odpowiedzialny za kontakt z edytorami oraz recenzentami w procesie wydawniczym trzech publikacji. Było to bardzo duże wyzwanie dla młodego naukowca.

*Mimo tylu możliwości zagranicznej współpracy, swoje obliczenia ulokował Pan jednak w ACK Cyfronet AGH...*

Tak, bardzo sobie chwałę współpracę z Cyfronetem. Poza mocami obliczeniowymi superkomputera Zeus, szczególnie godny pochwały jest pierwiastek ludzki tej infrastruktury. Czas reakcji na zgłaszane problemy jest ekspresowy, zawsze można liczyć na wsparcie i pomoc pracowników Centrum. Miałem okazję dosyć dobrze poznać ten aspekt, ponieważ wykorzystałem tutaj blisko 38 mln godzin obliczeniowych! Na początku swojej drogi naukowej korzystałem jeszcze z zasobów Baribala (poprzednik Zeusa). Centrum jednak stale się rozwija i wkrótce miałem okazję skorzystać

z możliwości superkomputera Zeus, ta zmiana stanowiła krok milowy w mojej dalszej pracy naukowej. Dlatego z radością przywitałem również wiadomość o uruchomieniu i udostępnieniu do obliczeń Prometheusa. Poza mocą obliczeniową, szczególnie użyteczne i pomocne dla mnie były inne narzędzia udostępniane w ramach oferty Cyfronetu. Korzystałem z GridSpace do katalogowania plików, z wydajnych kart graficznych i różnorodnego oprogramowania naukowego.

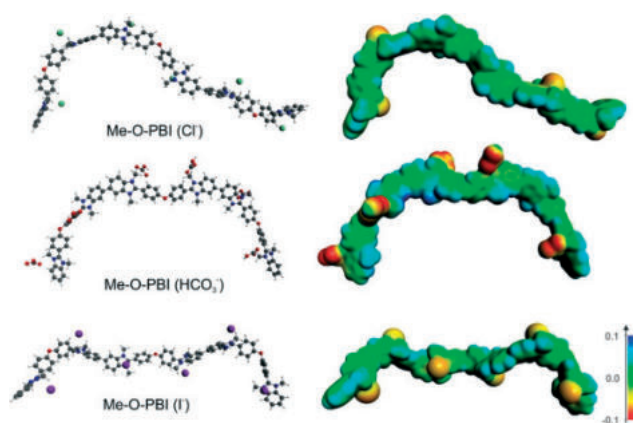
*A propos młodych naukowców, czy ma Pan radę dla młodszych kolegów?*

Bez pasji niemożliwa jest kariera naukowca. Wbrew pozorom, jest to bardzo wymagający sposób na życie, o czym wspominałem wcześniej. Bez pasji trudne jest też pogodzenie się z porażkami – nie każdy eksperyment od razu się uda, nie wszystkie założenia okazują się właściwe. Ponadto realizacja badań często wiąże się z nienormowanym czasem pracy, co może mieć wpływ na życie osobiste. Należy też umieć korzystać z możliwości, jakie dają nam szczególne okoliczności miejsca i czasu – to trochę wiąże się z posiadaniem szczęścia, co też jest bardzo istotną kwestią. Trzeba również mieć umiejętność korzystania z doświadczenia innych, posiadać mentorów i... nie zrażać się.

*Jak teraz wygląda Pańska praca naukowa? Jakie ma Pan cele?*

Obecnie pracuję ze studentami. Jest to kolejny etap rozwoju, ponieważ taka praca stymuluje do ciągłej aktywności naukowej, tyle że z pomocą osób, które zaczynają eksplorować nowe jej obszary. Bardzo wartościowa jest współpraca ze studentami, którzy mają bardzo świeże podejście do nauki i dużo entuzjazmu. Poza wspomnianym rozwojem, obecnie moim celem jest też dążenie do uzyskania samodzielności naukowej, do samodzielnego wytyczania sobie zadań i przestrzeni, w której istnieje pole do stosowania własnych, niestandardowych często podejść.

*Serdecznie dziękuję za rozmowę.*



Porównanie cząsteczkowego potencjału elektrostatycznego (MEP) przedstawione na konturze gęstości elektronowej ( $\Delta\rho = 0,002$ ) dla układu Me-O-PBI oddziałującego z anionami: Cl<sup>-</sup>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> i I<sup>-</sup>.