



dr Klemens Noga

Rozmowa z autorem pracy:

„Badanie oddziaływań elektronowych w związkach molibdenu o mieszanej walencyjności metodami chemii kwantowej”

Jaki aspekt chemii obliczeniowej jest dla Pana najbardziej interesujący?

Najciekawszym dla mnie aspektem chemii obliczeniowej jest to, że przeprowadza się badania na różnych modelach, które stosunkowo łatwo można modyfikować. Dzięki temu możemy analizować wpływ różnych czynników na własności układów chemicznych. Dodatkowo, dzięki coraz to nowocześniejszej technologii obliczeniowej można analizować coraz bardziej złożone modele.

Co zdecydowało o wyborze skorpionianowych kompleksów molibdenu jako przedmiotu badań?

Temat moich badań początkowo powstał z potrzeby chwili. Współpracownicy z Politechniki Krakowskiej pracowali nad zrozumieniem mechanizmów rządzących zachowaniem skorpionianowych kompleksów molibdenu, w szczególności zawierających więcej niż jedno centrum metaliczne. Do tego potrzebna była analiza czynników wpływających na strukturę elektronową, a tę można skutecznie modelować przy użyciu komputerów.

Same skorpioniany, z racji wszechstronności ligandów, które mogą je tworzyć, jak również sposobów, na które poszczególne centra metaliczne mogą być połączone, okazały się być bardzo ciekawym, a zarazem skomplikowanym przedmiotem badań. Dodatkowo, ich zdolność do tworzenia związków o mieszanej walencyjności, gdzie poszczególne centra metaliczne znajdują się na innym formalnym stopniu utlenienia, a niesparowany elektron może być mniej lub bardziej współdzielony pomiędzy centra tworzące taki kompleks, powoduje, że są dobrymi systemami do analizy wewnątrzcząsteczkowych transferów elektronu. W czasie eksperymentów doświadczalnicy zaobserwowali ciekawe zjawisko elektrokatalizy rozpadu chloroformu przez niektóre ze skorpionianów. Badanie również i tego procesu było bardzo ciekawym wyzwaniem.

Metodologia przeprowadzonych przeze mnie obliczeń, w tym przepisy na dokładne obliczanie potencjałów utleniająco-redukujących centrów metalicznych, jak i analiza wpływu pewnych oddziaływań zwanych oddziaływaniami dyspersyjnymi, mogą być i są stosowane dla innych klas układów.

Jakie możliwości w czasie badań teoretycznych dała Panu wspomniana współpraca z zespołem doświadczalnym?

Bliska współpraca z eksperymentatorami – zespołem Piotra Romańczyka i Stefana Kurka z Politechniki Krakowskiej – była w moim przypadku kluczowa. Dzięki temu mogliśmy wzajemnie uzupełniać nasze braki w zrozumieniu różnych aspektów rozwiązywanych problemów, a ja mogłem bezpośrednio konfrontować rezultaty moich eksperymentów obliczeniowych z danymi doświadczalnymi.

Przy badaniach korzystał Pan z kilku kolejnych superkomputerów Cyfronetu. W jaki sposób udostępniane zasoby wpłynęły na Pańskie badania?

Po prostu bez zasobów Cyfronetu nie byłbym w stanie przeprowadzić moich badań. Każda kolejna generacja superkomputerów dawała nowe możliwości obliczeniowe, dzięki którym mogłem badać bardziej złożone układy lub wykonywać obliczenia

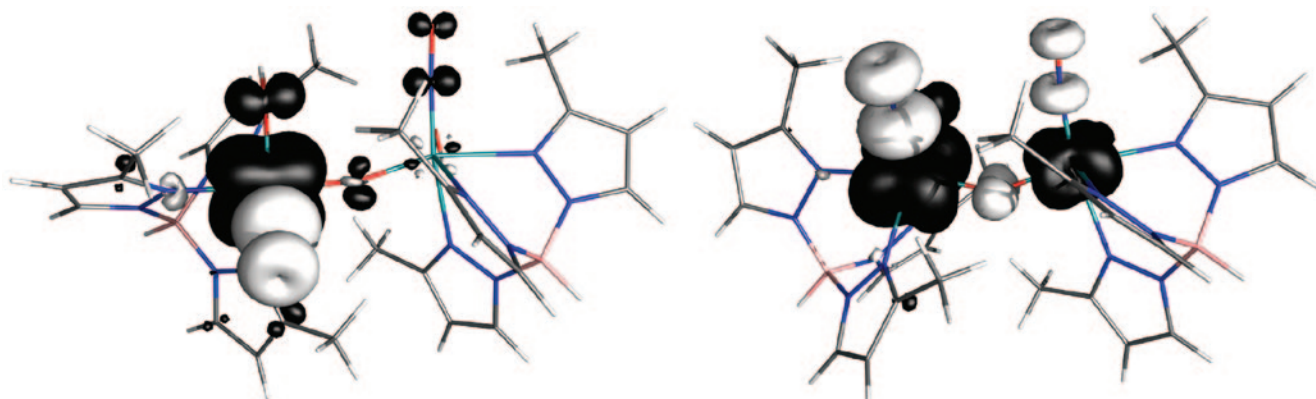
przy użyciu metod umożliwiających uzyskanie dokładniejszych wyników, bardziej zgodnych z dostępnymi danymi doświadczalnymi.

Czy na postawie procesu własnych badań pokusiłby się Pan o prognozę, w jakich kierunkach prowadzą naukę współczesne osiągnięcia technologiczne i odkrycia teoretyczne?

W ostatnich latach można zauważyć zwiększone znaczenie badań *in silico* w chemii, biochemii oraz naukach pokrewnych. Dzięki wykorzystywaniu superkomputerów można szybciej i bardziej efektywnie badać ciekawe układy, m.in. potencjalne leki czy też układy katalityczne. Również tak zwane uczenie maszynowe przyczyniło się do otrzymania interesujących wyników naukowych w naukach biochemicznych, umożliwiając np. przewidywanie struktur przestrzennych białek. Myślę, że będziemy mogli tworzyć lepsze, bardziej złożone modele interesujących nas układów, a to da nam lepszy wgląd w najważniejsze procesy chemiczne i biochemiczne.

Badania prowadzące do rozprawy doktorskiej są rozłożone w czasie i kończy się je z innym zestawem wiedzy i umiejętności, niż ten, z którym się je zaczynało. Jakiej porady udzieliłby Pan młodym naukowcom na początku tej drogi?

Na pewno poleciłbym, by pierwszy okres studiów poświęcili na rozbudowywanie swojej wiedzy o dostępnych metodach i technikach badawczych oraz nawiązali jak najszersze kontakty z różnymi naukowcami. Dzięki temu już na etapie doktoratu można uczestniczyć w bardzo ciekawych projektach badawczych, zobaczyć sposoby pracy w wielu grupach badawczych oraz mieć możliwość obserwacji i współuczestnictwa w opracowywaniu różnych raportów i publikacji. Dopiero w dalszej kolejności, na podstawie wcześniejszych doświadczeń, wybrałbym szczegółową tezę pracy, nad którą należy skoncentrować się w kolejnych latach. Na pewno każdemu rozpoczynającemu taką przygodę poradziłbym, by jak najwcześniej starał doskonalić się w opisywaniu swoich badań i przygotowaniu publikacji naukowych. Ta umiejętność przyda się nie tylko w trakcie pisania pracy doktorskiej.



Kontur gęstości spinowej uzyskanej dla jednego z badanych skorpionianów molibdenu w geometriach minimum energetycznego (po lewej) oraz maksymalnej delokalizacji niesparowanego elektronu (po prawej)