



Dr Mercedes Kukułka

Rozmowa z autorką pracy:

„Theoretical investigations on absorption and luminescence properties of selected organic species for potential applications in optoelectronics”

Jak przybliżyłaby Pani swoje badania osobie niezwiązanej z dziedziną?

Podstawowym celem moich badań była identyfikacja oraz zrozumienie, w oparciu o wyniki obliczeń kwantowo-chemicznych, związku pomiędzy szeroko rozumianą strukturą (geometria molekularna, struktura elektronowa) a właściwościami fotofizycznymi w wybranych układach organicznych o potencjalnym zastosowaniu w optoelektronice. Upraszczając, moje badania przyczyniły się do wskazania elementów struktury kilku grup związków chemicznych, które mają wpływ na to, że dany układ absorbuje bądź emituje promieniowanie.

Czy współczesna fotofizyka i fotochemia znajduje już zastosowanie w tak zwanym życiu codziennym, czy jesteśmy tu na etapie badań podstawowych?

Oczywiście, że znajduje! Wiadomo, że od odkrycia do wdrożenia mija sporo czasu, jednak w ciągu ostatnich lat jesteśmy świadkami bardzo dynamicznego rozwoju w zakresie nowych technologii. Spójrzmy chociaż na rozwój technologii wykorzystywanych przy produkcji monitorów ekranowych. Od odkrycia ciekłego kryształu (w 1888 r.) do skonstruowania pierwszego wyświetlacza ciekłokrystalicznego (ang. *Liquid-Crystal Display, LCD*) upłynął prawie wiek, a do momentu wyprodukowania na skalę przemysłową ekranu o przekątnej większej niż 10" – kolejne trzy dekady. Historia monitorów opartych na technologii OLED (ang. *Organic Light-Emitting Diode*) jest już znacznie krótsza. Zjawisko elektroluminescencji organicznych związków chemicznych zostało zaobserwowane po raz pierwszy w latach 50. XX w., pierwsze wydajne urządzenie zostało skonstruowane w 1987 r., a wyświetlacze OLED produkowane na skalę komercyjną to, podobnie jak w przypadku monitorów LCD, przełom XX i XXI w. Obecnie na rynku spotkamy także wyświetlacze QLED (ang. *Quantum dot Light-Emitting Diode*), wykorzystujące technologię kropek kwantowych. W tym przypadku idea narodziła się w latach 90. XX w., natomiast pierwsze telewizory QLED pojawiły się w sprzedaży już w 2013 r.

Konkurencyjny, rozwijający się globalny przemysł XXI w. ciągle poszukuje nowych materiałów, które będą oferować lepsze właściwości, czy które będzie cechować większa wydajność. Coraz częściej ośrodki naukowo-badawcze nawiązują bliską współpracę z przemysłem, co jest częściowo wspierane przez rozwiązania systemowe. Przedsiębiorstwa prowadzące działalność badawczo-rozwojową mogą bowiem korzystać z pewnych ulg podatkowych, natomiast naukowcom łatwiej jest zdobyć finansowanie na badania, jeśli mają one charakter aplikacyjny.

Nie bez znaczenia dla szybkiego rozwoju w badaniach nad nowymi materiałami jest też fakt upowszechnienia się badań teoretycznych. Analiza rezultatów badań *in silico* stanowi nie tylko podstawę do interpretacji danych eksperymentalnych, ale również pozwala na dogłębne zrozumienie relacji pomiędzy strukturą molekularną a własnościami układu, co jest kluczowe dla opracowywania nowych materiałów o pożądanych właściwościach.

Jakie dalsze wyzwania rysują się na horyzoncie i czy dostęp do komputerów dużej mocy zmienia coś w tym obrazie?

Wynik oddziaływania światła ze związkami chemicznymi nie zawsze jest łatwy do przewidzenia, a badanie stanów elektronowo wzbudzonych wciąż stanowi duże wyzwanie dla metod teoretycznych. W przypadku obliczeń własności zależ-

nych od tych stanów często konieczne jest zastosowanie bardziej zaawansowanych metod, które z kolei wymagają znacznie większych zasobów obliczeniowych, a przez to są ograniczone do układów o niewielkich rozmiarach. Dodatkowo, w poszukiwaniach zależności między strukturą związków chemicznych a ich aktywnością optyczną i własnościami fotochemicznymi coraz częściej wykorzystuje się metody uczenia maszynowego. W obydwu przypadkach dostęp do komputerów dużej mocy jest kluczowy.

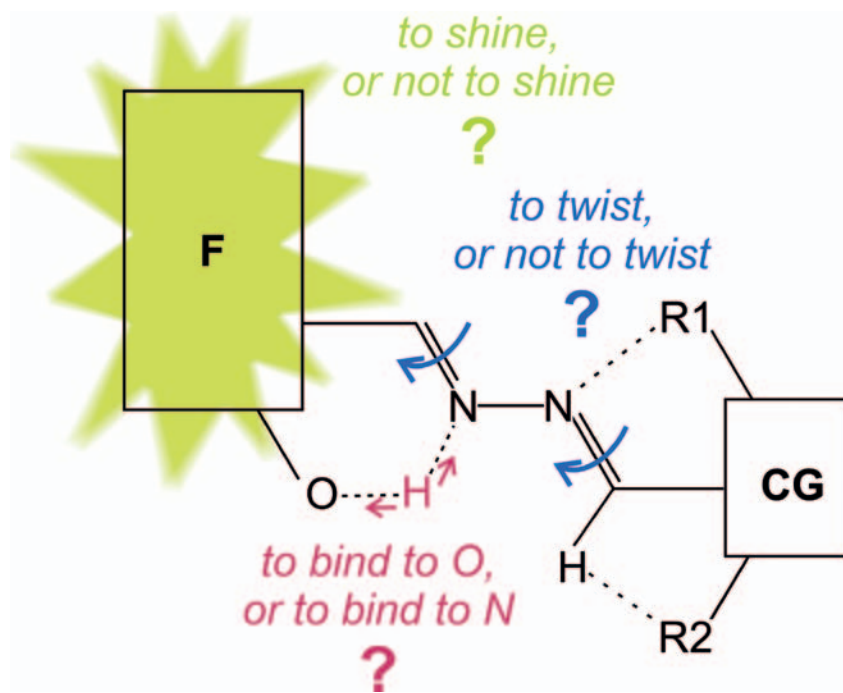
Czy Cyfronet zapewnił wystarczające wsparcie w zakresie dostępności oraz jakości zasobów obliczeniowych?

Bez wsparcia Cyfronetu realizacja moich badań byłaby praktycznie niemożliwa. Cyfronet zapewnił mi zarówno dostęp do oprogramowania naukowego, jak i niezbędnych mocy obliczeniowych. Nie sposób tu nie wspomnieć o prężnie

działającym dziale pomocy technicznej – zawsze mogłam liczyć na wsparcie i pomoc pracowników Centrum, a czas reakcji na zgłaszane problemy był ekspresowy.

Czy ma Pani jakieś rady lub spostrzeżenia dla studentów zainteresowanych podjęciem studiów doktoranckich?

Studia doktoranckie to bardzo angażujący czasowo etap w karierze młodego naukowca, wpływający w istotny sposób również na jego życie osobiste. Bez pasji i zainteresowania tematyką badań ukończenie go jest niezwykle trudne, o ile w ogóle możliwe. Należy też pamiętać, że doktorat to bieg długodystansowy, a nie sprint. Wyniki zazwyczaj nie przychodzą łatwo, nie każdy eksperyment się uda – trzeba uzbroić się w cierpliwość i być wytrwałym. Doktorat to nie tylko badania nad konkretnym tematem, to ogólny rozwój, zapoznanie ze środowiskiem pracy naukowej, nabycie większej samodzielności, umiejętności radzenia sobie z wyzwaniem, przyjmowanie porażek, realizacja celów mimo przeciwności losu. Takie doświadczenie ma ogromną wartość nie tylko w dalszej pracy jako naukowiec, ale ogólnie – w życiu codziennym.



Schematyczne przedstawienie zależności między strukturą molekularną a własnościami fotofizycznymi grupy ligandów typu zasad Schiffa. F – fluorofor, CG – grupa kontrolująca, R1 oraz R2 – podstawniki przyłączone do CG